

Sujet thèse / PhD subject 2025

Titre Thèse	English : Impact of Temperature and Loading Rate on Nanomechanical Phenomena in Biophysics and Materials Science Français : Impact de la Température et de la Vitesse de Chargement sur les Phénomènes Nanomécaniques en Biophysique et en Science des Matériaux	
PhD Title	Micro et NanoTechnologies, Acoustique et Télécommunications (MNTAT)	
(Co)-Directeur	Stefano GIORDANO	E-mail : stefano.giordano@univ-lille.fr
(Co)-Directeur	////	E-mail : ///
(Co)-Encadrant (s)	///	E-mail : ///
Laboratoire	IEMN	Web : https://www.iemn.fr/
Groupe(s)	AIMAN-FILMS	Web : https://www.iemn.fr/la-recherche/les-groupes/aiman-films
Projet phare principal	MATERIALS (Modélisation et aspects théoriques spécifiques)	
Demande de fléchage IEMN ? (Energie / Nanocaractérisation / Technologies Neuromorphiques)	Oui ./ Non : Non Flagship choisi :	
Demande de labellisation Université de Lille (GREAL, labellisée)	Oui / Non : Non Label :	
Financement acquis Oui <input type="checkbox"/> Non <input checked="" type="checkbox"/> Partiel <input type="checkbox"/>	Si acquis (total ou partiel), préciser : (contrat, organisme, Université étrangère, ,) :	
Financement demandé	Contrat Doctoral Etablissement	ULille <input type="checkbox"/> Centrale Lille <input checked="" type="checkbox"/> JUNIA <input type="checkbox"/>
	Région ou Autre <input checked="" type="checkbox"/> Préciser : Région Hauts-de-France à demander	Co financement : Centrale Lille à demander

A. Résumé / Abstract :

Français : Les phénomènes mécaniques dans les systèmes à l'échelle nanométrique, tels que l'adhésion, la fracture, les transitions configurationnelles dans les macromolécules et les transformations de phase dans les matériaux, sont fondamentaux pour de nombreux processus en biophysique, en biologie et en science des matériaux. Ces études impliquent des systèmes composés de plusieurs unités ayant plusieurs états (par exemple, repliés ou dépliés, brisés ou intacts, attachés ou détachés) qui interagissent de manière complexe, créant un paysage énergétique avec de nombreux points stables et une dynamique de transition complexe entre eux. Bien que l'évolution de ces systèmes ait été étudiée dans des régimes quasi-stationnaires, les régimes variant arbitrairement dans le temps restent largement inexplorés, bien qu'essentiels pour les applications pratiques. La complexité de ce problème réside dans la compétition entre les effets thermiques et les effets dynamiques introduits par le taux de changement des forces appliquées. Cette interaction nécessite l'utilisation de techniques spécifiques de mécanique statistique hors équilibre, telles que des modèles basés sur les équations de Fokker-Planck ou de Langevin, ou la théorie des états de transition. Les phénomènes d'adhésion en biophysique sont fondamentaux pour les structures biologiques et leur fonctions. Les principes de l'adhésion fournissent des aperçus sur l'organisation cellulaire, la réponse aux signaux mécaniques, les mécanismes de certaines pathologies et la conception de biomatériaux. En déchiffrant ces interactions, nous pouvons mieux comprendre les processus fondamentaux de la vie et innover dans des domaines allant de la médecine à la biotechnologie. Les mécanismes de fracture dans la matière molle et la biophysique offrent un aperçu de la rupture et de la résilience des tissus biologiques et des matériaux de l'ingénierie. En analysant ces processus, nous pouvons aborder des questions critiques, allant de la prévention des blessures et de la réparation des tissus à la conception de biomatériaux robustes. Les avancées dans ce domaine promettent d'améliorer la performance des matériaux et d'offrir de nouvelles stratégies pour maintenir ou renforcer l'intégrité des tissus biologiques. Dans les contextes d'adhésion et de fracture, le rôle des effets de température et de la dynamique est crucial et sera étudié en profondeur. Enfin, les transitions configurationnelles et les transformations de phase en biophysique et en science des matériaux sont fondamentales pour comprendre et contrôler la structure et la fonction des matériaux biologiques et synthétiques. Ces processus révèlent non seulement l'adaptabilité et la réactivité des systèmes naturels, mais guident également la conception de matériaux avancés aux propriétés réglables. En exploitant ces transformations, nous pouvons faire progresser les technologies en médecine, en nanotechnologie et en biomatériaux, repoussant les limites de ce que les matériaux peuvent réaliser. En biophysique et en science des matériaux, l'influence combinée de la température et du taux mécanique est cruciale pour comprendre le comportement des matériaux dans diverses conditions. La température affecte directement le mouvement moléculaire et la stabilité des liaisons, tandis que le taux mécanique influence la façon dont les matériaux réagissent à la contrainte, dictant souvent s'ils se déforment, se fracturent ou subissent des transitions de phase. La modélisation de l'interaction entre les effets de température et les effets de taux mécanique en biophysique et en science des matériaux nécessite une gamme de modèles qui tiennent compte du comportement des matériaux sous différentes conditions thermiques et de charge. **D'une part, les modèles thermiquement activés, tels que le modèle d'Arrhenius, décrivent comment les taux de réaction ou les processus moléculaires dépendent de la température. Ils sont utilisés pour décrire des processus dépendants du taux, tels que le repliement des**

protéines, la déformation des polymères et la propagation des fissures. **D'autre part, les modèles viscoélastiques, tels que les modèles de Maxwell et de Kelvin-Voigt, capturent la réponse dépendante du taux des matériaux qui présentent à la fois un comportement élastique et visqueux.** Ils utilisent des combinaisons de ressorts et de pistons pour représenter comment les matériaux réagissent à la contrainte au fil du temps, en tenant compte de la vitesse de déformation. Ils sont couramment appliqués aux tissus biologiques, tels que les muscles, les tendons et le cartilage, qui présentent des comportements différents sous des charges lentes par rapport à des charges rapides. **Dans ce projet de doctorat, nous avons besoin de modèles capables de prendre en compte les deux phénomènes décrits par les deux classes de modèles mentionnées, afin d'étudier avec précision la compétition entre la température et les taux de déformation. Nous pourrions le faire grâce à un pont entre la micromécanique et la mécanique statistique hors équilibre.** Cela permet la création de modèles complexes qui prédisent le comportement des matériaux sur une gamme de températures et de taux de charge. En biophysique, ces modèles sont utilisés pour décrire les processus de repliement des protéines et de séparation de phase cellulaire, où la température et le taux d'application de la contrainte peuvent induire des changements de phase. En science des matériaux, ils aident à concevoir des matériaux sensibles à la température, comme les hydrogels, qui changent de phase en réponse aux conditions environnementales.

English : *Mechanical phenomena in nanoscale systems, such as adhesion, fracture, configurational transitions in macromolecules, and phase transformations in materials, are fundamental to numerous biophysical, biological, and materials science processes. These studies involve systems composed of multiple units with multiple states (e.g., folded or unfolded, broken or intact, attached or detached) that interact in complex ways, creating an energy landscape with many stable points and intricate transition dynamics between them. While the evolution of these systems has been studied in quasi-stationary regimes, arbitrarily time-varying regimes remain largely unexplored yet essential for practical applications. The complexity of this problem lies in the competition between thermal effects and dynamic effects introduced by the rate of change of applied forces. This interplay compels us to employ specialized techniques from non-equilibrium statistical mechanics, such as models based on the Fokker-Planck or Langevin equations, or transition state theory (with varying degrees of approximation). Adhesion phenomena in biophysics are fundamental to biological structure, function, and health. The principles of adhesion provide insights into cellular organization, response to mechanical signals, disease mechanisms, and the design of biomaterials. By unraveling these complex interactions, we can better understand life's fundamental processes and innovate in fields ranging from medicine to biotechnology. Fracture mechanisms in soft matter and biophysics provide a window into the failure and resilience of both biological tissues and engineered materials. By dissecting these processes, we can address critical issues in medicine, from injury prevention and tissue repair to designing robust biomaterials. Advances in this field promise to improve material performance and offer new strategies to maintain or enhance biological tissue integrity in health and disease. In both adhesion and fracture contexts, the role of temperature effects and dynamics is crucial and will be studied thoroughly. Finally, configurational transitions and phase transformations in biophysics and materials science are foundational to understanding and controlling the structure and function of both biological and synthetic materials. These processes not only reveal the adaptability and responsiveness of natural systems but also guide the design of advanced materials with tunable properties. By harnessing these transformations, we can advance technologies in medicine, nanotechnology, and biomaterials, pushing the boundaries of what materials can achieve. In both biophysics and materials science, the combined influence of temperature and mechanical rate (the speed of applied stress or deformation) is crucial for understanding material behavior under various conditions. Temperature directly affects molecular motion and bonding stability, while mechanical rate influences how materials respond to stress, often dictating whether they deform, fracture, or undergo phase transitions. Modeling the interplay of temperature effects and mechanical rate effects in biophysics and materials science requires a range of models that account for material behavior under different thermal and loading conditions. **On the one hand, thermally activated models, such as the Arrhenius model, describe how reaction rates or molecular processes depend on temperature.** They are used to describe rate-dependent processes like protein folding, polymer deformation, and crack propagation. **On the other hand, viscoelastic models (or creep and stress relaxation models), such as the Maxwell and Kelvin-Voigt models, capture the rate-dependent response of materials that exhibit both elastic and viscous behavior.** They use combinations of springs and dashpots (damping elements) to represent how materials respond to stress over time, considering the speed of deformation. They are commonly applied to biological tissues, such as muscles, tendons, and cartilage, which exhibit different behaviors under slow versus fast loading. **In this PhD project, we need models that can take into account both phenomena described by the two classes of models just mentioned, to accurately study the competition between temperature and strain rates. We will be able to do this through a bridge between micromechanics and out-of-equilibrium statistical mechanics.** It allows for the creation of complex models that predict material behavior across a range of temperatures and loading rates. In biophysics, these models are used to describe protein folding and cellular phase separation processes, where temperature and rate of stress application can induce phase changes. In materials science, they help design temperature-responsive materials like hydrogels, which change phases in response to environmental conditions.*

- 1) C. Binetti, A. Cannizzo, G. Florio, N. M. Pugno, G. Puglisi, S. Giordano, "Exploring the impact of thermal fluctuations on continuous models of adhesion", International Journal of Engineering Science 208, 104194 (2025).
- 2) T. Dupont, S. Giordano, F. Cleri, and R. Blossey, "Short-time expansion of one-dimensional Fokker-Planck equations with heterogeneous diffusion", Physical Review E 109, 064106 (2024).
- 3) A. Cannizzo, S. Giordano, "Thermal effects on fracture and the brittle-to-ductile transition", Physical Review E 107, 035001 (2023).
- 4) G. Florio, G. Puglisi, and S. Giordano, "Role of temperature in the decohesion of an elastic chain tethered to a substrate by onsite breakable links", Physical Review Research (2020) 2, 033227.
- 5) M. Benedito and S. Giordano, "Isotensional and isometric force-extension response of chains with bistable units and Ising interactions", Physical Review E (Editors' Suggestion) 98, 052146 (2018).
- 6) M. Benedito and S. Giordano, "Thermodynamics of small systems with conformational transitions: the case of two-state freely jointed chains with extensible units", J. Chem. Phys. 149, 054901 (2018).
- 7) S. Giordano, "Spin variable approach for the statistical mechanics of folding and unfolding chains", Soft Matter 13, 6877-6893 (2017).