

STAGE DE MASTER 2 – 6 MOIS

Modélisation par apprentissage automatique de nouveaux revêtements bactéricides à base de nanoparticules d'argent

Mots-clés : apprentissage automatique, nanoparticules d'argent, dynamique moléculaire, DFT, silice, éco-conception

DESCRIPTION SCIENTIFIQUE :

L'argent est connu depuis l'Antiquité pour ses remarquables propriétés antimicrobiennes. L'utilisation de nanoparticules d'argent constitue une stratégie prometteuse pour le développement de revêtements de surface antimicrobiens, grâce au relargage d'ions Ag^+ dans l'environnement. Ce type de dispositif trouve des applications directes dans le secteur de la santé, l'industrie agroalimentaire et divers produits de consommation. Dans ce projet, nous développons de nouveaux dispositifs « nano-safe by design » dans lesquels des nanoparticules d'argent (AgNPs) sont incorporées dans une matrice de silice, permettant de contrôler au niveau local la durée de libération des ions Ag^+ dans l'environnement.

Pour optimiser ces dispositifs, une compréhension détaillée des mécanismes de détachement des ions Ag^+ à l'interface AgNP/silice est essentielle. Ces processus reposent sur des phénomènes multi-échelles, impliquant à la fois la structure atomique de l'interface nanoparticule/matrice, les interactions avec les espèces chimiques de l'environnement, et la dynamique de dissolution des particules. Pour accéder à ces informations, difficiles à observer expérimentalement, les études numériques jouent un rôle complémentaire indispensable.

Ce stage a pour objectif d'étudier, par des simulations de dynamique moléculaire (MD), l'influence de la matrice de silice sur la morphologie des AgNPs en fonction de leur taille et de la température, afin d'identifier les sites de surface des AgNPs réactifs vis-à-vis de la libération d' Ag^+ . Des études antérieures sur la nature de l'interface entre la surface des AgNPs et la silice environnante ont été menées par DFT dans l'équipe d'accueil, d'abord sous forme de films minces [1], puis sous forme de petites AgNPs (55 et 147 atomes) incorporées dans une matrice de silice [2]. Nous avons montré que la présence de la matrice de silice amorphe autour de l'AgNP conduit à la formation de liaisons covalentes entre la nanoparticule et la matrice, ainsi qu'à une déplétion électronique dans l'AgNP, qui devient cationique. Plus récemment, nous avons développé un potentiel d'interaction basé sur l'apprentissage automatique (MLIP) pour étudier la diffusion des ions Ag^+ dans la silice [3]. Afin de mieux caractériser les premières étapes du détachement des ions Ag^+ , l'étape suivante consiste à modéliser des nanoparticules de tailles réalistes et à température finie, incorporées dans la matrice de silice.

Ce stage offre une opportunité unique de contribuer à la recherche sur les nanomatériaux et d'acquérir des compétences avancées en DFT, modélisation moléculaire et apprentissage automatique.

Références :

- [1] [H. Balout, N. Tarrat, J. Puibasset, S. Ispas, C. Bonafos, et M. Benoit, *ACS Applied NanoMaterials*, 2019, 2, 8, 5179](#)
 - [2] [M. Benoit, J. Puibasset, C. Bonafos et N. Tarrat, *Nanoscale*, 2022, 14, 7280](#)
 - [3] [S. Trillot, N. Tarrat, N. Combe, P. Benzo, C. Bonafos et M. Benoit, *J. Chem. Phys.*, 2025, 162, 104701](#)
-

Techniques/méthodes utilisées :

Les principales tâches à réaliser au cours du stage incluront :

1. Développement de potentiels interatomiques pour le système AgNP/silice : génération de bases de données DFT et comparaison de plusieurs logiciels d'apprentissage automatique pour générer des potentiels interatomiques précis (N2P2, VASP-MLFF, MACE, etc.).
2. Simulations de dynamique moléculaire : réalisation de simulations MD pour étudier la morphologie et la réactivité des AgNPs dans la matrice en fonction de différents paramètres (taille, température).
3. Analyse des résultats : interprétation des données de simulation pour identifier les sites réactifs impliqués dans le détachement des ions Ag⁺.

Pour réaliser ces tâches, le/la candidat(e) devra apprendre à utiliser divers logiciels de modélisation, maîtriser le calcul haute performance et développer des outils d'analyse de données en Python.

Compétences requises :

Le/la candidat(e) devra de préférence avoir une formation en physique de l'état solide et/ou en chimie ou science des matériaux, avec des connaissances en chimie quantique et en simulations numériques.

Encadrant(e)s de stage :

Magali Benoit – magali.benoit@cemes.fr - 05 62 25 79 70

Nathalie Tarrat – nathalie.tarrat@cemes.fr - 05 67 52 43 47

Lieu du stage :

Ce stage se déroulera au sein de l'équipe *Surfaces, Interfaces et Nano-Objets* (SINanO) du laboratoire CEMES à Toulouse. Les recherches de l'équipe SINanO portent sur la conception, le développement et l'étude de nano-objets ou de nanostructures, isolés ou en interaction avec leur environnement, tout au long de leur cycle de vie, dans un contexte où il existe un besoin de nouveaux nanomatériaux fonctionnels à empreinte environnementale réduite. Elle vise à répondre à des questions fondamentales sur l'identification des mécanismes de base gouvernant l'ordre chimique local et la structure, qui déterminent les propriétés électroniques, physiques et chimiques, avec une attention particulière portée au rôle des surfaces et interfaces. Notre approche est pluridisciplinaire (physique, chimie), parfois à l'interface avec d'autres disciplines (biologie), avec une forte interconnexion entre théorie et expérience, qui s'enrichissent mutuellement au sein de l'équipe.

Financement :

L'allocation de stage est de l'ordre de 660 € mensuel. Ce stage est soutenu financièrement par le PEPR DIADEM.