



Thesis proposals for the autumn 2025

Interdisciplinary Research Institute of Grenoble (IRIG)
CEA-Grenoble, 17 rue des Martyrs, 38054 Grenoble Cedex 09 - France

<https://www.cea.fr/df/IRIG/>

IRIG in brief

The Interdisciplinary Research Institute of Grenoble (IRIG) conducts research based on 4 pillars:

- Biology & Health ;
- New technologies for energy and the environment ;
- Nanosciences (nanophysics & numerics) ;
- Cryotechnologies.

Physicists, chemists, biologists, physicians, computer scientists and mathematicians participate jointly in this fundamental research and the applications that result from it, giving the institute a remarkable capacity to respond to major societal challenges.

IRIG welcomes about 1000 people who carry out their research activities in a joint research unit (UMR). The 10 UMR of the institute are supervised by the [CEA](#) and [University Grenoble Alpes](#); some of them have additional trusteeship which may be the [CNRS](#), [Inserm](#) or [Inrae](#).

Everyone is working towards the same goal: to achieve excellent scientific results, explore the interface of basic and applied science and train young scientists. You may be one of them!

➤ **Biology & Health (10 proposals)**

Plants bioenergetics facing climate change - Structural and functional dynamics of Chloroplasts and Mitochondria to fluctuating temperatures

(La bioénergétique des plantes face au changement climatique - Dynamique structurale et fonctionnelle des chloroplastes et des mitochondries aux variations de températures)

The dynamic remodeling of plant chloroplasts and mitochondria in response to temperature variations is essential for understanding plant adaptation and resilience under changing environmental conditions. These organelles drive photosynthesis and cellular respiration, processes highly sensitive to temperature fluctuations and crucial for bioenergetics. This thesis employs a quantitative structural proteomics approach, using crosslinking mass spectrometry (XL-MS), to capture rapid changes in protein conformations and interactions within these organelles. By comparing **Arabidopsis thaliana**, a model plant, and **Arabis alpina**, an alpine species adapted to significant thermal shifts, this research explores the molecular mechanisms that enable rapid adaptation. XL-MS provides spatial data on protein interactions, coupled with functional bioenergetics measurements in mitochondria and chloroplasts, to reveal how these plants optimize energy production and manage thermal stress. The findings contribute to understanding plant resilience, with implications for agriculture and climate adaptation strategies.

(Le remodelage dynamique des chloroplastes et des mitochondries chez les plantes en réponse aux variations de température est essentiel pour comprendre l'adaptation et la résilience des plantes face aux changements environnementaux. Ces organites sont responsables de la photosynthèse et de la respiration cellulaire, processus essentiels à la bioénergétique et très sensibles aux fluctuations thermiques. Cette thèse utilise une approche de protéomique structurale quantitative par spectrométrie de masse de réticulation (crosslinking mass spectrometry, XL-MS) pour capturer les changements rapides dans les conformations et interactions protéiques de ces organites. En comparant **Arabidopsis thaliana**, une plante modèle, et **Arabis alpina**, une espèce alpine adaptée aux variations thermiques marquées, cette recherche explore les mécanismes moléculaires permettant une

adaptation rapide. Les données spatiales sur les interactions protéiques obtenues par XL-MS, couplées à des mesures bioénergétiques fonctionnelles sur les mitochondries et les chloroplastes, révèlent comment ces plantes optimisent la production d'énergie et gèrent le stress thermique. Les résultats contribuent à mieux comprendre la résilience des plantes, avec des implications pour l'agriculture et les stratégies d'adaptation au climat)

Thesis director & laboratory: Pascal ALBANESE & Gilles CURIEN (pascal.albanese@cea.fr)

[IRIG/LPCV](#)

SL-DRF-25-0343

Investigation of conformational heterogeneity and dynamics in Fluorescence Activating and Absorption-Shifting Tags (FAST)

(Etude de l'hétérogénéité conformationnelle et de la dynamique des marqueurs fluorescents de type fast.)

Fluorescent proteins, particularly Reversibly Switchable Fluorescent Proteins (RSFPs), have revolutionized advanced fluorescence imaging, paving the way for applications such as super-resolution microscopy. Among emerging alternatives, fluorogen-based reporters, such as the FAST (Fluorescence Activating and Absorption Shifting Tag) system, stand out due to their enhanced photostability and versatility. FAST operates via non-covalent binding of a small engineered protein to an organic fluorogen, which induces fluorescence and allowing real-time monitoring without chromophore maturation. However, challenges remain in optimizing these systems due to limited mechanistic understanding of fluorogen-protein interactions, binding dynamics, and photophysical behavior under illumination. This PhD project aims to characterize the binding modes of FAST systems at atomic resolution using multidimensional NMR spectroscopy, X-ray crystallography, and UV-visible spectroscopy. Recent findings suggest that fluorogens can adopt multiple binding modes, and that slight chemical modifications impact binding kinetics and fluorescence brightness. By integrating laser-based illumination in NMR investigations, we will further probe how light absorption affects fluorogen conformation and dynamics. The insights gained from this study will enable the rational design of optimized FAST variants, enhancing their performance for specific microscopy applications and advancing the field of fluorescence imaging.

(Les protéines fluorescentes, et en particulier les protéines fluorescentes réversiblement commutables (RSFPs), ont révolutionné l'imagerie par fluorescence avancée, ouvrant la voie à des applications comme la microscopie à super-résolution. Parmi les alternatives émergentes, les rapporteurs basés sur des fluorogènes, tels que les systèmes FAST (Fluorescence Activating and Absorption Shifting Tag) se distinguent par leur grande photostabilité et leur polyvalence. FAST fonctionne par liaison non covalente d'une petite protéine modifiée à un fluorogène organique, ce qui induit la fluorescence et permet un suivi en temps réel sans maturation du chromophore. Cependant, des défis subsistent dans l'optimisation de ces systèmes en raison d'une compréhension limitée des interactions fluorogène-protéine, des dynamiques de liaison et des comportements photophysiques sous illumination. Ce projet de thèse vise à caractériser les modes de liaison des systèmes FAST à une résolution atomique à l'aide de la spectroscopie RMN multidimensionnelle, de la cristallographie aux rayons X et de la spectroscopie UV-visible. Des résultats récents suggèrent que les fluorogènes peuvent adopter plusieurs modes de liaison et que de légères modifications chimiques affectent les cinétiques de liaison et l'intensité de la fluorescence. En intégrant un dispositif d'illumination laser dans les investigations RMN, nous explorerons plus avant comment l'absorption lumineuse influence la conformation et la dynamique des fluorogènes. Les connaissances ainsi acquises permettront de concevoir de manière rationnelle des variants optimisés de FAST, améliorant leurs performances pour des applications spécifiques en microscopie et faisant progresser le domaine de l'imagerie par fluorescence).

Thesis director & laboratory: Bernhard BRUTSCHER (bernhard.brutscher@ibs.fr) [IRIG/IBS](#)

SL-DRF-25-0456

Impact of constitutive activation of the Wnt/ β -Catenin signaling pathway on the function of extracellular vesicles in tumor progression - diagnostic and therapeutic perspectives

(Impact de l'activation constitutive de la voie de signalisation Wnt/ β -Caténine sur la fonction des vésicules extracellulaires dans la progression tumorale - perspectives diagnostiques et thérapeutiques)

The thesis project aims to characterize the link between constitutive activation of the Wnt/ β -catenin signaling pathway in cancers and small extracellular vesicles (sVEs), two major players in tumor progression and escape from the immune system. It follows on from an ongoing thesis (2023-2026, MESR funding) which aims to determine the role of the Wnt/ β -catenin pathway in regulating sVE biogenesis/secretion by cancer cells. Our recent data show that aberrant activation of this pathway, linked to a mutation in β -catenin itself, regulates several sVE biogenesis/secretion genes and induces their massive loading with microRNAs and oncogenic proteins (manuscript in preparation, oral communication FSEV 2024 congress). The student will use in vitro approaches (3D cell models, cell signaling, and microscopy), in vivo approaches (chorioallantoic membrane model), analyses of patient samples (serum, tumor) and bioinformatics analyses (transcriptomics, proteomics). The project will rely on IRIG platforms (Proteomics and Microscopy Platforms), ongoing collaboration with CNRGH (Dr. Yorg Tost, Epigenetics and Environment) and LETI/DTBS (Dr. Vincent Agache), as well as the COMETE national clinical network for endocrine tumors. Our cancer model is adrenocortical carcinoma (ACC). As β -catenin is mutated in many cancers, the joint study of Wnt/ β -catenin signaling, extracellular vesicle biogenesis and their function in the tumor microenvironment is essential to better understand the mechanisms underlying tumor progression and immune escape, with a view to developing new therapeutic approaches.

(Ce projet de thèse vise à caractériser le lien entre l'activation constitutive de la voie de signalisation Wnt/ β -caténine dans les cancers et les petites vésicules extracellulaires (sVE), deux acteurs majeurs de la progression tumorale et de l'échappement au système immunitaire. Il s'inscrit dans la continuité d'une thèse en cours (2023-2026, financement MESR) qui vise à déterminer le rôle de la voie Wnt/ β -caténine dans la régulation de la biogenèse/sécrétion des sVE par les cellules cancéreuses. Nos données récentes montrent que l'activation aberrante de cette voie, liée à une mutation de la β -caténine elle-même, régule plusieurs gènes de la biogenèse/sécrétion des sVE et induit leur chargement massif en microARN et protéines oncogéniques (manuscrit en préparation, communication orale congrès FSEV 2024). L'étudiant mettra en œuvre des approches in vitro (cultures 3D, signalisation cellulaire, microscopie), in vivo (modèle de la membrane chorioallantoïdienne), des analyses d'échantillons de patients (sérum, tumeur) et des analyses bioinformatiques (transcriptomique, protéomique). Le projet s'appuiera sur les plateformes de l'institut IRIG (Plateformes de Protéomique et de Microscopie), une collaboration en cours avec le CNRGH (Dr Yorg Tost, Epigénétique et environnement) et le LETI/DTBS (Dr Vincent Agache) ainsi que sur le réseau clinique national COMETE des tumeurs endocrines. Nous utiliserons comme modèle le cancer le carcinome corticosurrénalien (CCS). La β -caténine étant mutée dans de nombreux cancers, l'étude conjointe de la signalisation Wnt/ β -caténine, de la biogenèse des vésicules extracellulaires et de leur fonction dans le microenvironnement tumoral est essentielle pour mieux comprendre les mécanismes sous-jacents à la progression tumorale et à l'échappement immunitaire, en vue de développer de nouvelles approches thérapeutiques).

Thesis director & laboratory: Nadia CHERRADI (nadia.cherradi@cea.fr) [IRIG/BCI](#)
SL-DRF-25-0484

Interplay between ubiquitin signalling and transcriptional dynamics

(Rôle du système ubiquitine dans la dynamique transcriptionnelle)

Transcription is the first step in genome expression, defining both cellular identity and the response to stimuli. It serves as an integration point for numerous signalling pathways, where ubiquitination plays a crucial role in regulating the assembly and stability of protein complexes. A key interaction between transcription and ubiquitination is observed during the DNA damage response, involving RNA polymerase II, as well as the proteins CSA, CSB, and USP7. These three proteins are part of the ubiquitin system and have been associated with severe neurodevelopmental disorders. However, their involvement in the regulation of transcription, co-transcriptional RNA maturation, and their interaction with the ubiquitin system remain unexplored. This project aims to characterise the impact of CSA, CSB, and USP7 on active transcription and nascent RNA by implementing methodologies that capture the dynamics of these processes in human cells. This project will provide new mechanistic insights into transcriptional dynamics and the molecular basis of rare genetic diseases.

(La transcription constitue la première étape de l'expression du génome, définissant à la fois l'identité cellulaire et la réponse aux stimuli. Elle représente un point d'intégration pour de nombreuses voies de signalisation, où l'ubiquitination joue un rôle essentiel en régulant l'assemblage des complexes protéiques et leur stabilité. Une interaction clé entre la transcription et l'ubiquitination est observée lors de la réponse aux dommages de l'ADN, impliquant d'une part l'ARN polymérase II et d'autre part les protéines CSA, CSB et USP7. Ces trois protéines sont actrices du système ubiquitine et ont été associées à de sévères troubles neuro-développementaux. Cependant, leur implication dans la régulation de la transcription et la maturation co-transcriptionnelle de l'ARN, ainsi que leur interaction avec le système ubiquitine, demeurent encore inexplorées. Ce projet vise à caractériser l'impact de CSA, CSB et USP7 sur la transcription active et l'ARN naissant, en mettant en œuvre des méthodologies permettant de capturer la dynamique de ces processus dans des cellules humaines. Ce projet apportera de nouvelles connaissances mécanistiques sur la dynamique transcriptionnelle et sur les bases moléculaires de maladies génétiques rares).

Thesis director & laboratory: Marie-Odile FAUVARQUE & Camille SAYOU (marie-odile.fauvarque@cea.fr) [IRIG/BGE](#)
SL-DRF-25-0494

Characterisation of cerebrovascular changes during pre-eclampsia: what role in the development of long-term maternal dementia?

(Caractérisation des modifications cérébrovasculaires au cours de la prééclampsie: quel rôle dans le développement d'une démence maternelle à long terme ?)

Pre-eclampsia (PE) is a specific complication of pregnancy associated with hypertension and hypoperfusion of the placenta, as well as an elevated concentration of circulating inflammatory factors secreted by the placenta, leading to an increased risk of adverse neonatal outcomes for the foetus and mother, as well as consequences for neurovascular function. However, PE is not confined to pregnancy and, more than 20 years later, women are still at increased risk of stroke and cognitive impairment. Clinical studies have shown that these patients have brain lesions on MRI. MAB2's work on a mouse model of PE has demonstrated the direct involvement of these inflammatory factors, including prokineticins (PROKs) and their receptors. In a cellular model of the blood-brain barrier, we have shown that PROKs modify vascular permeability. Otherwise, our recent results demonstrate a direct link between the pre-eclamptic event and the development of late brain lesions and inflammation. In addition, recent metabolomics and proteomics results show strong perturbations in the genome-wide histone modification profile that could be involved in vascular alterations and the development of

vascular and/or neurodegenerative dementia. The aim of the PhD project is to characterise the vascular changes that occur at the time of PE and their long-term consequences on cognitive function, and to identify potential therapeutic targets for preventive treatment. These objectives will be addressed by studies using the mouse model of PE. The studies will draw on the expertise of the team and on collaborations with experts in the blood-brain interface, MRI and behavioural tests, as well as in the analysis of histone modifications.

(La pré-éclampsie (PE) est une complication spécifique de la grossesse associée à l'hypertension et à l'hypoperfusion du placenta, ainsi qu'à une concentration élevée de facteurs inflammatoires circulants sécrétés par le placenta, entraînant un risque accru d'issues néonatales défavorables pour le fœtus et la mère, ainsi que des conséquences pour la fonction neurovasculaire. Cependant, la PE ne se limite pas à la grossesse et, plus de 20 ans plus tard, les femmes sont toujours exposées à un risque accru d'accident vasculaire cérébral et de troubles cognitifs. Des études cliniques ont montré que ces patientes présentent des lésions cérébrales à l'IRM. Les travaux de MAB2 sur un modèle murin de PE ont démontré l'implication directe de ces facteurs inflammatoires, dont les prokinétines (PROKs) et de leurs récepteurs. Nous avons montré dans un modèle cellulaire de barrière hématoencéphalique que les PROKs modifient la perméabilité vasculaire. Sinon, nos résultats récents démontrent un lien direct entre l'événement pré-éclampsique et l'apparition de lésions cérébrales tardives et de l'inflammation. De plus, Enfin, des résultats récents de métabolomique et de protéomique montrent de fortes perturbations du profil de modification des histones à l'échelle du génome qui pourraient être impliquées dans les altérations vasculaires et le développement de la démence vasculaire et/ou neurodégénérative. L'objectif du projet de doctorat est de caractériser les changements vasculaires qui se produisent au moment de la PE et leurs conséquences à long terme sur les fonctions cognitives, et de déterminer des cibles thérapeutiques potentielles pour un traitement préventif. Ces objectifs seront abordés par des études utilisant le modèle murin de la PE. Les études s'appuieront sur l'expertise de l'équipe et sur des collaborations avec des experts de l'interface sang-cerveau, de l'IRM et des tests comportementaux, ainsi que de l'analyse des modifications des histones).

Thesis director & laboratory: Christel MARQUETTE (christel.marquette@cea.fr) [IRIG/BCI](#)
SL-DRF-25-0411

Nitrogenase Active Site Assembly: What Distinguishes a Nitrogenase from a Scaffold?

(Assemblage de la Nitrogénase: Qu'est ce qui distingue une nitrogénase d'une protéine échafaudage ?)

The challenges posed by climate change and soil degradation call for urgent solutions to reduce greenhouse gas emissions and reliance on nitrogen fertilizers while ensuring sufficient crop yields to feed a growing global population. A natural solution lies in the use of nitrogenase, a bacterial enzyme capable of converting atmospheric nitrogen into ammonia, which can be directly assimilated by plants. However, the biosynthesis of its metal cofactor, FeMo-co, is a complex process that requires the coordinated action of numerous proteins.

This PhD project aims to streamline this complex process by studying simplified nitrogenase systems found in certain organisms, which use fewer proteins, notably by combining multiple functions into single proteins. By conducting comparative structural and functional studies, we seek to understand how these simplified systems work and how they can be adapted for use in crops like cereals, potentially allowing large-scale cultivation without heavy nitrogen fertilizer use.

This project is a collaboration between leading teams at CEA's Institute of Structural Biology and CSIC Madrid, specializing in metalloprotein structure-function analysis and the biochemistry and genetics of nitrogenase assembly. The successful candidate will work in a cutting-edge research environment, gaining international experience and valuable skills for a future career in academic research or R&D.

(Face aux crises du changement climatique et de la dégradation des sols, il est urgent de trouver des solutions pour réduire les émissions de gaz à effet de serre et la dépendance aux engrais azotés, tout en garantissant des rendements agricoles suffisants pour nourrir une population mondiale croissante. Une solution naturelle réside dans l'utilisation de la nitrogénase, une enzyme bactérienne capable de fixer l'azote atmosphérique en ammoniac, une forme directement assimilable par les plantes. Cependant, la biosynthèse de son cofacteur métallique, le FeMo-co, est un processus complexe nécessitant l'action coordonnée de nombreuses protéines.

L'objectif de cette thèse est de simplifier ce processus en étudiant des systèmes de maturation de la nitrogénase trouvés dans certains organismes, où un nombre réduit de protéines est utilisé, notamment grâce à la combinaison de plusieurs fonctions en une seule. Par une étude structurale et fonctionnelle comparative, nous chercherons à comprendre le rôle précis de chaque élément et comment simplifier ce système tout en conservant une activité optimale. Une telle avancée permettrait d'intégrer la capacité de fixation de l'azote dans les céréales, réduisant ainsi la dépendance aux engrais azotés.

Ce projet est issu d'une collaboration entre des équipes du CEA à l'Institut de Biologie Structurale et du CSIC à Madrid, reconnues pour leur expertise dans l'étude structurale des métalloprotéines ainsi que la biochimie et la génétique de la machinerie d'assemblage de la nitrogénase. Le doctorant bénéficiera d'un environnement scientifique de pointe, propice à une formation complète et enrichissante, pour une carrière future en recherche académique ou en R&D).

Thesis director & laboratory: Yvain NICOLET (yvain.nicolet@ibs.fr) [IRIG/IBS](#)

SL-DRF-25-0267

Towards a detailed understanding of the regulation of gene expression by acetylation and lactylation of histone proteins

(Vers une compréhension fine de la régulation de l'expression des gènes par l'acétylation et la lactylation des protéines histones)

In eukaryotic cells, DNA is wrapped around histone proteins to form chromatin. Dynamic modification of histones by various chemical structures enables fine regulation of gene expression. Alterations in these complex regulatory mechanisms are at the root of many diseases. Histone lysine acetylation is known to induce gene expression. Other structures can be added to histones, whose effects on transcription remain largely to be elucidated. Most of them, like lactylation discovered in 2019, depend on cellular metabolism. We have begun to study lactylation in the context of murine spermatogenesis. This process of cellular differentiation is a model of choice for studying the regulation of transcription, due to the dramatic changes in chromatin composition and the gene expression program. We have generated novel epigenetic profiles consisting of the genome-wide distribution of acetylated and lactylated marks on three histone H3 lysines. The aim of this thesis is to contribute to the deciphering of the "histone code", firstly by studying the role of lactylations on the transcriptional program. Secondly, the prediction of chromatin states will be refined by integrating our new data with existing epigenomic data at the two studied cellular stages, within neural network models.

(Dans les cellules eucaryotes, l'ADN s'enroule autour de protéines histones pour former la chromatine. La modification dynamique des histones par diverses structures chimiques permet de réguler finement l'expression des gènes. Des altérations dans ces mécanismes complexes de régulation sont à l'origine de nombreuses maladies. L'acétylation des lysines d'histones est connue pour induire l'expression des gènes. D'autres structures peuvent être ajoutées sur les histones, dont les effets sur la transcription restent largement à élucider. La plupart d'entre elles, comme la lactylation découverte en 2019, dépendent du métabolisme cellulaire. Nous avons commencé l'étude de la lactylation dans la spermatogenèse murine. Ce processus de différenciation cellulaire constitue en effet un modèle de choix pour étudier la régulation de la transcription, du fait de changements spectaculaires dans la composition de la chromatine et dans le programme d'expression génique. Nous avons

général de nouveaux profils épigénétiques consistant en la distribution sur le génome de marques acétylées et lactylées sur trois lysines de l'histone H3. L'objet de cette thèse est de contribuer au déchiffrement du « code histone », d'abord en étudiant le rôle des lactylations sur le programme transcriptionnel. Ensuite, la prédiction d'états chromatiniens sera raffinée en intégrant au sein de modèles de réseaux de neurones nos nouvelles données à l'ensemble des données épigénomiques existant aux deux stades cellulaires étudiés).

Thesis director & laboratory: Delphine PFLIEGER (delphine.pflieger@cea.fr) [IRIG/BGE](#)

SL-DRF-25-0457

Antimicrobial coatings

(Développement de nouveaux matériaux antimicrobiens)

The development of surfaces that limit microbial proliferation is a crucial public health issue. In the context of manned flights to remote destinations such as low Earth orbit, the Moon and possibly Mars, biological contamination represents a significant threat to crew health and the preservation of space equipment. The microflora carried by the crew in enclosed habitats constitutes an unavoidable risk, accentuated by prolonged periods of isolation and dependence on closed environment life support systems. In addition to the risks to astronauts' health, biocontamination is known to damage critical equipment on board spacecraft. Furthermore, micro-organisms exposed to the space environment can develop resistance and mutate, transforming benign microbes into pathogens. To mitigate these risks, effective measures, such as filtration systems and self-decontaminating surfaces that limit bacterial proliferation, need to be put in place. The MATISS experiment (2016-2025), in which the SyMMES and PRISM laboratories were involved, explored the use of hydrophobic coatings to reduce biocontamination on board the ISS, but further improvements are needed, in particular to find alternative solutions to perfluorinated agents and antibiotics, but also applicable to a wide range of materials. Such advances could have a wide range of applications beyond space, including food safety (packaging), implantable materials, drinking water treatment, public transport hygiene, etc. The aim of this collaborative thesis between SyMMES and CEA-Leti in Grenoble is to develop sustainable antimicrobial coatings free from harmful substances, by exploring different functionalization methods, such as the formation of self-assembled monolayers, electropolymerization on conductive materials, and in a highly original way by implementing a new cold atmospheric plasma deposition method, suitable for large surfaces, and above all applicable to a wide range of different materials.

(Le développement de surface limitant la prolifération microbienne est un enjeu crucial pour la santé publique. Dans le contexte des vols habités vers des destinations éloignées telles que l'orbite terrestre basse, la Lune et éventuellement Mars, la contamination biologique représente une menace significative pour la santé de l'équipage et la préservation des équipements spatiaux. La microflore transportée par l'équipage dans les habitats clos constitue un risque inévitable, accentué par les périodes prolongées d'isolement et de dépendance des systèmes de support de vie en milieu fermé. Outre les risques pour la santé des astronautes, il est connu que la biocontamination peut endommager les équipements critiques à bord des vaisseaux spatiaux. Par ailleurs, les micro-organismes, exposés à l'environnement spatial, peuvent développer une résistance et muter, transformant les microbes bénins en agents pathogènes. Afin d'atténuer ces risques, des mesures efficaces, telles que des systèmes de filtration et des surfaces autodécontaminantes limitant la prolifération bactérienne, doivent être mises en place. L'expérience MATISS (2016-2025), à laquelle ont été associés les laboratoires SyMMES et PRISM, a exploré l'utilisation de revêtements hydrophobes pour réduire la bio-contamination à bord de l'ISS, mais des améliorations sont nécessaires, notamment pour trouver des solutions alternatives aux agents perfluorés et aux antibiotiques mais aussi applicable sur une large gamme de matériaux. De telles avancées peuvent avoir de nombreuses applications, bien plus larges que le domaine spatial, comme la sécurité alimentaire (emballages), les matériaux implantables, le traitement des adductions d'eau potable, l'hygiène des transports publics, etc. Cette thèse collaborative entre le SyMMES et le CEA-Leti à Grenoble vise à développer des couches antimicrobiennes durables sans substances nocives, en explorant différentes voies de fonctionnalisation, telle que

la formation de monocouche auto-assemblées, l'électropolymérisation sur matériaux conducteurs, et de manière très originale en mettant en œuvre une nouvelle méthode de dépôt par plasma atmosphérique froid, adaptée aux grandes surfaces, et surtout applicable à un large panel de matériaux de différente nature).

Thesis director & laboratory: Yoann ROUPIOZ & Guillaume NONGLATON (yoann.roupioz@cea.fr)
[IRIG/SyMMES](#)
SL-DRF-25-0197

Unraveling the mechanisms of enzymatic carbon fixation

(Élucider le mécanisme de la fixation enzymatique du carbone)

The Synchrotron Group at the Institut de Biologie Structurale in Grenoble is currently developing an innovative method called TR-FOX (Time-Resolved Functional Oscillation Crystallography). This technique aims to elucidate, firstly, the global dynamics of biological macromolecules in action and, secondly, their fine catalytic mechanism. It relies on the use of an injector capable of depositing onto the crystal, during the course of the X-ray diffraction data collection, a nanoliter droplet containing the substrate and cofactor of the studied reaction. This triggers the enzymatic reaction within the crystal. The approach can be combined with UV-Visible absorption spectroscopy to characterize the reaction kinetics more precisely. The goal is to obtain a series of structures during the catalytic cycle in order to make a molecular movie depicting the functioning of the enzyme. This thesis has two objectives: (i) improve and validate the TR-FOX method and, (ii) study the catalytic mechanism of two enzymes involved in carbon fixation either by capture or conversion of CO₂.

(Le groupe Synchrotron de l'Institut de Biologie Structurale de Grenoble développe actuellement une méthode innovante appelée TR-FOX (Time-Resolved Functional Oscillation Crystallography). Cette technique vise à élucider, d'une part, la dynamique globale des macromolécules biologiques en fonctionnement, et d'autre part, les détails de leur mécanisme catalytique. Elle repose sur l'utilisation d'un injecteur capable de déposer sur l'échantillon cristallin, durant l'enregistrement des données de diffraction, une gouttelette de quelques nanolitres contenant les substrat et cofacteur de la réaction étudiée. Cela déclenche ainsi une réaction enzymatique au sein du cristal. Cette approche peut être couplée à la spectroscopie d'absorption UV-Visible pour caractériser plus précisément la cinétique de la réaction. L'objectif est d'obtenir une série de structures représentant différents états du cycle catalytique, permettant ainsi la réalisation d'un film moléculaire du fonctionnement de l'enzyme. Cette thèse poursuit un double objectif : (i) Améliorer et valider la méthode TR-FOX, (ii) Élucider le mécanisme catalytique de deux enzymes impliquées dans la fixation du carbone soit par capture soit par conversion du CO₂).

Thesis director & laboratory: Antoine ROYANT & Sylvain ENGILBERGE (antoine.royant@ibs.fr)
[IRIG/IBS](#)
SL-DRF-25-0436

Immunogenicity of de novo designed HIV-1 Env MPER-FP immunogens

(Immunogénicité d'immunogènes MPER-FP conçus *de novo*)

No vaccine has yet been developed that is capable of inducing broadly neutralizing antibodies (bnAb) to protect from HIV-1 infection, but much progress has been made to understand the complex antibody response targeting the Env glycoprotein. Native Env or subunit antigens of Env have been shown to interact, if at all, only poorly with germ line versions, so called unmutated common ancestors (UCA) of bnAbs, which represent naïve B cell receptors. Here we propose to characterize next generation Env antigens based on the highly conserved membrane proximal external region (MPER) of the gp41 subunit of Env. We have shown that MPER bnAbs interact with nanomolar affinity with a late fusion intermediate

conformation of gp41. This revealed that MPER bnAbs not only contact MPER, but also the hydrophobic fusion peptide (FP) thereby extending the linear MPER epitope to a more complex three-dimensional epitope. Based on this, we propose that the hydrophobic fusion peptide is part of the MPER bnAb epitope and required to activate naïve BCRs containing hydrophobic motifs in their HCDR3. We have now constructed de novo MPER-FP scaffolds that interact with MPER bnAbs and their precursors with high nanomolar affinity. Here we propose to test, whether these scaffolds can bind efficiently to naïve B cell receptors from human and cynomolgus macaques. We will isolate antibody genes from MPER-FP-specific BCRs from naïve B cells, reconstruct the corresponding precursor antibodies, and analyze their function and structure in order to provide proof of principle for a future germ line targeting approach employing the selected MPER-FP scaffold in preclinical and/or clinical vaccination studies.

(Aucun vaccin capable d'induire des anticorps neutralisants à large spectre (bnAb) protégeant contre l'infection par le VIH-1 n'a encore été mis au point, mais de nombreux progrès ont été réalisés pour comprendre la réponse anticorps complexe ciblant la glycoprotéine d'enveloppe (Env). Il a été démontré que les antigènes natifs de l'Env ou des sous-unités de l'Env n'interagissent pas ou que faiblement avec les versions germinales des bnAbs qui représentent les récepteurs naïfs des cellules B (BCR). Nous proposons ici de caractériser des antigènes Env nouvelle génération sur la base de la région externe proximale de la membrane (MPER), très conservée, de la sous-unité gp41 d'Env. Nous avons montré que les bnAbs MPER interagissent avec une affinité nanomolaire avec une conformation intermédiaire de fusion de la gp41. Cela a révélé que les bnAbs MPER n'entrent pas seulement en contact avec le MPER, mais aussi avec le peptide de fusion hydrophobe (FP), étendant ainsi l'épitope linéaire du MPER à un épitope tridimensionnel plus complexe. En se basant sur cette observation, nous proposons que le peptide de fusion hydrophobe fasse partie de l'épitope MPER et soit nécessaire pour activer les BCR naïfs contenant des motifs hydrophobes dans leur HCDR3. Nous avons construit de novo des « scaffold » MPER-FP qui interagissent avec les bnAbs MPER et leurs précurseurs avec une affinité nanomolaire. Nous proposons ici de tester si ces nouvelles « scaffolds » MPER-FP peuvent se lier efficacement aux récepteurs de cellules B naïves humaines et dérivées de macaques cynomolgus. Nous isolerons les gènes d'anticorps des BCR spécifiques au MPER-FP des cellules B naïves, reconstruirons les anticorps précurseurs correspondants et analyserons leur fonction et leur structure afin de fournir une preuve de principe pour une future approche de ciblage des lignées germinales utilisant la meilleure construction MPER-FP sélectionnée dans des études de vaccination précliniques et/ou cliniques).

Thesis director & laboratory: Winfried WEISSENHORN (weissenhorn.winfried@ibs.fr) [IRIG/IBS](#)
SL-DRF-25-0474

➤ **Energy & Environment (3 proposals)**

Biogas upgrading with an advanced Biorefinery for CO2 conversion

(Valorisation du biogaz par conversion du CO2 avec une biorafinerie avancée)

The use of renewable energy sources is a major challenge for the coming decades. One way of meeting the growing demand for energy is to valorize waste. Among the various strategies currently developed, the recovery of biogas from anaerobic digestion plants appears to be a promising approach. Biogas is composed mainly of methane, but also of unused CO2 (around 40%). The project proposed here is to reform biogas using a renewable biohydrogen source to convert the remaining CO2 into pure CH4. We propose to set up a stand-alone advanced biorefinery that will combine photoproduction of hydrogen from waste (e.g.: lactoserum) by the bacterium *Rhodobacter capsulatus* combined with the CO2 present in the biogas in a biomethanation unit containing a culture of *Methanococcus maripaludis*, a

methanogenic archaea able to produce CH₄ from CO₂ and H₂ only (according to the Sabatier reaction). The aim is to produce CH₄ in an energy-efficient and environmentally-friendly way.

(L'utilisation de sources d'énergie renouvelables est un défi majeur pour les décennies à venir. L'une des façons de répondre à la demande croissante d'énergie est de valoriser les déchets. Parmi les différentes stratégies actuellement développées, la valorisation de biogaz issu des stations de méthanisation apparaît comme une approche prometteuse. En effet, le biogaz est composé majoritairement de méthane, mais aussi de CO₂ (environ 40%) non utilisé. Le projet proposé ici est le reformage du biogaz en utilisant une source de biohydrogène renouvelable pour convertir le CO₂ restant en CH₄ pur. Nous proposons de mettre en place une bioraffinerie avancée autonome qui combinera la photoproduction d'hydrogène à partir de déchets de l'industrie laitière réalisée par la bactérie *Rhodobacter capsulatus* combiné avec le CO₂ présent dans le biogaz dans une unité de biométhanation contenant une culture de *Methanococcus maripaludis*, une archée méthanogène capable de produire du CH₄ à partir de CO₂ et de H₂ selon la réaction de Sabatier. Le but est de produire du méthane de façon non énergivore et respectueuse de l'environnement.)

Thesis director & laboratory: Christine CAVAZZA & Julien PÉRARD (christine.cavazza@cea.fr)
[IRIG/CBM](#)
SL-DRF-25-0286

Deciphering the roles of surface chemistry and multi-scale structuration in controlling the storage performances of graphene-based supercapacitors

(Décrypter les rôles de la chimie de surface et de la structuration multi-échelle dans/sur le contrôle des performances de stockage des supercondensateurs à base de graphène)

The project's objective is to advance fundamental research by elucidating the intrinsic relationship between the properties of graphene-based material and their electrochemical storage performances in supercapacitor cells, thanks to the combination of basic and advanced characterization techniques, particularly adapted to the investigation of the evolutions of the surface chemistry and multi-scale structure upon cycling. These findings will enable to provide a multi-scale understanding of storage mechanism and will help to further design materials with enhanced storage properties.

(L'objectif de ce projet de recherche fondamentale est d'élucider les corrélations existantes, entre les propriétés des matériaux à base de graphène et leurs performances de stockage électrochimique, en dispositif supercondensateur. L'importance de la chimie de surface et celle de la structure multi-échelle de ces matériaux seront spécifiquement étudiées, car la plupart des propriétés physico-chimiques de ces matériaux découlent de ces 2 paramètres. Aussi, des matériaux spécifiquement conçus pour présenter des chimies de surface différentes (dopage N, différents degrés de réduction...) et différentes structurations seront synthétisés et caractérisés, en utilisant des méthodes classiques à avancées (CV-SANS, in-situ SANS...), spécifiquement adaptées à l'étude de ces propriétés et de leur évolution en cours de cyclage électrochimique. Les résultats obtenus permettront de fournir une compréhension multi-échelle du mécanisme de stockage et aideront à concevoir des matériaux dotés de propriétés de stockage optimisées).

Thesis director & laboratory: Florence DUCLAIROIR & Hakima MENDIL-JAKANI
(florence.duclairoir@cea.fr) [IRIG/SYMMES](#)

SL-DRF-25-0373

Adaptation and degradation of PFAS by the bacterium *Pseudomonas putida*

(Adaptation et Dégradation des PFAS par la bactérie *Pseudomonas putida*)

Per- and polyfluoroalkyl substances (PFASs) are a class of very diverse chemicals found in products of daily use, that are highly persistent and encountered everywhere in the environment. They accumulate/biomagnify within the natural food chain and show a relatively high toxicity including the alternative products developed after the ban of the legacy compounds. Therefore, the world is facing a situation of great concern all the more as the retreatment of contaminated soils, sediments and water is difficult and costly. One of the main challenges is because various PFASs have quite different physicochemical properties but are often encountered in mixture making it difficult to find a technology efficient to remove all of them. We propose to pave the way towards another approach for PFASs elimination, bioremediation that is known to be a good alternative to chemical or physical methods for removing toxics (self-sustainability, cheaper, working in milder conditions, and often with dissolved and sorbed contaminants). A few bacteria have been described to be able to partially modify/degrade some PFASs. However, except the aspect of PFAS transformation, no data are available concerning their adaptation to PFAS exposure. A few projects are focusing on finding enzymes implicated in the degradation per se but if we want to use bacterial cultures and not enzymes, many other parameters need to be taken into account to set up a performant strain and hence a performant process. Therefore, we propose to analyze in depth the response to several PFASs of the PFAS degrading strain *Pseudomonas putida* ATCC 17514 in term of degradation, adaptation to a potential toxicity and metabolism adjustment. The analyses will mainly rely on a proteomic approach that is a very powerful technique to analyze global responses without a priori, and has never been done to characterize PFASs toxicity or fluorinated compounds metabolism in bacteria. The ultimate goal after this bootstrap project will be to engineer or select a robust and efficient strain capable of biodegrading PFASs.

(Les substances per- et polyfluoroalkyles (PFAS) sont une classe de produits chimiques très variés que l'on trouve dans les produits d'usage quotidien qui sont très persistants. Elles s'accumulent dans la chaîne alimentaire naturelle et présentent une toxicité relativement élevée, y compris avec les « nouveaux » PFAS mis au point après l'interdiction des PAFS tels que le PFOA. Le monde est donc confronté à une situation très préoccupante, d'autant plus que le retraitement des sols, des sédiments ou de l'eau contaminés est difficile et coûteux. L'un des principaux défis réside dans le fait que les différents PFAS ont des propriétés physicochimiques très différentes, mais qu'ils sont souvent présents en mélange, ce qui rend difficile la mise au point d'une technologie efficace pour les éliminer tous. Nous proposons d'ouvrir la voie à une autre approche pour leur élimination, la bioremédiation, connue pour être une alternative efficace aux méthodes chimiques ou physiques d'élimination des substances toxiques (autosuffisance, moins cher, travail dans des conditions plus douces). Quelques bactéries ont été décrites comme étant capables de modifier/dégrader partiellement certains PFAS. Cependant, à l'exception de la transformation des PFAS, aucune donnée n'est disponible concernant leur adaptation à l'exposition aux PFAS. Quelques projets se concentrent sur la recherche d'enzymes impliquées dans la dégradation en tant que telle, mais si nous voulons utiliser des cultures bactériennes et non des enzymes, de nombreux autres paramètres doivent être pris en compte pour mettre en place une souche performante et, par conséquent, un processus performant. Par conséquent, nous proposons d'analyser en détail la réponse à plusieurs PFAS, de la souche dégradant les PFAS ATCC 17514 en termes de dégradation, d'adaptation à une toxicité potentielle et d'ajustement du métabolisme. Les analyses s'appuieront principalement sur une approche protéomique qui est une technique très puissante pour analyser les réponses globales sans a priori, et qui n'a jamais été utilisée pour caractériser la toxicité des PFASs ou le métabolisme des composés fluorés chez les bactéries. Le but ultime de ce projet sera de créer ou de sélectionner une souche robuste et efficace capable de biodégrader les PFASs).

Thesis director & laboratory: Cécile LELONG (cecile.lelong@cea.fr) [IRIG/MEM](#)

SL-DRF-25-0333

➤ Nanophysics and numerics (5 proposals)

Development of a miniature, ultra-sensitive magnetic field sensor for space exploration

(Capteur magnétique ultrasensible pour des explorations spatiales)

The magnetic field is essential for understanding our solar system and the Earth's geomagnetism, as well as for studying solar eruptions and their impact on the Earth and our technological infrastructures. All space missions designed for the exploration of the solar system or the monitoring of our space environment carry magnetometers, which have excellent resolution but are very heavy and cumbersome. As a result, they are not suited to the new miniature satellites (Cubesat) that are about to revolutionize space exploration. This is the reason why the Centre National d'Etudes Spatiales (CNES, the French space agency) is supporting the development of new sensors for measuring magnetic fields in space.

In this context, Spintec and the Laboratoire de Physique et Chimie de l'Environnement et de l'Espace (LPC2E, Orléans) work together in a long-standing partnership to develop a single miniature sensor with a reduction in mass of a factor of 10 to 20 and with a as good or better detectivity (of $\sim 0.1 - 1$ pT/sqrt(Hz)). The sensor we propose combines a magnetic tunnel junction as the sensor's sensitive element, a flux concentrator to amplify the field to be measured and a modulation technique to reduce sensor noise. Finally, a feedback loop ensures linearity and immunity to thermal drift. The magnetic tunnel junction with the flux concentrators are already available at Spintec [1].

The PhD project will first focus on further optimizing the material stack and the design of the flux concentrator. Then the development of the modulation using a magnetic field chopping technique will be carried on. Two innovative paths will be explored. (i) The first solution is to develop an electrically controllable magnetic “short-circuit” in the flux concentrator's air-gap that would trap the field lines; this magnetic switch would be opened and closed at high frequency to chop the field. Such switch would be made of a combination of a piezoelectric and a magnetostrictive material to electrically tune the susceptibility of the magnetic switch. (ii) The second solution is the use of a micro-electromechanical system (MEMS): the junction will be placed on a vibrating beam that moves in and out of the flux concentrator's air gap.

The MTJs and flux concentrators will be deposited, patterned and characterized at Spintec. The development of the modulation will be performed in collaboration with IEMN in Lille and C2N in Palaiseau.

[1] S. Manceau et al. “Large amplification of the sensitivity of symmetric-response magnetic tunnel junctions with a high gain flux concentrator” Appl. Phys. Lett. 123, 082405 (2023)

(L'objectif est de développer un magnétomètre ultra-sensible et miniature en utilisant des jonctions tunnel magnétiques et les techniques de microfabrication issues de la microélectronique. Ce magnétomètre, s'il atteint les performances attendues, pourrait remplacer les magnétomètres utilisés actuellement sur les missions spatiales avec un gain de masse d'un facteur 10 à 20.

Dans cette thèse, nous envisageons d'optimiser les jonctions tunnel magnétiques en développant à Spintec un nouvel empilement inversé sur le nouveau bâti de dépôt du laboratoire, à l'état de l'art industriel. De plus, pour réduire encore davantage le bruit du capteur, nous explorerons l'idée est d'un hachage du champ à mesurer (basse fréquence) afin de le convertir en un champ à une fréquence plus élevée pour laquelle les jonctions tunnel magnétiques sont peu bruyantes.

Le travail de thèse comprendra le dépôt de couches minces magnétiques, la micro-fabrication, des mesures électriques et magnétiques et des simulations numériques (micromagnétiques et électromagnétiques).

Thesis director & laboratory: Claire BARADUC & Hélène BEA (claire.baraduc@cea.fr) [IRIG/SPINTEC](#)

SL-DRF-25-0440

Strain field imaging in semiconductors: from materials to devices

(Imagerie des champs de déformation en microélectronique: des matériaux aux composants)

This subject addresses the visualization and quantification of deformation fields in semiconductor materials, using synchrotron radiation techniques. The control of the deformation is fundamental to optimize the electronic transport, mechanical and thermal properties.

In a dual technique approach we will combine the determination of the local deviatoric strain tensor by scanning the sample under a polychromatic nano beam (μ Laue) and a monochromatic full field imaging with a larger beam (dark field x ray microscopy, DFXM).

New developments of the analysis will be focused on 1/ the improvement of the accuracy and speed of the quantitative strain field determination, 2/ the analysis of strain gradient distributions in the materials, and 3/ the determination of the dynamic strain field in piezoelectric materials through stroboscopic measurements. To illustrate these points, three scientific cases corresponding to relevant microelectronic materials of increasing complexity will be studied:

- 1- Static strain fields surrounding metallic contacts, such as high-density through silicon vias (TSV) in CMOS technology.
- 2- Strain gradients in Ge/GeSn complex heteroepitaxial structures with compositional variations along the growth direction.
- 3- Dynamical strain in LiNbO₃ surface acoustic wave resonators with resonance frequency in the MHz range bulk

Establishing this approach will mean moving a step forward towards more efficient microelectronics and strain engineering.

(Ce sujet traite de la visualisation et de la quantification des champs de déformation dans les matériaux semi-conducteurs, par des techniques utilisant le rayonnement synchrotron. Le contrôle de la déformation est fondamental pour optimiser les propriétés de transport électronique, mécaniques et thermiques. Dans une approche duale, nous combinerons la détermination du tenseur local de déformation déviatorique en balayant l'échantillon sous un nano faisceau polychromatique (μ Laue) et une imagerie d'un champ de vu donné (microscopie aux rayons X en champ sombre, DFXM).

Des recherches originales s'intéresseront à améliorer l'analyse : (1) de la précision et de la vitesse de détermination quantitative des champs de déformation, (2) des distributions des gradients de déformation, et (3) du champ de déformation dynamique dans les matériaux piézoélectriques par des mesures stroboscopiques. Pour illustrer ces points, trois cas scientifiques correspondant à des matériaux microélectroniques pertinents et de complexité croissante seront étudiés :

1. Champs de déformation statiques entourant des contacts métalliques dans le Si, tels que les vias à travers le silicium (TSV) à haute densité dans la technologie CMOS.
2. Gradients de déformation dans des structures hétéroépitaxiales complexes Ge/GeSn avec des variations de composition le long de la direction de croissance.
3. Études de déformation dynamique de résonateurs acoustiques LiNbO₃ en volume avec une fréquence de résonance dans la plage des MHz.

La validation de cette approche conceptuelle permettra une avancée significative dans le domaine de la microélectronique et l'ingénierie de déformation).

Thesis director & laboratory: Joël EYMERY & Raquel RODRIGUEZ LAMAS (joel.eymery@cea.fr)
[IRIG/MEM](#)

SL-DRF-25-0289

Topological superconductivity and Fermi surface in spin-triplet superconductors

(Supraconductivité topologique et surface de Fermi dans les supraconducteurs triplets)

Topological superconductivity has become a subject of intense research due to its potential for breakthrough in the field of quantum information. Bulk systems are a promising possibility, with candidates found mainly among unconventional superconductors, which are also strongly correlated electron systems. Today, only a few candidate compounds for topological bulk superconductivity exists, and they are mostly uranium-based heavy fermion superconductors. UTe₂ is one of the most prominent candidates. The topological properties of the superconductors depends crucially on the topology of the Fermi surface.

In this project we want to set up a novel technique (for our team) relying on a tunnel diode oscillator circuit. This techniques is very sensitive to quantum oscillations, and to be well both to high magnetic fields and to high-pressure studies. First experiments concentrate on the novel superconductor UTe₂, where the Fermi surface is only partly known. In further studies the topological properties of the ferromagnetic superconductors UCoGe and URhGe will be revised.

(La supraconductivité topologique est devenue un sujet de recherche intense en raison de son potentiel pour des avancées majeures dans le domaine de l'information quantique. Les systèmes massifs représentent une possibilité prometteuse, avec des candidats principalement trouvés parmi les supraconducteurs non conventionnels, qui sont également des systèmes d'électrons fortement corrélés. À ce jour, seuls quelques composés candidats pour la supraconductivité topologique de volume existent, et ils sont principalement des supraconducteurs lourds à base d'uranium. L'UTe₂ est l'un des candidats les plus prometteurs. Les propriétés topologiques des supraconducteurs dépendent crucialement de la topologie de la surface de Fermi.

Dans ce projet, nous souhaitons mettre en place une nouvelle technique (pour notre équipe) reposant sur un circuit oscillateur à diode tunnel. Cette technique est très sensible aux oscillations quantiques et est bien adaptée aux études sous champs magnétiques élevés et sous haute pression. Les premières expériences se concentrent sur le nouveau supraconducteur UTe₂, dont la surface de Fermi n'est que partiellement connue. Des études ultérieures réviseront les propriétés topologiques des supraconducteurs ferromagnétiques UCoGe et URhGe).

Thesis director & laboratory: Georg KNEBEL (georg.knebel@cea.fr) [IRIG/PHELIQS](#)

SL-DRF-25-0321

Modelling spin shuttling in Si and Ge spin qubits

(Modélisation du transfert de spin dans les qubits silicium et germanium)

Silicon and Germanium spin qubits have made outstanding progress in the past few years. In these devices, the elementary information is stored as a coherent superposition of the spin states of an electron or hole confined in a quantum dot embedded in a Si/SiO₂ or SiGe heterostructure. These spins can be manipulated electrically and are entangled through exchange interactions, allowing for a variety of one- and two-qubit gates required for quantum computing and simulation. Grenoble is promoting original spin qubit platforms based on Si and Ge, and holds various records in spin lifetimes and spin-photon interactions. At CEA/IRIG, we support the progress of these quantum technologies with state-of-the-art modelling. We are, in particular, developing the TB_Sim code, able to describe very realistic qubit structures down to the atomic scale if needed.

Spin shuttling has emerged recently as a resource for spin manipulation and transport. A carrier and its spin can indeed be moved (shuttled) coherently between quantum dots, allowing for the transport of quantum information on long ranges and for the coupling between distant spins. The shuttling dynamics is however complex owing to the spin-orbit interactions that couple the motion of the carrier to its spin. This calls for a comprehensive understanding of these interactions and of their effects on the evolution and coherence of the spin. The aim of this PhD is to model shuttling between Si/Ge spin qubits using a

combination of analytical and numerical (TB_Sim) techniques. The project will address spin manipulation, transport and entanglement in arrays of spin qubits, as well as the response to noise and disorder (decoherence). The PhD candidate will have the opportunity to interact with a lively community of experimentalists working on spin qubits at CEA and CNRS.

(Les qubits de spin en silicium et en germanium ont fait des progrès remarquables ces dernières années. Dans ces dispositifs, l'information élémentaire est stockée sous forme d'une superposition cohérente des états de spin d'un électron ou d'un trou confiné dans une boîte quantique intégrée dans une hétérostructure Si/SiO₂ ou SiGe. Ces spins peuvent être manipulés électriquement et sont intriqués par des interactions d'échange, permettant de réaliser les opérations à un ou deux qubits nécessaires au calcul et à la simulation quantique. Grenoble promeut des plateformes de qubits originales basées sur Si et Ge, et détient divers records de durée de vie de spin et d'interactions spin-photon. Au CEA/IRIG, nous accompagnons le développement de ces technologies quantiques avec de la modélisation avancée, en particulier grâce au code TB_Sim capable de décrire des qubits très réalistes jusqu'à l'échelle atomique si nécessaire.

Un porteur de charge et son spin peuvent en être déplacés de manière cohérente entre différentes boîtes quantiques, ce qui permet le transfert d'information quantique et le couplage entre spins distants. La dynamique du transport de spin est cependant complexe en raison des interactions spin-orbite qui couplent le mouvement du porteur à son spin. Le contrôle de ce transport nécessite donc une compréhension complète de ces interactions et de leurs effets sur l'évolution et la cohérence du spin. L'objectif de cette thèse est de modéliser le transport entre qubits de spin Si/Ge en utilisant une combinaison de techniques analytiques et numériques (TB_Sim). Le projet étudiera notamment la manipulation, le transport et l'intrication du spin dans des réseaux de qubits, ainsi que la réponse au bruit et au désordre (décohérence). Le doctorant aura l'opportunité d'interagir avec une communauté dynamique d'expérimentateurs travaillant sur les qubits de spin au CEA et au CNRS).

Thesis director & laboratory: Yann-Michel NIQUET (yann-michel.niquet@cea.fr) [IRIG/MEM](#)
SL-DRF-25-0405

Monte Carlo simulations of Van der Waals magnets (Simulations Monte Carlo des aimants de Van der Waals)

The Monte Carlo methods developed in the past 50 years have revolutionized the field of Statistical Mechanics. Initially used to study simple spin models, the modern Monte Carlo techniques can now be applied to realistic magnetic models. The focus of this project is on the family of quasi two-dimensional Van der Waals magnets that are currently of great interest for spintronic applications. Because of their existence in a few atomic layers form, these materials are of great fundamental interest as examples of ideal two dimensional spin systems. The focus of this project is on a family of layered honeycomb antiferromagnets FePS₃, NiPS₃, MnPS₃ and CrI₃. The detailed information on their microscopic interaction parameters have been obtained in the neutron experiments at ILL. Using advanced Monte Carlo algorithms we plan to investigate magnetic transitions in these materials and, in particular, clarify a long-standing question of how anisotropy and interlayer coupling compete with each other in establishing a long-range magnetic order. For continuation of this project as the PhD stage we will study their spin dynamics, including “ghost” magnons above the transition temperature and the Dirac magnons at $T = 0$. We will also address peculiar properties of magnetic alloys Mn_{1-x}Fe_xPS₃ and Ni_{1-x}Fe_xPS₃ that are relevant to spintronic applications. While the project is purely theoretical, it will be carried out in close collaboration with experimentalists from ILL and LNCMI.

(Les méthodes de Monte Carlo développées au cours des 50 dernières années ont révolutionné le domaine de la mécanique statistique. Initialement utilisées pour étudier des modèles de spin simples, les techniques modernes de Monte Carlo peuvent maintenant être appliquées à des modèles magnétiques réalistes. Ce projet se concentre

sur la famille des aimants de Van der Waals quasi bidimensionnels qui sont actuellement d'un grand intérêt pour les applications de la spintronique. En raison de leur existence sous la forme de quelques couches atomiques, ces matériaux sont d'un grand intérêt fondamental en tant qu'exemples de systèmes de spin bidimensionnels idéaux. Ce projet se concentre sur une famille d'antiferromagnétiques en nid d'abeille FePS₃, NiPS₃, MnPS₃ et CrI₃. Les informations détaillées sur leurs paramètres d'interaction microscopiques ont été obtenues lors d'expériences neutroniques à l'ILL. En utilisant des algorithmes Monte Carlo avancés, nous prévoyons d'étudier les transitions magnétiques dans ces matériaux et, en particulier, de clarifier une question de longue date, à savoir comment l'anisotropie et le couplage entre les couches rivalisent entre eux pour établir un ordre magnétique à longue portée. Pour poursuivre ce projet au stade du doctorat, nous étudierons leur dynamique de spin, y compris les magnons « fantômes » au-dessus de la température de transition et les magnons de Dirac à $T = 0$. Nous aborderons également les propriétés particulières des alliages magnétiques Mn_{1-x} FexPS₃ et Ni_{1-x} FexPS₃ qui sont pertinentes pour les applications de la spintronique. Bien que le projet soit purement théorique, il sera réalisé en étroite collaboration avec des expérimentateurs de l'ILL et de LNCMI).

Thesis director & laboratory: Mike ZHITOMIRSKY (mike.zhitomirsky@cea.fr) [IRIG/PHELIQS](#)
SL-DRF-25-0413

➤ **Cryotechnologies (1 proposal)**

Study of the thermomechanical properties of solid hydrogen flows

(Etude des propriétés thermomécaniques des écoulements d'hydrogène solide)

IRIG's Department of Low Temperature Systems (DSBT) is developing several research themes around cryogenic solid hydrogen and its isotopes. The applications of this research range from the production of renewable micrometre-sized solid hydrogen targets for the generation of high-energy protons for laser-plasma acceleration, to the formation and injection of millimetre- or centimetre-sized hydrogen ice cubes for the supply and control of plasma in fusion reactors using magnetic or inertial confinement. A cross-cutting issue in these applications is the need for a detailed understanding of the mechanical properties of solid hydrogen, in order to gain a better understanding of the physics of extrusion and target production, as well as the formation and acceleration of icicles for injection into fusion plasmas.

The subject of this thesis focuses on the study of solid hydrogen extrusion under pressure. Using this technology, the DSBT has been developing several cryostats for over 10 years, enabling the production of ribbons of solid hydrogen, ranging in size from a few millimetres to a few tens of micrometres, extruded at speeds of a few millimetres per second.

The main objective of the research is to gain a better understanding of extrusion mechanisms to enable the development of numerical predictive tools for extrusion system design. This experimental thesis will be based on cryogenic rheometry using a capillary rheometer and/or a duvet experiment developed during a previous thesis. This study will be carried out in collaboration with the Laboratoire de Rhéologie et Procédés at Grenoble Alpes University.

(Le Département des Systèmes Basses Températures (DSBT) de l'IRIG développe plusieurs thématiques de recherche autour de l'hydrogène solide cryogéniques et ses isotopes. Les applications de cette recherche vont de la production de cibles d'hydrogène solide micrométriques renouvelables pour la génération de protons de forte énergie pour l'accélération laser-plasma, à la formation et l'injection de glaçons d'hydrogène de taille millimétrique ou centimétrique pour l'alimentation et le contrôle du plasma dans les réacteurs de fusion par confinement magnétique ou inertiel. Une problématique transverse à ces applications réside dans la connaissance fine des

propriétés mécaniques de l'hydrogène solide, que cela soit pour mieux comprendre la physique d'extrusion et de production des cibles ou celle de la formation et de l'accélération des glaçons pour leur injection dans les plasmas de fusion.

Le sujet de cette thèse se focalise sur l'étude de l'extrusion de l'hydrogène solide sous pression. Sur cette technologie, le DSBT développe depuis plus de 10 ans plusieurs cryostats permettant la production de ruban d'hydrogène solide, dont la taille varie de quelques millimètres à quelques dizaines de micromètres, extrudés à des vitesses de quelques millimètres par seconde.

L'axe principal de recherche est une meilleure compréhension des mécanismes d'extrusion pour permettre le développement d'outils prédictifs numériques de conception de système d'extrusion. Cette thèse expérimentale reposera sur de la rhéométrie cryogénique basée sur un rhéomètre capillaire et/ou une expérience de couette développée au cours d'une précédente thèse. Cette étude se fera en collaboration avec le Laboratoire de Rhéologie et Procédés du l'Université Grenoble Alpes).

Thesis director & laboratory: Nicolas LUCHIER & Fabien SOURIS (nicolas.luchier@cea.fr) [IRIG/DSBT](#)
SL-DRF-25-0471