



Demi-journée de l'ICCF

Vendredi 23 janvier 2026

08H45 - 12H30

**Amphi Recherche Pôle Physique
Campus Universitaire des Cézeaux**



Programme :

Horaires	Prénom NOM	Titre
08h45	Florence CHARNAY-POUGET Guillaume VOYARD	Ouverture de la ½ journée de l'ICCF
08h50 - 09h10	Julien DEVEMY	Nouveaux outils collaboratifs : Comment LaSuite de la DINUM s'intègre-t-elle dans l'écosystème des solutions institutionnelles ?
09h10 – 09h30	Florence CHARNAY-POUGET Martin LEREMBOURE	<u>#ReagirUCA</u> : Plateforme de signalement & Cellule ALEX.
09h30 – 09h50	Gilles MAILHOT Vanessa PREVOST	Vers de nouveaux procédés de traitement des PFAS : méthode analytique, adsorption et photodégradation.
09h50 – 10h10	Federico CISNETTI	Optimiser le traitement des données spectroscopiques grâce à la programmation assistée par IA.
<i>Pause Café (salle 9105)</i>		
10h40 – 11h00	Alexandra CHATRAS Sébastien FAYARD	Sensibilisation sur le risque batterie lithium
11h00 – 11h20	Manuel A. ANDINO-ENRIQUEZ	Assessment of CECS Photo-fate & removal by applying an integrate approach.
11h20 - 11h40	Ana Julia ANTUNES SOUZA	Enzymatic degradation of elastomers: Development of a screening test for the detection of elastomer- degrading laccases.
11h40 - 12h00	Hengli ZHAO	Toward a Multiscale Modelling of the Protein Adsorption on Materials for Medical Applications
12h00 - 12h20	Fabrice ANIZON	<u>REINVENT4</u> : une plateforme IA générative de petites molécules
12h20 – 12h30	Fabrice LEROUX	Conclusion de la ½ journée de l'ICCF



Nouveaux outils collaboratifs : comment LaSuite de la DINUM s'intègre-t-elle dans l'écosystème des solutions institutionnelles ?

Julien DEVÉMY¹

¹ *Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND*

La Direction interministérielle du Numérique (DINUM) a récemment déployé LaSuite [1], une plateforme collaborative souveraine et sécurisée intégrant plusieurs outils : messagerie instantanée (Tchap [2]), visioconférence (Visio [3]), édition collaborative (Docs [4]) et un assistant basé sur l'Intelligence Artificielle. Cette présentation proposera une analyse de ces nouveaux outils, en exposant leurs fonctionnalités, leurs cas d'usage et leurs éventuelles limites.

Un état des lieux sera ensuite dressé pour évaluer la complémentarité ou la concurrence de ces solutions avec les outils actuellement recommandés ou proposés par l'UCA [5], le CNRS [6] et RENATER [7].

Enfin, une réflexion prospective permettra d'anticiper les tendances futures en matière d'outils collaboratifs au sein des institutions publiques et de la recherche.

REFERENCES:

- [1] <https://lasuite.numerique.gouv.fr/>
- [2] <https://tchap.numerique.gouv.fr/>
- [3] <https://lasuite.numerique.gouv.fr/produits/visio>
- [4] <https://lasuite.numerique.gouv.fr/produits/docs>
- [5] <https://dsi.uca.fr/catalogue-de-services>
- [6] <https://miti.cnrs.fr/plateforme-reseaux/e-outils/>
- [7] <https://www.renater.fr/services/collaborer-simplement/>



#ReagirUCA : Plateforme de signalement & Cellule ALEX

Florence CHARNAY-POUGET, Martin LEREMBOURE

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND

L'université Clermont Auvergne dit **NON** aux discriminations, aux violences sexistes et sexuelles et aux risques psychosociaux. Agissons ensemble pour une université inclusive et bienveillante.

La plateforme #Réagir UCA vous donne la possibilité de **signaler et/ou d'être accompagnée.e** face à des actes de **violence**, de **souffrance** au travail, de **discrimination**, de **harcèlement** et d'**agissements sexistes**, dont vous avez été **victime** ou dont vous avez été **témoin**.

Elle permet d'assurer un processus fiable et sécurisé pour faciliter le recueil, la prise en charge et le traitement des alertes.

Découvrez cette nouvelle procédure !

Réagir UCA

<https://signalement.uca.fr/>

Cette plateforme vous donne la possibilité de signaler et d'être accompagné.e face à des actes de violence, de discrimination, de harcèlement et d'agissements sexistes, dont vous avez été victime ou dont vous avez été témoin. Elle permet d'assurer un processus fiable et sécurisé pour faciliter le recueil, la prise en charge et les traitement des données.



Vers de nouveaux procédés de traitement des PFAS : méthode analytique, adsorption et photodégradation

Ryan PRUD HOMME, Santina PLACID, Martin LEREMBOURE, Claude FORANO, Marcello BRIGANTE, Vanessa PREVOT, Gilles MAILHOT,

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND

Les PFAS (substances per- et polyfluoroalkylées), surnommées « polluants éternels » en raison de leur stabilité chimique exceptionnelle et de leur résistance aux procédés de dégradation, sont désormais largement présents dans divers compartiments de l'environnement. Cette présence est le résultat de leur utilisation industrielle massive et de leur persistance dans l'environnement [1]. Les technologies conventionnelles de traitement, telles que les procédés d'adsorption et d'oxydation, couramment employées dans le traitement des eaux usées, n'arrivent pas à éliminer complètement les PFAS, ce qui souligne la nécessité de développer des méthodes plus efficaces [2]. Face à ce constat, plusieurs équipes de l'ICCF se sont impliquées dans des projets collaboratifs visant à proposer des solutions plus fiables, durables et économiquement viables.

Les recherches au sein de l'ICCF ont débuté par le développement de méthodes d'analyse robustes, en particulier par le biais de la chromatographie liquide et ionique couplée à la spectrométrie de masse. Ces travaux continuent d'évoluer, avec un objectif d'augmenter la sensibilité des analyses et de permettre la détection de multiples composés simultanément. Parallèlement, des études ont été lancées sur i) l'adsorption des PFAS, notamment sur diverses phases HDL, et ii) leur dégradation par des procédés d'oxydation (radicaux hydroxyles) et de réduction (électron solvaté) avancée. Les premiers résultats obtenus dans ces deux domaines, encourageants, seront présentés lors de cette communication. Enfin, des perspectives d'optimisation de ces procédés d'élimination des PFAS seront également discutées, avec un accent particulier sur les synergies potentielles entre les différentes équipes de l'ICCF.

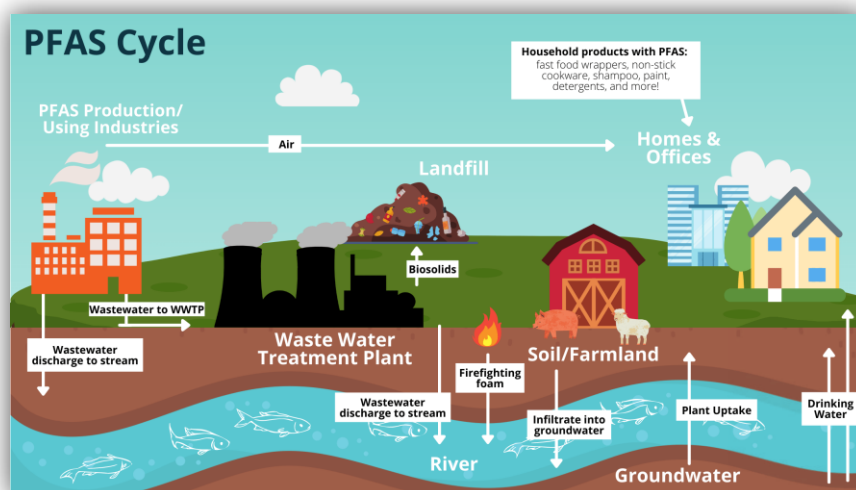


Figure 1: Cycle des PFAS dans l'environnement

REFERENCES:

- [1] S. Kurwadkar, J. Dane, S. R. Kanel, M. N. Nadagouda, R. W. Cawdrey, B. Ambade, G. C. Struckhoff, R. Wilkin Sci. Total Environ., 2022, 809, 151003.
- [2] J. Cui, P. Gao, Y. Deng Environ. Sci. technol., 2020, 54, 3752-3766.



Optimiser le traitement des données spectroscopiques grâce à la programmation assistée par IA

Federico CISNETTI¹,

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND

Dans le domaine des matériaux luminescents, mais certainement également dans le cadre d'autres autres sujets de recherche développés à l'ICCF, une problématique peut fréquemment apparaître : il faudrait développer des outils efficaces pour le traitement de données, mais *le temps investi dans leur développement est-il compensé par le gain de temps qu'ils apportent ensuite* ? ? En cas de réponse négative à cette question, le pis-aller peut être un traitement manuel des données... qui n'est pas la tâche la plus gratifiante pour un chercheur.

L'avènement de la programmation assistée par l'intelligence artificielle est ce nature à modifier, dans certains cas, la réponse à la question posée plus haut. Quelques cas seront présentés dans le cadre du traitement de données spectroscopiques issues de la thématique Matériaux Luminescents.

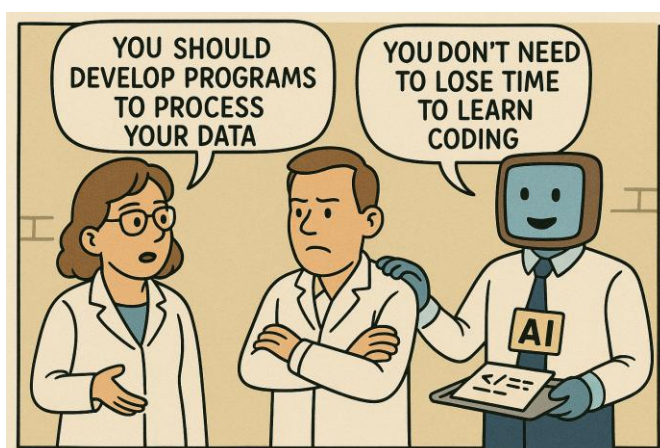


Figure 1: Illustration d'une problématique possible au laboratoire



Sensibilisation sur le risque batterie lithium

Sébastien FAYARD, Responsable Pôle Sécurité Incendie
Alexandra CHATRAS, Animatrice en prévention des risques
Université Clermont Auvergne, Service de Prévention des Risques

Dans le cadre de notre politique de prévention des risques, une information sera réalisée sur les **dangers liés aux batteries lithium-ion** (téléphones, ordinateurs, trottinettes, batteries portables, outils, etc.).

Ces batteries peuvent, en cas de défaut, choc, surcharge ou mauvaise utilisation, entrer en **emballement thermique**, provoquant un **incendie violent, une explosion et des fumées toxiques**, souvent difficiles à maîtriser et susceptibles de se rallumer.

La présentation s'appuiera sur des **vidéos réelles d'incendies** liés aux batteries afin d'illustrer la rapidité et la dangerosité du phénomène, ainsi que sur les **bonnes pratiques de sécurité** à respecter.

Seront notamment abordées les **règles d'utilisation, de charge, de détection des batteries déformées ou endommagées**, et les **conditions de stockage sécurisé** (zones dédiées, contenants coupe-feu, éloignement des matériaux combustibles).

Cette sensibilisation vise à **réduire les risques pour les personnes, les bâtiments et les équipements**, et à rappeler que ces équipements du quotidien doivent être manipulés avec vigilance.





ASSESSMENT OF CECS PHOTO-FATE AND REMOVAL BY APPLYING AN INTEGRATE APPROACH

Manuel A. Andino-Enríquez^{1,2}, Luca Carena², Claudio Minero², Davide Vione², Paola Calza², Mohamad Sleiman¹

¹Université Clermont Auvergne, Clermont Auvergne INP, CNRS, ICCF, F-63000 Clermont-Ferrand, France

²Dipartimento di Chimica, Università di Torino, Via Pietro Giuria 5, 10125 Torino, Italy

The increasing awareness and concern over to the detection of contaminants of emerging concern (CECs) in extremely cold environments highlights the need of understanding their occurrence, persistence, transformation pathways, and potential ecotoxicological effects under such conditions [1,2].

Despite their relevance, there is still a gap in scientific studies assessing the photo-fate of CECs at different temperatures and matrices. The present PhD project focuses on the assessment of the environmental impact of CECs, which have a high risk to ecosystems and human health due to their persistence and resistance during wastewater treatment. This PhD project is part of the Marie Skłodowska-Curie Actions (MSCA) IN2AQUAS doctoral network, which promotes a multidisciplinary and interdisciplinary approach to water quality challenges. To achieve the goal of the PhD project, different sampling campaigns were carried out in alpine regions, sampling snow and surface waters to identify and prioritize novel CECs for further study. Furthermore, the data obtained from these sampling campaigns led to the prioritization of two specific CECs, where their photochemical behavior and environmental fate were investigated, revealing how cold environments, such as snow, influence their transformation. In contrast with the studied performed in cold conditions, additional photodegradation studies were performed at room temperature using a sulfonamide (sulfamethoxazole) where it was focused on the assessment of its degradation, transformation, and environmental persistence using different real water matrices.

To provide a more comprehensive understanding of CEC behavior, ongoing work at ICCF also explores the photodegradation of volatile contaminants, geosmin and 2- methylisoborneol. These compounds are of particular concern in the aquaculture due to their impact on water quality and fish flavor. Advanced analytical techniques are being employed to study how these compounds degrade under light exposure at the air–water interface. The goal is to elucidate the key processes driving their transformation under realistic environmental conditions and to identify possible strategies to reduce their impact in aquaculture. Initial results indicate that water quality, including the presence of natural substances, can strongly influence their degradation. In short, this PhD project and the results obtained are providing us with a greater understanding of pollutant degradation and will allow us to develop more efficient tools for controlling and mitigating their effects.

ACKNOWLEDGEMENTS

This research was funded by the European Union under the Marie Skłodowska-Curie Actions (MSCA) – Doctoral Network- IN2AQUAS (grant agreement No 101119555).

REFERENCES

- [1] T. O. Imoobe, I. I. Kayode-Edwards, M. Omeje, A. A. Enuneku, E. O. Mameh, and T. A. Adagunodo, "Behavior and Fate of Contaminants in Cold Environments," *Arctic Marine Ecotoxicology: Climate Change, Pollutants, and Their Far-Reaching Effects*, pp. 97–145, Jan. 2024, doi: 10.1007/978-3-031-73584-4_5.
- [2] L. Carena, B. Zoppi, F. Sordello, D. Fabbri, M. Minella, and C. Minero, "Phototransformation of Vanillin in Artificial Snow by Direct Photolysis and Mediated by Nitrite," *Environ Sci Technol*, vol. 57, no. 23, pp. 8785–8795, Jun. 2023, doi: doi.org/10.1021/acs.est.3c01931



Enzymatic degradation of elastomers: development of a screening test for the detection of elastomer-degrading laccases

Ana Julia ANTUNES SOUZA¹, Marielle LEMAIRE¹, Thierry GEFFLAUT¹, Lucie MALOSSE², Gema NUÑEZ-LOPEZ², Joel TCHOUFAG², Virgil HELAINE¹, Christine GUERARD-HELAINE¹, Otmane HAMMOUTI¹

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND

² Manufacture Française de Pneumatiques Michelin, Centre de Technologies Ladoux, F-63040 CLERMONT-FERRAND

During their use and aging, and due to friction with the road, tires release agglomerates composed of a mixture of materials from the tire and minerals from the road. These particles, known as Tire and Road Wear Particles (TRWP), represent a significant environmental concern, as they constitute an important source of microplastic pollution.^[1]

In this context, the present project focuses on the enzymatic biodegradation of elastomers, which are the main component of TRWP. More specifically, we are interested in enzymes from the laccase family, a group of oxidoreductases that catalyze the oxidation of a great variety of substrates while reducing molecular oxygen. These enzymes can also act via a redox mediator, which allows the oxidation of various substrates that are not directly oxidized within the enzyme active site, because of steric hindrance or inadequate redox potential.^[2] Accordingly, the main objective of this study is to identify laccases or Laccase-Mediator Systems (LMS) capable of participating in the initial steps of elastomer biodegradation.

As a first step, we have focused on the development of a screening test suitable for demonstrating the oxidation of elastomers by certain laccases. This assay is based on the quantification of dissolved oxygen in the reaction medium, given that oxygen acts as a co-substrate for laccases and its consumption can be correlated to enzyme activity. In this presentation, the validation of the test through comparison to classical assays will be highlighted, as well as the application to LMS and to the oxidation of model substrates.

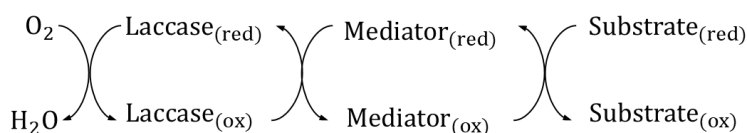


Figure 1: Schematic mechanism of the laccase-mediator system.

REFERENCES:

- [1] Calarnou, L. *et al.* Assessing Biodegradation of Roadway Particles via Complementary Mass Spectrometry and NMR Analyses. *Science of The Total Environment* **2023**, 900, 165698.
- [2] Martin, E. *et al.* Recent Advances in Laccase Activity Assays: A Crucial Challenge for Applications on Complex Substrates. *Enzyme and Microbial Technology* **2024**, 173, 110373.



Toward a Multiscale Modelling of the Protein Adsorption on Materials for Medical Applications

Hengli ZHAO¹, Philip Chennell², Julien Devemy¹, Alain Dequidt¹, Valérie Sautou², Mehdi Sahihi¹, Patrice Malfreyt¹

¹ *Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND*

² *Université Clermont Auvergne, CHU Clermont-Ferrand, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND*

Protein adsorption on material surfaces is an important issue in medical devices and biopharmaceutical processing because it can drive loss of activity, irreversible fouling, and interfacial aggregation¹⁻⁴. Yet adsorption mechanisms remain difficult to predict: they depend on a subtle balance between local surface chemistry, protein conformational flexibility, and solvent/ion structuring at the interface⁵. A molecular-level description is therefore essential to connect material properties to adsorption outcomes and to support the rational design of low-fouling surfaces.

In this work, we develop a multi-scale molecular simulation strategy to investigate the adsorption of IgG monoclonal antibodies on polymeric materials that are relevant to medical applications (e.g., PVC, PE). Starting from amino-acid sequences, antibody structures are generated by AlphaFold3 and refined at the all-atom (AA) level and simulated with explicit solvent and ions. To access longer time and length scales and to improve sampling of rare adsorption events, AA models are mapped to coarse-grained (CG) representations using the Martini force field (see Figure 1).

Adsorption is characterized using complementary structural and interfacial descriptors, including antibody orientation and contact fingerprints, as well as conformational metrics capturing IgG flexibility (radius of gyration, Fab–Fc distance, and hinge-related measures). To quantify adsorption thermodynamics, we also compute potentials of mean force (PMFs) to extract adsorption free energies and barrier heights. By benchmarking coarse-grained simulations against all-atom references and available experimental data, we validate the CG models and enable access to the long timescales required for large, highly flexible proteins such as IgG1.

The resulting framework provides a quantitative basis to understand monoclonal antibody interfacial behavior and supports the design of materials and formulation strategies that mitigate non-specific adsorption in medical contexts.

Keywords: protein adsorption, polymer interfaces, monoclonal antibodies, molecular dynamics, coarse-grained simulation.



REINVENT4 : une plateforme IA générative de petites molécules

Fabrice ANIZON¹

¹ *Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND*

La conception de petites molécules organiques pour des applications pharmaceutiques repose sur un processus long et coûteux, traditionnellement fondé sur l'exploration progressive de l'espace chimique. Cette démarche implique la synthèse de nombreuses molécules, l'étude des relations structure-activité, ainsi que la détermination des propriétés pharmacocinétiques et pharmacodynamiques des composés les plus prometteurs. Les structures de départ peuvent provenir d'une conception rationnelle ou du criblage de larges chimiothèques.

Les approches récentes basées sur l'intelligence artificielle offrent de nouvelles possibilités pour explorer l'espace chimique et générer de nouvelles molécules de manière plus systématique.

Au cours de cette présentation, REINVENT4 [1] sera présenté comme une plateforme d'IA open source permettant de générer de nouvelles structures chimiques et de les optimiser au cours d'un processus d'apprentissage du modèle, en fonction de contraintes définies par l'utilisateur, dérivées d'outils de chimie computationnelle ou de jeux de données expérimentales.

REFERENCE :

[1] H. H. Loeffler, J. He, A. Tibo, J. P. Janet, A. Voronov, L. H. Mervin, O. Engkvist. Reinvent 4: Modern AI-driven generative molecule design. *Journal of Cheminformatics* **2024**, 16, 20.

DOI : <https://doi.org/10.1186/s13321-024-00812-5>