

DÉLIBÉRATION N°2020-21_89
du conseil d'administration de l'université de Franche-Comté

Séance en date du 16 mars 2021

5- Affaires statutaires

Point 5.1 – Désignation du responsable scientifique à la direction du Mésocentre

La délibération étant présentée pour avis

Effectif statutaire : 36 Membres en exercice : 36 Quorum : 18 Membres présents : 23 Membres représentés : 8 Total : 31	Refus de vote : 0 Abstention(s) : 3 Suffrages exprimés : 28 M. Christophe GUYEUX : 11 M. Sylvain PICAUD : 17
---	--

Le Mésocentre de calcul scientifique de Franche-Comté est dirigé par un responsable scientifique et un directeur technique. La responsabilité scientifique est assurée par un enseignant-chercheur, nommé par la Présidente après avis du conseil d'administration de l'université.

A la suite de la démission de M. Laurent PHILIPPE, le poste de responsable scientifique est devenu vacant.

Un appel à candidature à la direction du Mésocentre a ainsi été adressé le 29 janvier 2021 et deux personnes ont fait acte de candidature :

- M. Christophe GUYEUX, professeur d'université ;
- M. Fabien PICAUD, maître de conférence.

Il est donc demandé aux membres du conseil d'administration d'émettre un avis sur chacune des candidatures après audition des candidats, lesquels disposeront de cinq minutes pour se présenter avant de se consacrer à un temps d'échange avec les membres de dix à quinze minutes.

Après que chacun des candidats a été entendu par les membres du conseil d'administration, les membres présents et représentés ont rendu un avis favorable à la nomination de M. Fabien PICAUD à la responsabilité scientifique du Mésocentre.



Besançon, le 25 mars 2021.

Pour la présidente et par délégation
La directrice générale des services

Rabia DEGACHI

Délibération transmise au Recteur de l'académie de Besançon, Chancelier des universités
Délibération publiée sur le site internet de l'Université de Franche-Comté

Lettre de Candidature
A la fonction de directeur du mésocentre de calculs de
L'Université de Franche Comté

Je soussigné M. PICAUD Fabien
Maitre de Conférence Hors Classe à l'UFR ST – Laboratoire de
Nanomédecine Imagerie et Thérapeutiques (EA 4662)
Section CNU 30

Déclare être candidat à la fonction de directeur du mésocentre de calculs
de Franche Comté.

Etant un fervent défenseur des calculs hautes performances, j'ai participé à
la réussite du centre de calculs depuis sa mise en fonction en 2010. Je
participe d'ailleurs activement au financement du mésocentre via mes
contrats ANR, comme tout utilisateur devrait le faire.

Depuis, mes projets m'ont conduit aussi à utiliser d'autres centres
régionaux (CRIANN, ROMEO, CINES) ou nationaux (JEAN ZAY) qui
m'ont permis de me familiariser avec des fonctionnements différents. Je
peux témoigner ici que le fonctionnement du mésocentre de Franche
Comté est grandement facilité par une équipe technique de haute qualité
que beaucoup de centres de calculs nous envient.

Participer à l'administration de ce centre, en collaboration étroite avec
l'équipe technique, représente pour moi une opportunité qui nous
permettra de le faire évoluer vers des standards régionaux encore plus
remarquables.

Fait à Besançon, le 27/01/2021

Signature



Identification du poste

Référence GALAXIE : 39PR4529

Corps : Professeur

Section CNU : 29-Constituants élémentaires ; 30 – Milieux dilués et optique

Profil : Théoricien en physique moléculaire : dynamique quantique des systèmes ouverts, contrôle et/ou diagnostic optique, spectroscopie des atmosphères planétaires, étude des interfaces gaz/solides

Article de référence : 46-1°

Etat du poste : vacant

Date de prise de fonction : 1^{er} septembre 2020

Localisation : Besançon

Composante de rattachement : UFR ST- La Bouloie

Laboratoire de rattachement : Institut UTINAM (UNIVERS, TRANSPORT, INTERFACES, NANOSTRUCTURES, ATMOSPHERE ET ENVIRONNEMENT, MOLÉCULES) - UMR6213

DOSSIER DE CANDIDATURE

Fabien Picaud

6, rue des muriers
39700 SALANS, France



fabien.picaud@univ-fcomte.fr



03.81.66.62.84

Pièces jointes

✓ le Curriculum Vitæ ainsi que le rapport sur mes différents travaux (24 pages)

FICHE DE SYNTHÈSE DU DOSSIER

1. Curriculum Vitae

Civilité : **Monsieur**

Nom : **PICAUD** Prénom : **Fabien**

Né le **20/03/1975**

Situation familiale : **Marié, 3 enfants**

Grade : **Maitre de conférences**

Université d'appartenance : **Université de Franche Comté –
Centre Hospitalier Universitaire**

Section de CNU : 30

Unité de recherche : **Laboratoire de Nanomédecine, Imagerie
et Thérapeutique, EA 4662**



Diplômes et Formations :

- DEUG PC (physique, chimie), Major, Mention TB, 1995
- Licence de Physique, Major, Mention B, 1996
- Maîtrise de Physique, Major, Mention B, 1997
- DEA de Chimie-Physique, Major, Mention TB, 1998
- Doctorat, Mention Très Honorable avec Félicitations écrites du Jury, 2001.
- Habilitation à Diriger les Recherches, 2007.

Postes :

- 1998-2001 : Allocataire de recherche-Moniteur de l'enseignement supérieur.
- 2001-2002 : Post-doctorant à l'école internationale de la SISSA (Trieste, Italie).
- 2002-2004 : Attaché Temporaire d'Enseignement et de Recherche.
- Depuis 2004 : Maître de Conférences
- Juin 2007 : Habilitation à Diriger les Recherches

Déroulement de carrière :

Mes collaborations, tant nationales qu'internationales, ont toujours eu pour but de confronter mes travaux essentiellement théoriques aux expériences. Ce n'est, en effet, qu'avec l'appui du résultat expérimental que la théorie peut être confirmée dans son ensemble. Par ailleurs, le soutien théorique de nombreuses expériences a permis

d'augmenter largement le niveau des publications que j'ai pu écrire. Je décris ci-dessous brièvement les 3 différentes thématiques que j'ai développées, associées à leurs collaborations (les publications liées à chacune des thématiques sont indiquées dans la partie 2 de ce dossier ainsi que leur liste complète et le détail de mes travaux et projet de recherche).

I) Croissance de nanostructures et propriétés

J'ai développé complètement dans cette thématique un code permettant de prendre en compte les phénomènes hors équilibres (dépôt, diffusion, et agrégation d'atomes) à l'origine des structures observées expérimentalement sur des surfaces à défauts. Ce code a été ensuite amélioré puis utilisé lors de thèse en cotutelle avec la Tunisie pour comprendre les phénomènes d'alliage en surface. L'apprentissage et l'utilisation de la théorie de la fonctionnelle densité en stage post-doctoral m'a permis de démontrer certaines propriétés de conductance de ces nanostructures. J'utilise depuis ces techniques pour étudier les phénomènes d'organisation moléculaire sur les interfaces (en collaboration avec l'institut FEMTO-ST de Besançon) et pour le développement de champs de forces de molécules non répertoriées dans la littérature. Les développements récents de la TD-DFT (Time Dépendent Density Functional Theory) m'ont permis d'obtenir une méthode robuste pour le tracé des spectres d'absorbance moléculaire mais aussi pour la compréhension moléculaire des réactions électrochimiques (JACS 2019). Le rôle des polarons a notamment été souligné dans ces réactions en chaîne.

II) Propriétés des nanopores

Responsable du thème « capteur », j'ai développé au cours de ces années de recherche un capteur à base de nanotubes de carbone dont le but était la détection sélective de molécules en gaz. Mes recherches m'ont progressivement amené vers des applications biologiques en détectant les propriétés de chiralité de molécules biologiques. Les collaborations avec le CEA Saclay et l'Université de Clemson (USA) nous ont permis de mettre au point un nanocapteur expérimental ultrasensible.

III) Nanomédecine, Biomimétisme et applications

Depuis maintenant 10 ans, je développe des travaux liés au transfert des propriétés du monde du vivant vers le monde solide. Mes calculs et simulations ont pour but de créer un vecteur de médicament basé sur les nanostructures biocompatibles capable d'aller transporter une molécule

thérapeutique vers une cellule malade. Plusieurs approches sont utilisées. La fonctionnalisation chimique de la surface externe du vecteur est étudiée par théorie de la fonctionnelle densité. L'internalisation du médicament dans les nanopores est étudiée par dynamique moléculaire ; aucune liaison chimique n'étant nécessaire dans ce cas. Le ciblage de la cellule cancéreuse est maintenant obtenu grâce au ligand TRAIL dont l'objectif est de détruire spécifiquement les cellules cancéreuses. Nos résultats tant expérimentaux que théoriques montrent un taux de mortalité cellulaire nettement supérieur au traitement classique (amélioration d'un facteur 10 minimum).

Des collaborations fortes sont maintenant en place avec l'Université de Tunis au travers de financement de thèses. Avec les Universités de Montpellier (ICG et IEM) et de Toulouse (LPT), 3 ANR ont été ou sont en cours pour lesquelles je suis le partenaire associé pour la modélisation. La première (TRANSION) s'est achevée en 2017 (125k€). La deuxième (IONESCO) a débuté en janvier 2019 (135k€ dont 1 postdoc de 22 mois) et la dernière vient de débuter en octobre 2019 (110k€ dont 1 postdoc de 18 mois minimum). Ces 2 derniers contrats ont une durée de 48 mois. Par ailleurs nos applications biomédicales sont maintenant reconnues puisqu'un lien fort existe avec l'INSERM de Dijon et de Montpellier dans le cadre de la vectorisation de la molécule TRAIL et de la détection d'amyloïdes.

Rayonnement Scientifique

- Prix de la meilleure thèse Bourgogne-Franche-Comté : 2002
- Organisateur du GDRE Nanotubes : Obernai 2007
- Titulaire de la prime d'encadrement doctorale (PEDR/PES) depuis 2008.
- Qualifié au titre de Professeur des Universités dans les sections 28 et 30 depuis 2008.
- Referee dans les journaux suivants : Physical Review B, Physical Review Letters, Surface Science, Journal of Chemical Physics, Chemical Phys. Letter, NanoLetters...
- Highly Valued Reviewer Certificate in Surface Science (2014).
- Prix Mésochallenge 2017
- Guest Editor of special issue in Nanomaterials journal 'IF = 4'
- Member of the Editorial Board of Nanomaterials journal 'IF = 4'
- Responsable des simulations numériques au sein du Laboratoire de Nanomédecine (2 étudiants de M2, 1 doctorant et 2 postdocs (dont 1 en cours de recrutement)).

- Membre du comité scientifique du mésocentre de calculs de Franche Comté
- Partenaire ANR JC SUPRAMEM (2007) : 20k€ (sur 197k€ obtenu)
- Partenaire ANR TRANSION (2013) : 125k€ (sur 660k€ obtenu)
- Partenaire ANR IONESCO (2019) : 135k€ (sur 480k€ obtenu)
- Partenaire ANR NanoOligo (2019) : 110k€ (sur 420k€ obtenu)
- Partenaire projet ISITE/Industrie : nanoTRAIL_Lighter (2019-2021) : 400 k€
- Partenaire projet région Delphi 135k€
- Directeur d'équipe Théranostique (NIT, 2016-2018)
- Directeur adjoint laboratoire NIT (2018--)

PUBLICATIONS			
	Depuis début de carrière	Dont ces 10 dernières années	Dont ces 5 dernières années
Nombre de publication dans des revues à comité de lecture	97	58	30
Nombre de participations à des ouvrages collectifs	2	2	1

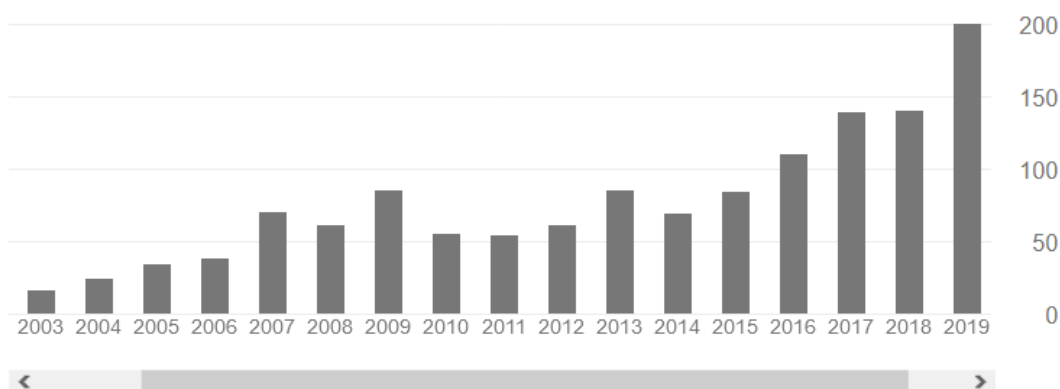
	Depuis le début de carrière	Dont ces 10 dernières années	Dont ces 5 dernières années
Nombre de séminaires invités	24	23	19
Nombre de présentations orales dans des congrès internationaux	19	18	16
Nombre de présentations écrites dans des congrès internationaux	35	32	27
Nombre de présentations orales dans des congrès nationaux	23	19	16
Nombre de présentations écrites dans des congrès nationaux	14	11	7

Citations

	Toutes	Depuis 2015
Citations	1410	730
Indice h	22	14
Indice i10	42	21



Nombre de citations par an



Listes des collaborations :



Rayonnement pédagogique :

- Responsable de l'UE « physique et mesures », L1 maths, CTU 70 HETD
- Responsable de l'UE « simulations numériques et calculs hautes performances », M1 P2N : 60HETD
- Responsable pédagogique du DAEU littéraire et scientifique : 1045 HETD
- Responsable pédagogique du FGS ST et SVT : 500 HETD
- Membre du bureau du CTU
- Membre du Conseil de Gestion du CTU
- Encadrement de 5 thèses, 8 étudiants de Master 2 et 7 de Master 1.
- Participation aux journées des Lycées (Salins les Bains) depuis 2012 : rencontre entre les classes de lycéens et les chercheurs de l'UFC pour présenter les parcours et la recherche.

FICHE DETAILLEE DU DOSSIER

I. LISTE DES TRAVAUX ET DES PUBLICATIONS

Author	Title	Year	Journal/Proceedings	Type	N°
Dienwiebel, M., Zeppenfeld, P., Comsa, G., Picaud, F., Ramseyer, C. & Girardet, C.	Effects of the diffusion anisotropy on the nucleation and growth of Xenon on Cu(110)	2000	Surface Science Letters Vol. 446, pp. L113 (IF. 1.8)	article	1
Picaud, F., Pouthier, V., Ramseyer, C. & Girardet, C.	Influence of steps on atomic adsorption and sequential growth above vicinal surfaces	2000	Surface Review and Letters Vol. 6, pp. 669 (IF. 0.4)	article	2
Picaud, F., Ramseyer, C. & Girardet, C.	Influence of step geometry and orientation on the growth of adsorbates	2000	Surface Science Vol. 454-456, pp. 106 (IF. 1.8)	article	3
Picaud, F., Ramseyer, C., Girardet, C. & Jensen, P.	Confinement effects on the growth of adsorbates: Interpretation of the formation of monatomic Ag wires on Pt(997)	2000	Physical Review B Vol. 61, pp. 16154 (IF. 3.767)	article	4
Gambardella, P., Kern, K., Picaud, F., Ramseyer, C., Girardet, C., Barreteau, C., Spanjaard, D. & Desjonqueres, C.	Growth of composition-modulated Ag/Co wires on Pt(997)	2001	Physical Review B Vol. 64, pp. 045404 (IF. 3.767)	article	5
Picaud, F., Ramseyer, C., Girardet, C. & Zeppenfeld, P.	Ordering of nitrogen molecules on the nanostructured	2001	Surface Science Vol. 482-485, pp. 1379 (IF. 1.8)	article	6

Author	Title	Year	Journal/Proceedings	Type	N°
	Cu(110)/Cu(110)- (2x1)O stripe phase				
Zeppenfeld, P., Diercks, V., David, R., Picaud, F., Ramseyer, C. & Girardet, C.	Selective adsorption and structure formation of N ₂ on the nanostructured Cu-CuO stripe phase	2002	Physical Review B Vol. 66, pp. 085414 (IF. 3.767)	article	7
Baud, S., Picaud, F. & Ramseyer, C.	Improvement of nanowire distributions with a STM tip: a kinetic Monte Carlo approach	2003	Surface Science Vol. 532-535, pp. 531 (IF. 1.8)	article	8
Girardet, C., Picaud, F. & Ramseyer, C.	Can Kinetic Monte Carlo Simulation help experimentalists to build self-organized nanowires ?	2003	Physica Scripta Vol. T68, pp. C104 (IF. 1.032)	article	9
Picaud, F., Pouthier, V., Girardet, C. & Tosatti, E.	Theoretical Fluctuations of Conductance in Monatomic Stretched Nanowires	2003	Surface Science Vol. 547, pp. 249 (IF. 1.8)	article	10
Picaud, F., Corso, A.D. & Tosatti, E.	Phonons softening in tip-stretched monatomic nanowires	2003	Surface Science Vol. 532-535, pp. 544 (IF. 1.8)	article	11
Picaud, F., Smogunov, A., Corso, A.D. & Tosatti, E.	Complex Band Structures and Decay Length in Polyethylene Chains	2003	Journal of Physics : C.M. Vol. 15, pp. 3731 (IF. 2.355)	article	12
Arab, M., Picaud, F., Ramseyer, C., Devel, M. & Girardet, C.	Molecular selectivity due to adsorption in carbon nanotube	2004	Physical Review B Vol. 69, pp. 115401 (IF. 3.767)	article	13
Langlet, R., Picaud, F., Arab, M., Devel, M. & Girardet, C.	Influence of molecular adsorption on the dielectric behavior of a single wall nanotube	2004	Journal of Chemical Physics Vol. 121, pp. 9655 (IF. 3.176)	article	14
Compoint, M., Picaud, F., Ramseyer, C. & Girardet, C.	Targeted molecular dynamics of the open-state KcsA channel	2004	Journal of Chemical Physics Vol. 122, pp. 131707 (IF. 3.176)	article	15
Picaud, F., Ramseyer, C., Girardet, C. & Kern, K.	Atomic grating formation in step flow heterogeneous growth and wavelength selection induced by confinement	2004	Surface Science Letters Vol. 553, pp. L68 (IF. 1.8)	article	16
Arab, M., Picaud, F., Langlet, R., Ramseyer, C. & Girardet, C.	Alignment of single-wall carbon nanotubes by inclusion of dipolar wires	2005	Physical Review B Vol. 72, pp. 045427 (IF. 3.767)	article	17
Baud, S., Picaud, F. & Ramseyer, C.	Surface Science Research : Chap.3 : Self organized growth at step edges aided with a tip : a kinetic Monte Carlo approach.	2005		book	18

Author	Title	Year	Journal/Proceedings	Type	N°
Compoint, M., Picaud, F., Ramseyer, C. & Girardet, C.	Zip gating of the KcsA channel studied by targeted molecular dynamics	2005	Chemical Physics Letters Vol. 407, pp. 199 (IF. 2.145)	article	19
Picaud, F., Langlet, R., Arab, M., Devel, M., Girardet, C., Chopra, S. & Rao, A.	<i>Gas-induced variation in the dielectric properties of carbon nanotube bundles for selective sensing</i>	2005	Journal of Applied Physics Vol. 97, pp. 114316 (IF. 3.726)	article	20
Picaud, F., Langlet, R. & Girardet, C.	Long nanotube dielectric properties used as sensors of large molecules : a semi-continuum approach.	2006	Journal of Chemical Physics Vol. 125, pp. 164708 (IF. 3.176)	article	21
Arab, M., Berger, F., Picaud, F., Ramseyer, C., Glory, J. & Mayne-L'Hermite, M.	Direct growth of the multi-walled carbon nanotubes as a tool to detect ammonia at room temperature	2006	Chemical Physics Letters Vol. 433, pp. 175 (IF. 2.145)	article	22
Arab, M., Picaud, F., Ramseyer, C., Babaa, R., Valsaque, F. & McRae, E.	Determination of the single wall carbon nanotube opening ratio by means of rare gas adsorption	2006	Chemical Physics Letters Vol. 423, pp. 183 (IF. 2.145)	article	23
Vardanega, D., Picaud, F. & Girardet, C.	Towards selective detection of chiral molecules using SWNT sensors	2007	Surface Science Vol. 601, pp. 3818 (IF. 1.8)	article	24
Vardanega, D., Picaud, F. & Girardet, C.	Chiral response of SWNT sensors to adsorption of amino acids: A theoretical model	2007	Journal of Chemical Physics Vol. 127, pp. 194702 (IF. 3.176)	article	25
Arab, M., Picaud, F., Ramseyer, C., Babaa, R., Valsaque, F. & McRae, E.	<i>Characterization of single wall carbon nanotubes by means of rare gas adsorption.</i>	2007	Journal of Chemical Physics Vol. 126, pp. 054709 (IF. 3.176)	article	26
Dumont, F., Ramadan, A., Picaud, F., Ramseyer, C. & Girardet, C.	First stages of epitaxial growth in presence of an extended defect : Kinetic Monte-Carlo simulations vs Rate Equation study on a vicinal surface	2007	Physical Review B Vol. 76, pp. 155419 (IF. 3.767)	article	27
Girardet, C., Vardanega, D. & Picaud, F.	Selective detection of chiral molecules by chiral single walled nanotubes	2007	Chemical Physics Letters Vol. 443, pp. 113 (IF. 2.145)	article	28
Makoudi, Y., Arab, M., Palmino, F., Duverger, E., Ramseyer, C., Picaud, F. & Chérioux, F.	Stable room temperature assembly of zwitterionic organic dipoles guided by Si(111)-7x7 template effect	2007	Angew. Chem. Int. Ed. Vol. 46, pp. 9287 (IF. 13.734)	article	29

Author	Title	Year	Journal/Proceedings	Type	N°
<u>Dumont</u> , F., <u>Picaud</u> , F., Ramseyer, C. & Girardet, C.	Conditions for organized nanoring growth using kinetic Monte Carlo simulations	2008	Physical Review B Vol. 77, pp. 153404 (IF. 3.767)	article	30
<u>Dumont</u> , F., <u>Picaud</u> , F., Ramseyer, C., Girardet, C., Ferro, Y. & Allouche, A.	Model for thermal desorption of hydrogen atoms from a graphite surface based on kinetic Monte Carlo simulations	2008	Physical Review B Vol. 77, pp. 23 (IF. 3.767)	article	31
<u>Picaud</u> , F. & Girardet, C.	Multiwalled carbon nanotubes for dielectric sensing of biological systems: An effective treatment of polarization.	2008	Surface Science Vol. 602, pp. 235 (IF. 1.8)	article	32
<u>Essolani</u> , W., Said, M., <u>Picaud</u> , F. & Ramseyer, C.	Adsorption of Pt on Ni(111) surface : introduction of an effective pair interaction model	2009	Physics Procedia Vol. 2, pp. 853	article	33
<u>Essolani</u> , W., Said, M., <u>Picaud</u> , F., Ramseyer, C., Spanjaard, D. & Desjonquères, M.	Theoretical study of the Ni growth on Pt stepped surfaces	2009	Surface Science Vol. 603, pp. 2879 (IF. 1.8)	article	34
<u>Garbouj</u> , H., Said, M., <u>Picaud</u> , F. & Ramseyer, C.	Temperature effects on the growth of Co adsorbates on Pt vicinal surfaces	2009	Physics Procedia Vol. 2, pp. 865	article	35
<u>Garbouj</u> , H., Said, M., <u>Picaud</u> , F., Ramseyer, C., Spanjaard, D. & Desjonquères, M.	Growth of perfect and smooth Ag and Co monatomic wires on Pt vicinal surfaces: A kinetic Monte Carlo study	2009	Surface Science Vol. 603, pp. 22 (IF. 1.8)	article	36
<u>Picaud</u> , F.	Theoretical comparison between the response of single and multi-walled carbon nanotubes based sensor as a function of the gas pressure	2009	Sensors and Actuators: A. Vol. 153, pp. 37 (IF:2.084)	article	37
<u>Picaud</u> , F., Girardet, C. & Rao, A.	A comparative study of single- and multiwalled carbon nanotube sensitivity to ammonia	2009	Journal of Applied Physics Vol. 105, pp. 014315-1 (IF. 3.726)	article	38
<u>Vardanega</u> , D. & <u>Picaud</u> , F.	Detection of amino acids encapsulation and adsorption with dielectric carbon nanotube.	2009	Journal of Biotechnology Vol. 144, pp. 96 (IF. 3.34)	article	39
<u>Vardanega</u> , D., <u>Picaud</u> , F. & Girardet, C.	Enantioselectivity of amino acids using chiral sensors based on nanotubes	2009	Journal of Chemical Physics Vol. 130, pp. 114709 (IF. 3.176)	article	40

Author	Title	Year	Journal/Proceedings	Type	N°
<u>Vardanega</u> , D., <u>Picaud</u> , F. & Girardet, C.	Chiral interaction in double-wall carbon nanotubes: Simple rules deduced from a large sampling of tubes	2010	Journal of Chemical Physics Vol. 132, pp. 124704 (IF. 3.176)	article	41
<u>Ramadan</u> , A., <u>Picaud</u> , F., Ramseyer, C.	Scaling of submonolayer island sizes in Ag growth on stepped Pt surfaces	2010	Surface Science, 604, pp 1576 (IF. 1.8)	article	42
<u>H Garbouj</u> , M Said, C Ramseyer, F <u>Picaud</u>	<i>Modelling the Cu mono-atomic wire formation on Pt vicinal surfaces using kinetic Monte Carlo simulations</i>	2010	Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 11/2010; 18(8):085009. · (I.F. 1.93)		43
Balme, S., Janot, J.-M., Berardo, L., Henn, F., Bonhenry, D., Kraszewski, S., <u>Picaud</u> , F., Ramseyer, C.	Biomimetic membrane constructed by confining biological ion channel in nanopores of solid-state polymer	2011	MRS BULLETIN, 36, pp 243	Article	44
F. <u>Picaud</u> , G. Herlem, and C. Girardet	Control of carbon nanotube handedness using a supramolecular chiral surface	2011	Journal of Chemical Physics, 135 pp 154703 (IF. 3.176)	Article	45
D. Bonhenry, S. Kraszewski, F. <u>Picaud</u> , C. Ramseyer, S. Balme, J.-M. Janot and F. Henn	Stability of the gramicidin-A channel structure in view of nanofiltration: a computational and experimental study	2011	Soft Matter, 7, pp 10651 (IF. 3.909)	Article	46
<u>Essolaani</u> , W., <u>Picaud</u> , F., Ramseyer, C., Gambardella, P., Saïd, M., Spanjaard, D., Desjonquères, M.-C.	Formation of one-dimensional ordered alloy at step edges: An atomistic study of the (2 Å– 1) Ni/Pt alloy on the Pt(997) surface	2011	Surface Science, 605, pp 917 (IF. 1.8)	Article	47
Balme, S., Janot, J.-M., Berardo, L., Henn, F., Bonhenry, D., Kraszewski, S., <u>Picaud</u> , F., Ramseyer, C.	New bioinspired membrane made of a biological ion channel confined into the cylindrical nanopore of a solid-state polymer	2011	Nano Letters, 11, pp 712 (IF. 13.025)	Article	48
Balme, S., Janot, J.-M., Berardo, L., Henn, F., Bonhenry, D., Kraszewski, S., <u>Picaud</u> , F., Ramseyer, C.	Ionic diffusion through a bio-inspired membrane	2011	The Open-Access Journal for the Basic Principles of Diffusion Theory, Experiment and Application	Article	49
Sebastian Kraszewski, Fabien <u>Picaud</u> , Imen Elhechmi, Tijani Gharbi and Christophe Ramseyer	What length of functionalized carbon nanotubes can passively penetrate a lipid membrane?	2012	Carbon, 50, 5301 (IF. 6.35)	Article	50
Daniela Thiele, Sebastian Kraszewski, Sebastien Balme, Fabien <u>Picaud</u> ,	Structure and ionic selectivity of a hybrid polynene/artificial	2013	Soft Matter, 9,684 (IF. 3.909)	Article	51

Author	Title	Year	Journal/Proceedings	Type	N°
Jean-Marc Janot and Philippe Déjardin	polymer solid state membrane				
Clavier A., Sebastian Kraszewski, C. Ramseyer, Fabien Picaud	Insertion kinetics of small nucleotides through single walled carbon nanotube	2013	Journal of Biotechnology, 164, 13-18 (IF. 3.34)	Article	52
Balme, S., Picaud F., Kraszewski, S., Déjardin P., Janot, J.-M., Lepoitevin M., Capomanes J., Ramseyer, C., Henn, F.	Controlling potassium selectivity and proton blocking in a hybrid biological/solid-state polymer nanoporous membrane	2013	Nanoscale, 5, 3961-3968 (IF. 6.2)	Article	53
Balme, S., Thiele D., Kraszewski, S., Picaud F., Janot, J.-M., Dejardin, P.	Ionic Selectivity of nystatin A1 confined in nanoporous track-etched polymer membrane	2013	IET Nanobiotechnology, 10.1049/iet-nbt.2013.0014 , (IF. 1.8)	Article	54
Abou Chaaya, A.; Le Poitevin, M.; Cabello-Aguilar, S.; Balme, S.; Bechelany, M.; Kraszewski, S.; Picaud, F.; Cambedouzou, J.; Balanzat, E.; Janot, J. M.; Thami, T.; Miele, P.; Dejardin, P.	Enhanced Ionic Transport Mechanism by Gramicidin A Confined Inside Nanopores Tuned by Atomic Layer Deposition	2013	The Journal of Physical Chemistry C, 117 (29), 15306-15315 (IF. 4.8)	Article	55
Picaud, F., Kraszewski, S., Ramseyer, C., Balme, S., Déjardin P., Janot, J.-M., Henn, F.	Enhanced potassium selectivity in a Bioinspired solid nanopore	2013	PCCP, 15(45), 19601 - 19607 (3.83)	Article	56
Yesylevskyy, S.; Kraszewski, S.; Picaud, F.; Ramseyer, C.	Efficiency of the monofunctionalized C60 fullerenes as membrane targeting agents studied by all-atom molecular dynamics simulations	2013	TMBC: Molecular Membrane Biology, 30(5-6):338-45	Article	57
Kraszewski, S.; Duverger, E.; Ramseyer, C.; Picaud, F.	Theoretical study of amino derivatives and anticancer platinum drug grafted on various carbon nanostructures	2013	JCP, 139, 174704	Article	58
E Duverger, T Gharbi, E Delabrousse, F Picaud	Quantum study of boron nitride nanotubes functionalized with anticancer molecules	2014	Physical Chemistry Chemical Physics, 16 (34), 18425-18432		59
S Cabello-Aguilar, AA Chaaya, F Picaud, M Bechelany, ...	Experimental and simulation studies of unusual current blockade induced by translocation of small oxidized PEG through a single nanopore	2014	Physical Chemistry Chemical Physics 16 (33), 17883-17892		60

Author	Title	Year	Journal/Proceedings	Type	N°
Y Makoudi, M Beyer, J Jeannoutot, F Picaud, F Palmino, F Chérioux	Supramolecular self-assembly of brominated molecules on a silicon surface	2014	Chemical Communications 50 (43), 5714-5716 (IF 6.71)	Article	61
Zakaria, Al Batoul; Picaud, Fabien; Pudlo, Marc; Saviot, Lucien; Chassagnon, Remi; Lherminier, Jeannine; Gharbi, Tijani; Micheau, Olivier; Herlem, Guillaume	Nanovectorization of TRAIL with single wall carbon nanotubes for promising enhanced targeted delivery against cancer cells	2015	NanoLetters.15, 891-895	Article	62
Elkhalifi, Mohammed; Duverger Eric; Boulhadour Hatem Picaud, Fabien;	Theoretical study of the interaction between carbon nanotubes and carboplatin anticancer molecules	2015	Analytical Methods, ,7, 10145-10150	Article	63
Mejri, Alia; Vardanega, Delphine; Tangour, Bahoueddine; Gharbi, Tijani; Picaud, Fabien	Encapsulation Into Carbon Nanotubes and Release of Anticancer Cisplatin Drug Molecule	2015	J. Phys. Chem. B , 119, 604-611	Article	64
Elkhalifi, Mohammed; Duverger Eric; Gharbi Tijani; Boulhadour Hatem Picaud, Fabien;	Theoretical demonstration of the potentiality of boron nitride nanotubes to encapsulate anticancer molecule	2015	Phys.Chem.Chem.Phys., 2015, 17, 30057		65
Al Batoul ZAKARIA, Guillaume HERLEM, Marc PUDLO, Fabien PICAUD, Lucien SAVIOT, X. Devaux, Eric DUVERGER and Rémi CHASSAGNON	On the experimental and theoretical evidences of stacked pyrenebutanoic acid hydrosuccinimide ester - single-walled carbon nanotube formation	2015	Chemical Physics Letters 633 (2015) 273-281	Article	66
M. Lepoitevin, F. Picaud, S. Kraszewski, JM. Janot, F. Henn and S. Balme	Controlling potassium selectivity and proton blocking by Gramicidin A confined inside track-etched membrane	2014	SICASE	Conference paper	67
Sébastien Balme1‡, Fabien Picaud2‡, Manoel Manghi3‡, John Palmeri4‡, Mikhael Bechelany1, Simon Cabello-Aguilar1, Adib Abou-Chaaya1, Philippe Miele1, Emmanuel Balanzat5, Jean Marc Janot1	Ionic transport through sub 10 nm diameter hydrophobic nanopores : experiment, theory and simulation	2015	Scientific reports	Article In press	68
Khaoula Boukari, Sebastien Balme, Jean-Marc Janot, Fabien Picaud	Towards New Insights in the Sterol/Amphoter	2015	J Membrane Biol DOI 10.1007/s00232-015-9865-y	Article	69

Author	Title	Year	Journal/Proceedings	Type	N°
	icin Nanochannels Formation: A Molecular Dynamic Simulation Study				
M. El Khalifi, a E. Duverger, b T. Gharbi, a H. Boulahdoura and F. Picaud*	Theoretical use of boron nitride nanotubes as a perfect container for anticancer molecules	2016	Anal. Methods, 8, 1367	Article	70
Elkhalifi, Mohammed; Picaud, Fabien; Mohamed BIZI	Electronic and optical properties of CeO2 from first principle calculations	2016	Anal. Methods, 2016, Advance Article DOI: 10.1039/C6AY00374E	Article	71
Isabelle Tomassoli, Guillaume Herlem, Fabien Picaud, Mohamed Benchekroun, Oscar M. Bautista-Aguilera, Vincent Luzet, Mari´a-Luisa Jimeno, Tijani Gharbi, Bernard Refouvet, Lhassane Ismaili	Synthesis, regioselectivity, and DFT analysis of new antioxidant pyrazolo[4,3- c]quinoline-3,4- diones	2016	Monatsh Chem DOI 10.1007/s00706-016-1660-7	Article	72
Khaoula Boukari, Cecile Caoduro, Raoudha Kacem, Nadia Skandrani, Christophe Borg, Hatem Boulahdour, Tijani Gharbi, Regis Delage-Mourroux, Eric Hervouet, Marc Pudlo, Fabien Picaud	Nanovectorization of DNA Through Cells Using Protamine Complexation	2016	J Membrane Biol DOI 10.1007/s00232-016-9890-5	Article	73
Fabien Picaud, Khaoula Boukari, Sébastien Balme, Jean Marc Janot, François Henn	Selectivity against proton in cation permeable hybrid solid state membrane	2016	Computational Materials Science 111 (2016) 380-386	Article	74
Cecile Caoduro, Raoudha Kacem, Khaoula Boukari, Fabien Picaud, Claire-Helene Brachais, David Monchaud, Christophe Borg, Hatem Boulahdour, Tijani Gharbi, Regis Delage-Mourroux, Eric Hervouet, Marc Pudlo	Carbon nanotube e Protamine hybrid: Evaluation of DNA cell penetration	2016	Carbon 96 (2016) 742-52	Article	75
Fabien Picaud, Guillaume Paris Tijani Gharbi, Sébastien Balme, Mathilde Lepoitevin, Vidhyadevi Tangaraj, Mikhael Bechelany, Jean Marc Janot, Emmanuel Balanzat and François Henn	Biomimetic solution against dewetting in a highly hydrophobic nanopore	2016	Soft Matter DOI: 10.1039/c6sm00315j	Article	76

Author	Title	Year	Journal/Proceedings	Type	N°
Albatoul Zakaria, Fabien Picaud, Yves Claude Guillaume, Tijani Gharbi, Olivier Micheau, Guillaume Herlem	Enhanced DR5 binding capacity of nanovectorized TRAIL compared to its cytotoxic version by affinity chromatography and molecular docking studies	2016	Journal of Molecular Recognition DOI: 10.1002/jmr.2539	Article	77
Khaoula Boukari, Guillaume Paris, Tijani Gharbi, Sébastien Balme, Jean-Marc Janot and Fabien Picaud	Confined nystatin polyenes in nanopore induce biologic ionic selectivity	2016	Journal of Nanomaterials, accepté	Article	78
Sébastien Balme, Fabien Picaud, Manoel Manghi, John Palmeri, Mikhael Bechelany, Emmanuel Balanzat, Jean-Marc Janot	Ionic Transport through Uncharged Nanopores	2016	Biophysical Journal, 110, 3, 655a doi:10.1016/j.bpj.2015.11.3504	Article Conference	79
El Khalifi M, Bentin J, Duverger E, Gharbi T, Boulahdour H, Picaud F.	Encapsulation capacity and natural payload delivery of an anticancer drug from boron nitride nanotube.	2016	Phys Chem Chem Phys. Sep 14;18(36):24994-25001		80
Dufour Florent a,1, Rattier Thibault a,1, Shirley Sarah a,1, Picarda Gaelle b, Constantinescu Andrei Alexandru a, Morlé Aymeric a, Zakaria Al Batoul c, Marcion Guillaume a, Causse Sebastien a,, Szegezdi Evad, Zajonc Dirk Mb,e, Seigneuric Renaud a, Guichard Gilles f, Gharbi Tijani c, Picaud Fabien c, Herlem Guillaume c, Garrido Carmena,g,h,i, Schneider Pascal j, Benedict Chris A.b and Micheau Olivier a	N-glycosylation of mouse TRAIL-R and human TRAIL-R1 enhances TRAIL-induced death	2017	Cell Death and Differentiation Mar;24(3):500-510	article	81
Fabien Picaud*, Guillaume Parist, Tijani Gharbi, Mathilde Lepoitevin, Pierre-Eugène Coulon, Mikhael Bechelany, Jean Marc Janot, and Sébastien Balme	Discrimination of Polynucleotide Transport through a Highly Hydrophobic Uncharged Nanopore	2017	J. Phys. Chem. C, 2017, 121 (13), pp 7525-7532	article	82
Belkahla H1, Herlem G2, Picaud F2, Gharbi T2, Hémadi M3, Ammar S3, Micheau O4.	TRAIL-NP hybrids for cancer therapy: a review.	2017	Nanoscale. 9, 5755 (doi: 10.1039/c7nr01469d)		83

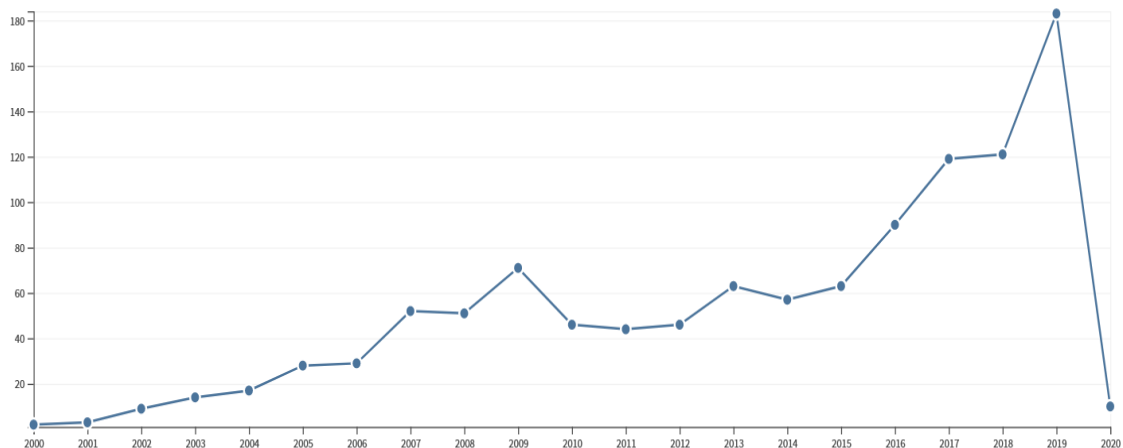
Author	Title	Year	Journal/Proceedings	Type	N°
Eric Duverger, Jeremy Bentin, Eric Delabrousse, Tijani Gharbi and Fabien Picaud	Ab Initio Study of Azomethine Derivative Cancer Drug on Boron Nitride and Graphene Nanoflakes	2017	HSA Journal of Nanotechnology: Nanomedicine & Nanobiotechnology : 4: 015	article	84
Weber, Matthieu; Koonkaew, Boonprakong; Balme, Sebastien; Utke, Ivo; Picaud, Fabien; Iatsunskyi, Igor; Coy, Emerson; Miele, Philippe; Bechelany, Mikhael	Boron Nitride Nanoporous Membranes with high surface charge by Atomic Layer Deposition	2017	ACS Applied Materials & Interfaces	article	85
Alia Méiri 1 & Fabien Picaud ² & Mohammed El Khalifi ² & Tijani Gharbi ² & Bahoueddine Tangour ¹	Controlling activation barrier by carbon nanotubes as nano-chemical reactors	2017	J MolModel (2017) 23:229	article	86
Duverger, E., Picaud, F., Stauffer, L., Sonnet, P.	Simulations of a Graphene Nanoflake as a Nanovector to Improve ZnPc Phototherapy Toxicity: From Vacuum to Cell Membrane	2017	ACS Applied Materials and Interfaces, 9 (43), pp 37554-37562		87
Yazda, K., Tahir, S., Michel, T., Loubet, B., Manghi, M., Bentin J., Picaud F., Palmeri J., Henn, F., Jourdain, V.	Voltage-activated transport of ions through single-walled carbon nanotubes	2017	Nanoscale 9, 11976-11986 DOI 10.1039/C7NR02976D		88
Sebastien Balme, *a Fabien Picaud, b Mathilde Lepoitevin, a Mikhael Bechelany, a Emmanuel Balanzatc and Jean-Marc Janota	Unexpected ionic transport behavior in hydrophobic and uncharged conical nanopores	2018	Faraday Discuss., 2018, 210, 69		89
M Mlaouah, B Tangour, M El Khalifi, T Gharbi, F Picaud	The encapsulation of the gemcitabine anticancer drug into grapheme nest: a theoretical study	2018	Journal of molecular modeling 24 (4), 102		90
Guillaume Herlem, Fabien Picaud, Claude Girardet, Olivier Micheau	Chapter 16 - Carbon Nanotubes: Synthesis, Characterization, and Applications in Drug-Delivery Systems	2019	Nanocarriers for Drug Delivery Nanoscience and Nanotechnology in Drug Delivery Micro and Nano Technologies Pages 469-529	book	91

Author	Title	Year	Journal/Proceedings	Type	N°
J <u>Bentin</u> , E Duverger, F Picaud	Influence of nanotube section on carboplatin confinement	2019	Journal of molecular modeling 25 (3), 72	Article	92
E Duverger, S Balme, M Bechelany, P Miele, F Picaud	Natural payload delivery of the doxorubicin anticancer drug from boron nitride oxide nanosheets	2019	Applied Surface Science 475, 666-675	Article	93
G. Paris, F. Picaud	On the perfect diameter condition to optimize the antibiotic nanoencapsulation : case of gramicidin	2019	Letters in Applied NanoBioScience, 8, 654-660	Article	94
G. Herlem, T. Alhedabi, F. Picaud	From Anodic Oxidation of Aliphatic α -Amino Acids to Polypeptides by Quantum Electrochemistry Approach: Beyond Miller-Urey Experiments	2019	JACS, 141, 36, 14230-14238	Article	95
A <u>Smaoui</u> , K Essalah, T Boubaker, X Assfeld, F Picaud, B Tangour	First-principles study of the reaction mechanism governing the SNAr of the dimethylamine on 2-methoxy-5-nitrothiophenes	2020	Theoretical Chemistry Accounts 139 (1), 6	Article	96
H. Bourouina, R. Yahiaoui, R. Kerid, K. Ghoumid, I. Lajoie, F. Picaud, G. Herlem	The influence of hole networks on the adsorption-induced frequency shift of a perforated nanobeam using non-local elasticity theory	2020	Journal of Physics and Chemistry of Solids, 136, 109201	Article	97
N. <u>Arroyo</u> , G. Herlem, F. Picaud	Ligand Nanovectorisation using Graphene to Target Cellular Death Receptors of cancer cell	2020	Proteins, 88, 94-105	Article	98
J <u>Bentin</u> , S Balme, F Picaud	Polynucleotide differentiation using hybrid solid-state nanopore functionalizing with α -hemolysin	2020	Soft Matter accepted	Article	99

Le tableau ci-dessous résume les différents thèmes de recherche que j'ai pu développer au cours de ma carrière ainsi que les numéros d'articles qui s'y rattachent.

Période	Domaines de recherche	Articles correspondants
1998-2001 ;	Croissance de nanostructures et propriétés <i>Nanofils, nanoréseaux</i>	1-9; 16; 18; 27; 29; 30-31; 58
2007-2010 ;	<i>Nouveaux alliages nanostructurés</i>	33-36; 42; 44; 47
2001-2002 ;	Conductance de fils métalliques	10-12
2002-2010 ;	Propriétés des nanopores (carbonés ou biologiques) <i>Capteurs à base de nanotubes de carbone</i> <i>Canaux biologiques à potassium</i> <i>Chiralité</i>	13-14; 17; 20-26; 8; 32; 37; 15; 19 32; 37 - 41
2010-	Nanomédecine, Biomimétisme et applications <i>Nanofiltration avec des membranes bioinspirées</i> <i>Délivrance d'anticancérigènes dans la cellule</i>	43; 46; 48 – 57 ; 59-99

Nombre de citations en fonction du temps (tiré de Web of Science)



II. DESCRIPTION DES ACTIVITES D'ENSEIGNEMENT PEDAGOGIQUES ET ADMINISTRATIVES

1. ACTIVITE D'ENSEIGNEMENT AU COURS DES 5 DERNIERES ANNEES

EN FRANCE :

- Dans l'établissement d'appartenance (heures équivalent TD)
- **Diplôme d'Accès aux Etudes Universitaires** : « physique » : 275HETD (TD-Bac Blanc)
- **Licence 1, option Mathématique Téléenseignement** : «Physique et Mesures » : 335HETD (cours-TD-TP à charge)
- **Licence 1, option Parcours Réussite**, « Physique » : 140HETD (TD-TP)
- **Licence 1, option Science et Technique**, « Physique » : 150HETD (TD-TP)
- **Formation Générale Scientifique** : « physique » : 125HETD (Cours-TD-TP)
- **Licence 3, option mathématique**, « Physique Statistique » : 15HETD (TD)
- **Master 1, option Physique et Physique Numérique**, « simulations numériques et calculs hautes performances » : 40HETD (TD-TP)
- **Master 2, option Physique et Physique Numérique**, « applications innovantes » : 20HETD (TD-TP)
- **PACES : cours / (préparation ED) UE3 (Electrocinétique/optique) : 20 h / (108h préparation ED)**

- **Dans d'autres établissements**
- 1^{ère} année préparatoire aux grandes écoles (Jules Haag, option PTSI) : Colles 90HETD

2. RESPONSABILITES PEDAGOGIQUES ET ADMINISTRATIVES EXERCEES AU COURS DES 5 DERNIERES ANNEES

- Depuis 2010 : responsable pédagogique du DAEU (diplôme d'accès aux études universitaires). Ce diplôme national, équivalent au baccalauréat, permet aux personnes n'ayant pas eu la possibilité de passer le baccalauréat à l'âge « normal » pour diverses raisons, d'obtenir le niveau essentiel pour poursuivre leur études ou passer de nombreux concours réclamant ce niveau. 2 options existent (littéraire et scientifique) pour lesquelles je gère toute l'intendance (forum, inscriptions, emploi du temps, absences, examens, orientation ...) pour un total de 1045HETD.
- Depuis 2010, Président de jury du DAEU pour l'obtention du diplôme.
- Depuis 2011, responsable pédagogique d'une formation d'aide à la réussite (FGS : formation générale scientifique), dont l'objectif est de remettre à niveau, mieux orienté et encadré les étudiants ayant la volonté d'améliorer leurs capacités. 2 options sont ouvertes (sciences « dures » et science de la vie) pour lesquelles je gère toute l'intendance (forum, inscriptions, emploi du temps, absences, examens, orientation ...) pour un total de 500 HETD.
- 2012 : responsable de l'unité d'enseignement Master 1 « simulations numériques et calculs hautes performances » dans le cadre du nouveau master « Physique et Physique Numérique ». 60HETD
- 2014 : élu au comité scientifique du Mésocentre de calculs de Franche-Comté.
- Depuis 2010 : membre élu du bureau du Centre de Télé Enseignement Universitaire (CTU) de Besançon
- Depuis 2010 : membre élu du conseil de gestion du Centre de Télé Enseignement Universitaire (CTU) de Besançon
- Responsable modélisation numérique au NIT 2012-2018 (2 personnes permanentes + étudiants + postdoctorants)
- Responsable équipe Théranostique au NIT 2016-2018 (14 personnes permanentes + étudiants + postdoctorants)
- Direction adjoint NIT depuis 2018 (37 personnes permanentes + étudiants + postdoctorants, Budget 55000 euros, hors contrats et projets)

- ANR TRansion (2012-2017): partenaire gérant 125000 euros. Coordinateur : F. Henn (Montpellier). Autres partenaires : V. Jourdain (ICG, Montpellier) ; S. Balme (IEMM, Montpellier), M. Manghi (LPT, Toulouse). Cout total : 583000 € - ANR Ionesco (2018-2022): partenaire gérant 135000 euros. Coordinateur : F. Henn (Montpellier). Autres partenaires : V. Jourdain (ICG, Montpellier), M. Manghi (LPT, Toulouse). Cout total : 408000 € - Contrat Prof. Invité : Pr Tangour Bahoueddine. 2 mois (2018) - ANR NanoOligo (2019-2023) : partenaire gérant 109000 euros. Coordinateur : S. Balme (IEM, Montpellier), J. Torrent (MMDN, Inserm, Montpellier). Cout total : 486000 € - Projet CRIANN accepté pour 500000 heures de calculs sur CRIAN (2019) - Projet DARI accepté pour 1200000 heures de calculs sur Jean Zay (2020)

III. ENCADREMENT DOCTORAL

Direction de theses/Post-Doc	Depuis début de carrière	Dont ces 5 dernières années
Nombre de Post-Doctorants (ANR, contrat région/FEDER)	4	3
Nombre de thèses soutenues	7	2
Nombre de thèses en cours	3	3

Encadrement Master 2 : 11 au total dont 3 pour la période 2016 – 2020

Rapporteur de thèse : 4

Examineur de thèse : 3

Responsabilités et mandats (internationaux, nationaux)

- Expert Région Montpellier « Chercheur D'avenir »
- Expert ANR
- Reviewer dans différentes revues : Surface Science, Physical Review B, Journal of physical chemistry, Nanoscale, Nanoletters, Journal of the American Physical Society
- Aide à l'organisation du congrès international (création du logo et du programme scientifique) « International Symposium on Nanotechnologies: "Research, Innovation and Economic Challenges", Casablanca (Maroc):" supporté par le laboratoire de Nanomédecine, Imagerie et Thérapeutiques et l'Université de Franche-Comté
- Membre du comité du congrès ICONAN 2016 (International Conference on Nanomedicine and nanobiotechnology (Paris (2016))).
- Membre de l'Editorial Board du journal Nanomaterials (IF =4)
- Guest Editor pour une édition spéciale du journal Nanomaterials (IF =4)