

# Simon Gravelle

Physicien de la matière molle  
et des fluides aux interfaces

Laboratoire Interdisciplinaire de Physique (LIPhy)  
140 Rue de la Physique  
38402 Saint-Martin-d'Hères



## Position actuelle

2024–auj.

**Chercheur CNRS, LIPhy, Grenoble, France**

*Fluides nanoconfinés, matière molle et simulations moléculaires*

- Depuis 2025 : coordinateur du projet ANR MicroSep (JCJC)  
*Polymères nanoporeux pour la séparation de molécules*
- Depuis 2025 : partenaire du projet ANR MIAM-CO2 coordonné par Élise Lorenceau  
*Des bulles de savons pour la capture du CO<sub>2</sub>*
- Depuis 2024 : co-direction de la thèse de Pablo Grisanti  
*Adsorption du CO<sub>2</sub> dans des matériaux nanoporeux en présence d'eau*
- Depuis 2024 : en charge de l'organisation des séminaires internes du LIPhy

## Positions précédentes

2023–2025

**Postdoctorat, bourse Marie Skłodowska-Curie (MSCA), LIPhy, Grenoble, France**

*Matériaux nanoporeux hybrides pour la séparation de mélanges fluides*

Avec Benoit Coasne (DR CNRS)

2021–2023

**Postdoctorat, Institute for Computational Physics, Stuttgart, Allemagne**

*Propriétés RMN de l'eau dans les croûtes salines poreuses, les gels et les polymères*

Avec Christian Holm (Pr. Univ. Stuttgart) et Alexander Schlaich (Pr. Univ. Hamburg)

2019–2021

**Postdoctorat, Queen Mary University of London, Londres, Royaume-Uni**

*Viscosité des suspensions de nanoparticules de graphène sous cisaillement*

Avec Lorenzo Botto (Pr. TU Delft)

2016–2019

**Postdoctorat, bourse FONDECYT, University Adolfo Ibáñez, Viña del Mar, Chili**

*Systèmes de capture de l'eau inspirés d'une plante du désert*

Avec Jacques Dumais (Pr. UAI)

2012–2015

**Doctorat, Institut Lumière Matière, UCBL, Lyon, France**

*Transport nanofluidique dans des nanocanaux bio-inspirés et nanopores synthétiques*

Supervisé par Lydéric Bocquet (DR CNRS, Pr. ENS), Christophe Ybert (DR CNRS) et Laurent Joly (Pr. UCBL)

## Publications

La liste complète de mes publications est disponible sur Google Scholar ou sur ORCID  
(ID : 0000-0003-2149-6706).

## Principaux projets de science ouverte

- [1] **LAMMPS tutorials** Créateur d'un site proposant des guides pour débutants en simulations moléculaires.
- [2] **MAICoS** Co-développeur d'un logiciel permettant l'analyse de la structure des systèmes fluides confinés et aux interfaces à partir de simulations moléculaires.
- [3] **NMRforMD** Développeur d'un outil d'analyse des temps de relaxation RMN ( $T_1$ ) basé sur les trajectoires issues de simulations.
- [4] **Compte Github** Partage systématique des données de recherche afin de maximiser leur visibilité, d'en garantir la reproductibilité et de favoriser leur réutilisation.
- [5] **MDCourse** Concepteur d'un cours en ligne guidé pas à pas, utilisant Python pour reproduire des résultats historiques en simulations Monte Carlo et en dynamique moléculaire.

## Enseignement

- Depuis 2025 IUT de Grenoble : travaux pratiques de mécanique (1ère année)
- 2021–2023 ICP, Stuttgart : Conception de travaux pratiques pour étudiants de Master *Étude des liaisons hydrogène entre un polymère et l'eau via dynamique moléculaire.*
- 2012–2015 IUT de Lyon : travaux dirigés et pratiques en sciences des matériaux (1ère année)
- 2010–2012 Lycée La Martinière Monplaisir, Lyon : khôlles de physique-chimie (CPGE)

## Centres d'intérêt

- Méthodes Simulation moléculaire, Méthode des éléments finis, Spectroscopie de corrélation de fluorescence, Programmation (Python, Bash)
- Domaines Nanofluidique, Matière molle, Fluides aux interfaces, Biomimétique, Filtration membranaire, Physique statistique
- Phénomènes Transport de fluides, Adsorption, Séparation moléculaire, Effets collectifs, Phénomènes interfaciaux
- Autres Vulgarisation scientifique, Science ouverte, Tutorat, Production de vidéos scientifiques et d'illustrations