

# Avis de Soutenance

Monsieur Julien EL HAJJ

Physique

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

*Approches numériques et expérimentales de la thermoplasmonique de nanoparticules hétérogènes dans l'eau*

dirigés par Monsieur Samy MERABIA et Monsieur Gilles LEDOUX

Soutenance prévue le **mercredi 10 décembre 2025** à h00

Lieu : Salle de conférence de la Bibliothèque Universitaire Sciences Campus de La Doua 20 Av. Gaston Berger 69100 Villeurbanne

## Composition du jury proposé

M. Samy MERABIA	CNRS Lyon	Directeur de thèse
M. Gilles LEDOUX	CNRS Lyon	Co-directeur de thèse
M. Mykola ISAIEV	CNRS Nancy	Rapporteur
Mme Anne TANGUY	INSA de Lyon	Rapporteuse
M. David AMANS	Université Claude Bernard Lyon 1	Examineur
Mme Joulia LARIONOVA	Université de Montpellier	Examinatrice

**Mots-clés :** Nanoparticules, Simulations, Transport thermique, Thermoplasmonique, Cavitation, Dynamique moléculaire,

## Résumé :

La maîtrise du transfert de chaleur à l'échelle nanométrique constitue un défi majeur pour le développement des nanotechnologies modernes. Dans ce contexte, cette thèse explore le rôle des interfaces et des nanostructures hétérogènes dans les phénomènes opto-thermiques et de cavitation, en combinant simulations atomistiques, modélisation multiéchelle et expériences. La première partie est consacrée à l'étude de la conductance thermique interfaciale (ou résistance de Kapitza) entre l'or et différents substrats cristallins et amorphes de silicium et de silice. Des simulations de dynamique moléculaire hors équilibre révèlent une amélioration significative du transfert thermique aux interfaces amorphes. Cette amélioration est attribuée à un couplage élastique plus fort entre les vibrations atomiques ainsi qu'à l'ouverture de canaux inélastiques supplémentaires liés aux interactions anharmoniques favorisées par le désordre structural. L'analyse spectrale confirme en outre le rôle complémentaire des propagons et des diffusons dans ces mécanismes. La deuxième partie concerne la réponse thermique de nanoparticules colloïdales cœur-coquille (noyau d'or avec de coquilles de silice denses ou poreuses) dispersées dans l'eau et soumises à une illumination laser impulsionnelle. Un cadre de modélisation multiéchelle est développé, combinant la théorie de Mie avec des fonctions diélectriques dépendant de la température, le modèle à deux températures et des simulations atomistiques. Les résultats montrent que de fines coquilles de silice dense ( $< 5$  nm) accélèrent fortement le chauffage de l'eau

environnante par deux mécanismes : un transfert rapide de l'énergie électronique de l'or vers la silice, et une conductance thermique interfaciale élevée entre la silice et l'eau. À l'inverse, les coquilles épaisses ou poreuses ralentissent la réponse thermique en raison d'une résistance interne accrue et d'une conductance réduite vers l'eau. L'effet de la durée des impulsions (de la femtoseconde à la nanoseconde) est également analysé. La troisième partie repose sur une approche expérimentale originale visant à étudier l'initiation de la cavitation dans l'eau sous contrainte de tension, déclenchée par le chauffage localisé de nanoparticules d'or sous excitation laser. Une cellule de tension piézoélectrique est développée afin de contrôler la pression négative dans le liquide, tandis que des protocoles de dégazage rigoureux ont permis de garantir que la nucléation de bulles est dominée par l'échauffement des nanoparticules. Les expériences mettent en évidence une corrélation claire entre la température interfaciale de l'eau et la pression appliquée. Pris dans leur ensemble, ces travaux tracent une progression cohérente allant des mécanismes atomistiques du transfert thermique interfacial, aux processus opto-thermiques multiéchelles, jusqu'aux phénomènes expérimentaux de cavitation. La méthodologie multiéchelle développée dans cette thèse contribue ainsi à une meilleure compréhension du transport de chaleur aux interfaces et de ses conséquences hydrodynamiques, tout en ouvrant des perspectives pour la nanofluidique, la conversion d'énergie et la thérapie photothermique.