

Séminaire Dr. Rawdha DEKHILI

*PostDoc-Ingénieur de Recherche en Instrumentation Optique et Traitement de données
industrielle provenant de SANOFI*

*Chair Photonique-Laboratoire Matériaux Optiques, Photonique et Systèmes (LMOPS).
CentraleSupélec.*

Vendredi, 12 Avril 2024 à 14h

*Laboratoire de Chimie et Physique - Approche Multi-échelles des milieux Complexes
(LCP-A2MC), Salle de Chimie.*

Raman et DFT : Outils complémentaires pour l'étude des matériaux : applications aux cristaux et nanomatériaux.

La spectroscopie Raman est une technique analytique puissante. Elle est essentielle dans de nombreux domaines scientifiques, de la physique des matériaux à la physico-chimie. Cette méthode permet une caractérisation détaillée de la structure moléculaire et des liaisons chimiques d'un échantillon en analysant les vibrations moléculaires via la diffusion des photons. Dans ce contexte d'analyse vibrationnelle avancée, la spectroscopie Raman offre des informations précises sur la configuration et l'interaction des molécules. Dans cette perspective, notre recherche s'articule autour de l'utilisation et du développement de la spectroscopie Raman pour une gamme variée d'applications, allant de l'étude des cristaux et des matériaux à l'échelle nanométrique à la conception de capteurs Raman innovants pour l'industrie pharmaceutique. À cet égard, nous aborderons notamment l'étude des cristaux de la famille du KDP en mettant en avant leur importance en tant que matériaux pour la photonique en raison de leurs propriétés physiques distinctives. Parmi ces cristaux, le LiH_2PO_4 (LDP) et le $\text{KLi}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ (KLDP) présentent un intérêt particulier, mais des ambiguïtés persistent quant à l'attribution des modes de vibration, notamment dans la plage de fréquence de 300 à 600 cm^{-1} . Afin de mieux comprendre ces structures cristallines et leurs comportements spectroscopiques, une étude structurale approfondie et une corrélation avec les mesures spectroscopiques sont nécessaires. En explorant des méthodes de synthèse telles que la synthèse par refroidissement lent, nous avons cherché à optimiser les conditions expérimentales pour obtenir des cristaux de taille et d'épaisseur optimales. En parallèle, nous avons effectué une caractérisation structurale détaillée à l'aide de la diffraction des rayons X (sur poudre et monocristal), ce qui nous a permis de déterminer les paramètres cristallographiques essentiels. Les mesures Raman ont également été utilisées pour approfondir notre compréhension de la structure cristalline, en particulier en ce qui concerne l'arrangement spécifique des tétraèdres PO_4 et LiO_4 dans chaque structure. Ces

analyses ont été complétées par une modélisation DFT (méthode B3LYP) pour confirmer les modes de vibration théoriques actifs en Raman. En parallèle, nous avons exploré les transitions de phase dans ces matériaux en combinant des mesures diélectriques et des mesures Raman en fonction de la température. Cette approche nous a permis d'établir une corrélation significative entre le processus d'élaboration des cristaux et leurs propriétés physico-chimiques, en mettant en lumière les mécanismes sous-jacents de ces transitions de phase pour la première fois en utilisant la spectroscopie Raman en fonction de la température dans la famille du KDP. Ensuite, nous concentrerons nos efforts sur le développement et la synthèse de matériaux à l'échelle nanométrique, en mettant un accent particulier sur la conception de nano-biocapteurs et de nanovecteurs pour la détection et le traitement du cancer. Nous détaillerons les méthodes de synthèse utilisées pour obtenir ces matériaux, avant d'approfondir leur caractérisation avancée, en mettant en lumière la spectroscopie UV-visible et la spectroscopie Raman SERS.

Nous explorerons en profondeur les principes de ces techniques et leur application dans ce domaine spécifique. De plus, nous aborderons les techniques de simulation des spectres Raman et UV à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), permettant ainsi une comparaison entre les spectres expérimentaux et théoriques.

Enfin, nous nous pencherons sur la conception et l'élaboration d'un prototype de capteur Raman miniaturisé et à faible coût, dédié à l'industrie pharmaceutique, Sanofi, pour une analyse spectroscopique en temps réel. Nous détaillerons les défis et les avancées dans la mesure Raman en ligne et en temps réel, ainsi que la gestion des données recueillies en milieu industriel. Cette gestion des données sera réalisée à l'aide de Python, en utilisant des modèles de statistiques et de prédictions tels que PLS (Partial Least Squares) et SVR (Support Vector Regression). De plus, nous aborderons la conception d'une sonde Raman à immersion avec filtre intégré. Nous mettrons également en évidence l'intégration du calcul DFT pour compléter ces mesures. En outre, nous examinerons les progrès réalisés dans le développement de capteurs Raman miniaturisés et à faible coût, ouvrant ainsi de nouvelles perspectives pour une utilisation plus répandue de cette technologie chez Sanofi.