

# Initiative Sciences & Ingénierie Moléculaire

Rapport d'activité  
2021-22



## SOMMAIRE



### INTERVIEW CROISÉE DIRECTION

**P4. CHRISTOPHE PETIT & MATTHIEU SOLLOGOUB**



### PORTEURS DE PROJET DOCTORANT - AAP2020

**P.6 CANDICE BOTUHA (IPCM) & CHAHRAZADE EL AMRI (B2A)**  
**P.8 XAVIER MICHAUT (LERMA)**  
**P.10 FABRICE CHEMLA (IPCM)**  
**P.12 GUILLAUME VIVES (IPCM)**



### PORTEURS DE PROJET POSTDOCTORANT - AAP2020

**P.14 LAHOUARI KRIM (MONARIS)**  
**P.16 CATHERINE VÉNIEN-BRYAN (IMPMC)**  
**P.18 EMMANUEL MAISONHAUTE (LISE)**  
**P.20 LOUIS FENSTERBANK (IPCM)**



### RÉSULTATS APPELS À PROJET 2022

**P.22 PROJETS DOCTORAUX**  
**P.22 PROJETS POSTDOCTORAUX**  
**P.23 PROJETS ÉQUIPEMENT**

#### **Editeur :**

Initiative Science et Ingénierie Moléculaire

#### **Contact :**

Atika Bentayeb  
atika.bentayeb@sorbonne-universite.fr

#### **Directeurs de rédaction :**

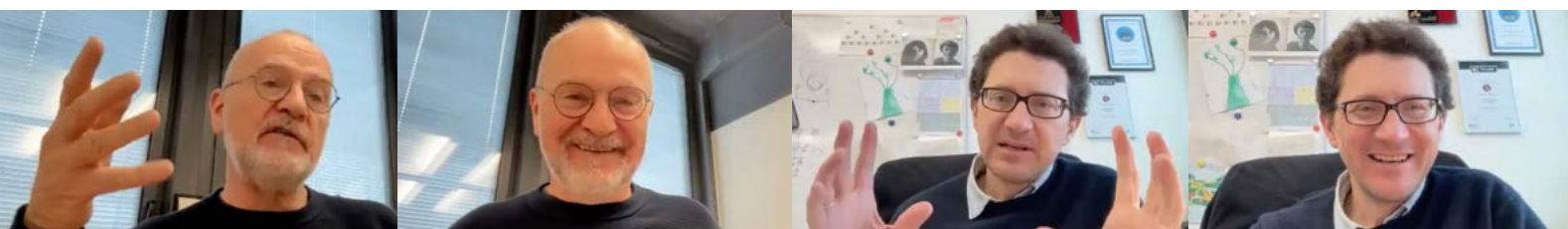
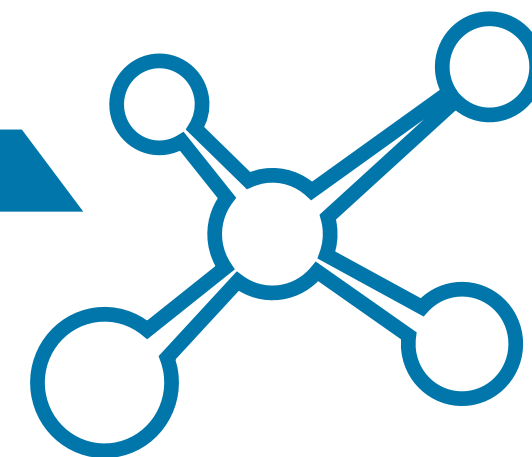
Christophe Petit, Matthieu Sollogoub

#### **Rédacteur :**

Emmanuel Sautjeau

#### **Conception, composition :**

Emmanuel Sautjeau  
Agence Scientisfaction  
Tel : 06 12 62 41 46  
Mail : emmanuelsautjeau@hotmail.com



**Vous êtes deux à la direction de l'Initiative Sciences et ingénierie moléculaires de Sorbonne Université. Quelle est l'origine du projet ?**

**Matthieu Sollogoub** – L'ISIM trouve son origine dans le Laboratoire d'excellence MiChem (Multi-scale Integrative Chemistry). Le Labex voulait inspirer de nouvelles pratiques en rassemblant les chercheurs de la chimie analytique, de la chimie synthétique et de la chimie théorique. L'idée était de grouper ces différentes façons de faire, de voir et d'approcher la chimie pour créer de nouvelles dynamiques de recherche. Au fil du temps, le Labex a favorisé de nombreuses rencontres entre chimistes aux différentes spécialités, des équipes se sont mises à réellement collaborer autour de projets innovants. Finalement, une véritable communauté a émergé !

**Christophe Petit** – En effet, l'initiative est une retombée directe du Labex MiChem : il a été structurant et a décloisonné la chimie en initiant des coopérations difficilement envisageables à l'époque. Pour imaginer la suite, nous avons choisi de dépasser la communauté des chimistes en nous appuyant sur l'échelle moléculaire revendiquée par de nombreuses disciplines expérimentales : la biologie moléculaire, la médecine moléculaire, la géoscience moléculaire, la physique moléculaire... Et même si l'initiative entre dans le cadre institutionnel de l'Idex, les thématiques sont vraiment définies par une approche bottom/up de l'ensemble des laboratoires qui participaient au Labex.

**M.S.** – C'est quelque chose à souligner, cette création d'une communauté de pensée. Vers la fin du Labex, nous avons lancé des réunions de réflexions et des projets très avancés scientifiquement ont été proposés, mais le dénominateur commun à

tous était l'échelle moléculaire. En mettant cette approche au centre de l'ISIM, nous avons pu nous étendre à d'autres disciplines : parti d'un noyau de chimiste, l'initiative est interdisciplinaire aujourd'hui et réunit des physiciens, des biologistes, des médecins, des ingénieurs, des astrophysiciens...

**C.P.** – En montant le projet, nous avons aussi veillé à nous inscrire en complémentarité des instituts qui émergeaient dans le paysage scientifique de Sorbonne Université, comme l'Institut de Science des Matériaux ou l'Observatoire des Patrimoines... Il était important que notre communauté trouve sa place dans la cartographie scientifique de l'Alliance.

**Les thématiques sont définies par une approche bottom/up de l'ensemble des laboratoires.**

**Quel est le périmètre de l'ISIM ?**

**M.S.** – Il n'y a pas de périmètre défini, c'est une question d'état d'esprit... et d'échelle moléculaire ! Plus d'une vingtaine de laboratoires de l'Alliance SU ont déjà manifesté leur intérêt pour l'initiative.

**Combien de projets de recherche financés aujourd'hui et dans quelles disciplines ?**

**M.S.** – Nous avons la possibilité de financer chaque année 2 ou 3 projets de recherche doctorants et 2 ou 3 projets de recherche post-doctorants, en fonction des projets déposés, de leur qualité et de leur aboutissement. Aujourd'hui, nous finançons 5 projets doctorants et 5 projets post-doctorants en physique, biologie, sciences des matériaux, nanosciences et astrophysique.

**C.P.** – En ce sens, c'est bien différent de ce que nous avons avec le Labex qui fonctionnait sur des axes bien définis. Avec l'ISIM, le point de rencontre des différents projets est de chercher ce que l'échelle moléculaire apporte à une problématique spécifique.

**Justement, pourquoi ne pas avoir choisi des axes thématiques prometteurs ?**

**M.S.** – Nous avons identifié quelques thématiques inonvantes : le biomimétisme, la photosynthèse artificielle, l'origine cosmique de la vie, la biologie synthétique, la vie artificielle, la transmission de l'information... Mais finalement, les thématiques émergent en fonction des projets. Nous insistons juste sur l'échelle moléculaire en action, l'étude *in operando*, les compréhensions de système. L'idée est d'aller à la recherche de ce qu'il se passe au niveau moléculaire. Ainsi le cadre est plus léger, plus ouvert et favorise des interactions libres entre laboratoires et disciplines : l'important est d'entretenir l'esprit collaboratif et interdisciplinaire. Une des conditions nécessaires est en effet de porter une collaboration.

**A part ce soutien actif à la recherche innovante, quelles sont les autres actions de l'ISIM ?**

**M.S.** – L'initiative veut assurer une mission d'animation de la vie scientifique qu'il a été difficile de mettre en œuvre jusqu'à présent. Pour l'instant, nous essayons au possible de relayer sur notre site internet tous les événements sur la thématique moléculaire pour faire vivre la communauté et nous comptons assurer maintenant le financement de colloques thématiques au fil de l'eau. Nous voulons aussi mettre très prochainement en place une action entièrement pilotée par l'initiative, les « séminaires du soir » : une soirée organisée une fois par mois sur un thème différent, avec un invité prestigieux accompagné d'un ou deux chercheurs de l'ISIM. Au niveau de la formation, nous réfléchissons également au besoin d'enseignement moléculaire à l'interface avec les autres disciplines que la chimie. Il semblerait qu'il manque cet aspect moléculaire dans le parcours d'un étudiant en biologie ou en physique par exemple.

**C.P.** – Enfin, nous avons une autre possibilité de financement : pour des projets doctorants prometteurs, mais que nous n'avons pas pu soutenir, nous proposons de financer des stages de Master pour aider à amorcer et lancer le projet.

**Comment fonctionnez-vous à deux ? Quelle est votre histoire ?**

**C.P.** – Dans la continuité du Labex, c'est une direction à deux têtes,

**M.S.** – Nous sommes très différents du point de vue de nos spécialités... et finalement très complémentaires.

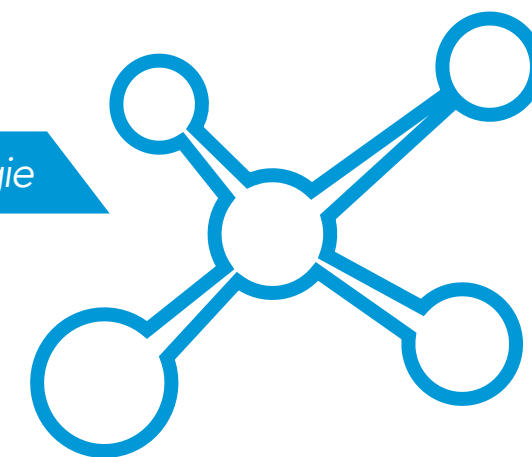
**Apporter une réponse à l'échelle moléculaire pour la résolution d'un problème disciplinaire.**

**C.P.** – Ce qui est remarquable, c'est qu'en travaillant ensemble depuis plusieurs années dans l'animation de ces structures, nous réalisons que certains de nos thésards travaillent naturellement sur nos deux laboratoires, en dehors des cadres du Labex ou de l'ISIM.

**M.S.** – Avant le Labex, nous nous connaissions, mais il y avait une forme de méfiance mutuelle alors qu'aujourd'hui, c'est exactement le contraire : c'est de l'amitié et du respect. J'ai par exemple un étudiant qui a appris la microscopie dans le laboratoire de Christophe : je n'aurais jamais imaginé qu'un de mes étudiants apprenne la microscopie !

**C.P.** – Notre histoire illustre bien l'intérêt des initiatives et des instituts : d'un espace institutionnel rigide au premier abord peut se créer tout un réseau informel qui amène naturellement les chercheurs à travailler ensemble et à collaborer. Ça enrichit la réflexion et *in fine* la qualité des résultats.



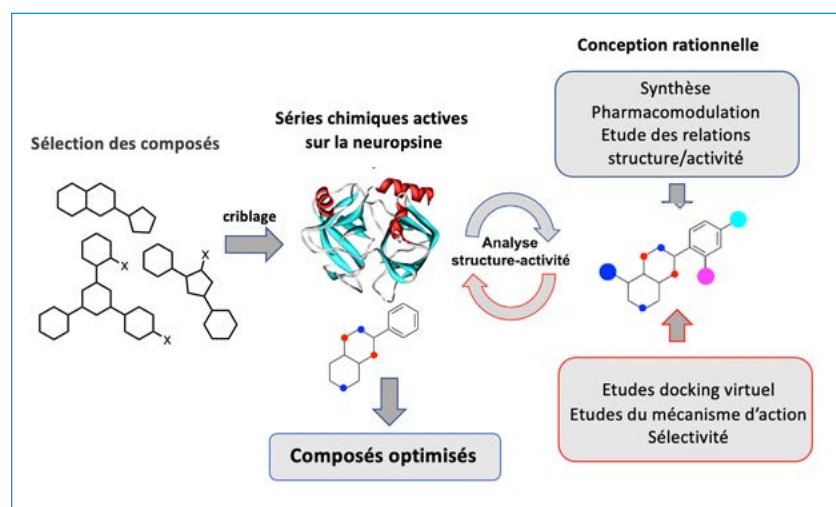


## Design and pharmacological evaluation of neuropsin inhibitors as therapeutics and potential diagnosis tools for Alzheimer's Disease and associated dementias

### Quel est le sujet de votre projet de recherche ?

Le projet déposé s'intéresse à la neuropsine : elle est une cible thérapeutique émergente dans le traitement de la maladie d'Alzheimer et des maladies de démence associées. Plus précisément, le travail de recherche consiste à concevoir des inhibiteurs de la neuropsine (KLK8) avant de nous livrer à leur évaluation pharmacologique.

Nous avons choisi de développer une action de recherche dans cette direction en raison du vieillissement de la population : c'est un enjeu sociétal majeur et de santé publique, il faut en effet se préparer dès aujourd'hui à faire face à l'augmentation des pathologies liées à l'âge. Ainsi, contribuer à développer des stratégies thérapeutiques innovantes et préventives pour vieillir en bonne santé constitue un défi important.



### Quel serait le but à atteindre sur ces 3 années ?

Nous voulons clairement faire progresser nos connaissances des processus sous-jacents au vieillissement et faire émerger de nouveaux concepts, de nouvelles idées comme de nouveaux objets moléculaires pour aller traiter et sonder ces mécanismes biologiques.

La maladie d'Alzheimer est une maladie dévastatrice qui touche plus de 33 millions de personnes dans le monde ; et aujourd'hui, il n'existe aucun traitement des causes de la maladie. Le projet ambitionne de développer les premiers inhibiteurs organiques de la KLK8 : cela permettrait de fournir des outils phar-

macologiques pour mieux comprendre l'implication de la neuropsine dans la maladie d'Alzheimer. Nous espérons que ce travail nous permettra également de valider le concept que l'inhibition de la KLK8 peut réduire les caractéristiques cliniques de la maladie. Cette preuve ouvrirait la voie à un possible traitement ou à un outil de diagnostic précoce de la maladie.

### Quel type de collaborations porte votre projet de recherche ?

Ce projet est fortement collaboratif et interdisciplinaire car il se situe à l'interface de la chimie et de la biologie. Il mobilise deux équipes particulièrement complémentaires, l'une en chimie médicinale pour concevoir et synthétiser des molécules aux propriétés inhibitrices et l'autre en enzymologie-pharmacologie moléculaire et biologie du vieillissement pour l'évaluation mécanistique *in vitro* et *in vivo* de ces composés. Cette recherche est le fruit d'une collaboration de longue date entre les deux équipes : nous avons notamment travaillé ensemble sur la détection de protéines carbonylées à l'aide d'outils moléculaires fluorescents afin de mieux comprendre les processus d'oxydation liés au vieillissement.

La complémentarité et l'expertise de chacune des équipes apporte une réelle plus-value pour ce projet interdisciplinaire. Et ça nous permet aussi de contribuer au renforcement comme à la visibilité de l'interface chimie-biologie à Sorbonne Université.

La complémentarité et l'expertise de chacune des équipes apporte une réelle plus-value pour ce projet interdisciplinaire. Et ça nous permet aussi de contribuer au renforcement comme à la visibilité de l'interface chimie-biologie à Sorbonne Université.

### Porteurs de projet :

**Vincent Corcé** (Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

**Candice Botuha** (Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

**Chahrazade El Amri** (Adaptation Biologique et Vieillesse - B2A)

### Doctorant :

**Élodie David** (École doctorale Chimie organique et Biologie)

### Votre projet est lauréat dans l'appel à projet pour un contrat doctorant. Comment s'est passé le recrutement ?

Nous cherchions une personne très motivée avec une appétence prononcée pour la recherche à l'interface chimie / biologie avec une expérience significative en synthèse organique, en stage particulièrement, et en chimie médicinale. Une annonce est parue sur le site de l'école doctorale de chimie moléculaire ED 406 et nous avons reçu 5 candidatures. Sur la base des dossiers nous avons sélectionné deux candidats. La sélection finale du candidat s'est effectuée par entretien avec les membres du consortium afin d'évaluer la meilleure adéquation avec le profil recherché et la motivation du candidat pour effectuer une thèse.

Après audition, nous avons sélectionné la candidature d'Elodie David : sa motivation, son parcours universitaire très coloré « Interface Chimie/Biologie » et son ouverture à l'international ont convaincu

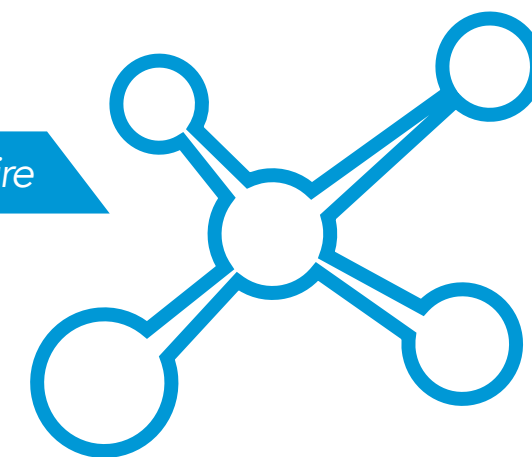
le jury. Elodie a suivi les enseignements de l'Unité d'Enseignement Franco-Québécoise d'Enzymologie. De plus, elle a déjà effectué plusieurs stages dans ces thématiques.

### Selon vous, que peut apporter l'ISIM dans le champ de la recherche de SU ?

L'initiative permet d'établir et de renforcer des collaborations entre équipes multi-disciplinaires et de permettre la concrétisation de projets innovants encore au stade exploratoire. L'AAP ISIM encourage et soutient des équipes de Sorbonne et plus particulièrement des projets en collaboration. Les résultats obtenus à l'issue de ce projet seront valorisés et publiés dans des journaux internationaux avec la labélisation de l'initiative : ce label pour notre projet nous permettra de développer des collaborations plus larges, à l'international, et avec des industriels ou des sociétés de biotechnologie, un bon moyen de renforcer notre visibilité et notre collaboration.



de gauche à droite - Chahrazade El Amri, Candice Botuha, Elodie David, Vincent Corcé



## H2SPIN@ASTROWATER : Influence de la conversion de spin nucléaire des molécules H2 sur la chimie froide du milieu interstellaire - Expérience et Modélisation

**Vous êtes lauréats de l'AAP 2021 pour un projet de recherche sur le milieu interstellaire. Plus précisément, quel est votre sujet ?**

Le projet porte sur la quantification des conséquences chimiques sur le milieu interstellaire d'une propriété quantique particulière de la molécule de dihydrogène : son spin nucléaire. Nous voulons modéliser l'influence de cette chimie sélective en spin et des interactions sur les glaces interstellaires pour mieux comprendre l'origine des émissions infrarouges de molécules hydrogénées (comme l'eau) présentes dans des régions de l'espace appelées Régions Dominées par les Photons (PDR).

**Pourquoi orienter vos recherches dans cette direction ?**

Les étoiles constituent une part importante de la matière des galaxies. Elles sont les objets stellaires les plus observés par les astrophysiciens et leur cycle de vie est directement influencé par le rôle primordial du cycle d'évolution de la matière moléculaire. Pour mieux comprendre les observations fournies par les télescopes de plus en plus performants, comme le James Webb Space Telescope récemment déployé derrière la Terre par opposition au Soleil, il faut pouvoir décrire les nuages moléculaires interstellaires, où l'hydrogène est l'élément le plus abondant, avec des modèles astrochimiques les plus riches et les plus complets possibles. Pour cela, un grand nombre de processus chimiques et de données quantitatives doivent être déterminés par des expériences de laboratoire sur Terre.

**Comment va se dérouler le travail de recherche de Japhar Michoud, le doctorant lauréat ?**

Le projet de recherche comporte deux axes imbriqués : un axe modélisation et un axe expérimentation.

D'une part, nous nous attaquons à la modélisation des processus physico-chimiques liés à l'état de spin nucléaire (ortho ou para) de la molécule H<sub>2</sub> pour décrire leurs influences sur les molécules hydrogénées. Japhar Michoud travaille actuellement sur la modélisation d'une chimie sélective de la molécule d'hydrogène en fonction de son état de spin ; il utilise un code de calcul astrochimique appelé PDR Meudon code. Cette chimie sélective influence les quantités de produit de réaction avec des ions dans les régions froides (typiquement 10 K ou -263 °C) pour former des molécules simples comme l'eau, l'ammoniac, le formaldéhyde. Ces molécules sont observables à l'aide de télescopes radiométriques ou infrarouge. Grâce à ces observations, nous pourrions calibrer son modèle : nous avons ciblés la barre d'Orion qui est un objet interstellaire dit Région Dominé par les Photons (PDR) et plus particulièrement les molécules d'eau qui le composent. Une analyse couplée du modèle et des observations permettra de mieux comprendre comment se forment ces molécules qui sont à la base d'une chimie plus complexe.

Mais une modélisation précise suppose une description la plus fidèle possible des processus qui modi-

**Porteurs de projet :**

**Franck Le Petit** (Laboratoire d'Etudes du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique et Atmosphères - Observatoire de Paris)

**Xavier Michaut** (Laboratoire d'Etudes du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique et Atmosphères - Sorbonne Université)

**Doctorant :**

**Japhar Michoud** (Ecole Doctorale Physique en Ile-de-France EDPIF Université)

fient les abondances des espèces *ortho* et *para* des molécules de dihydrogènes dans les nuages froids du milieu interstellaire. Dans ces régions, les molécules sont amenées à interagir avec des grains solides recouverts de films de glace sur lesquels des processus physico-chimiques modifient ces rapports d'abondance. Le deuxième volet du projet consiste donc à mesurer en laboratoire les effets de conversion de spin nucléaire induits par les interactions de la molécule d'hydrogène lorsqu'elle est collée sur la glace et lorsqu'elle s'en échappe. Un dispositif expérimental appelé COSPINU2 est aujourd'hui en cours de calibration. Il permettra de faire des mesures de spectroscopie infrarouge sur des échantillons de glace maintenus au plus froid à 6 K et sous un vide ultra de l'ordre de 10<sup>-10</sup> mbar. Il sera complété dans l'année par un dispositif spectroscopique UV qui permettra de mesurer les quantités de molécules *ortho* et *para* éjectées de la surface par les effets thermiques.

Nous espérons que notre travail participera ainsi à une meilleure interprétation des observations de la matière moléculaire et à une compréhension plus fine de la formation des systèmes stellaires et planétaires.

**En quoi votre projet nécessite-t-il une collaboration avec d'autres équipes ?**

Les études récentes montrent un besoin pressant de confronter les modèles astrochimiques aux observations : les modèles deviennent de plus en plus complexes et doivent prendre en compte un nombre croissant de processus pour être fidèles aux observations. Seules les études expérimentales ou théoriques en laboratoire peuvent aujourd'hui fournir les données qualitatives et quantitatives nécessaires à l'amélioration des modèles astrochimiques.

Notre projet est bâti sur la complémentarité interdisciplinaire de 4 équipes qui travaillent simultanément sur les modèles (LERMA-Observatoire de Paris et IPAG-Grenoble), les observations (JPL-

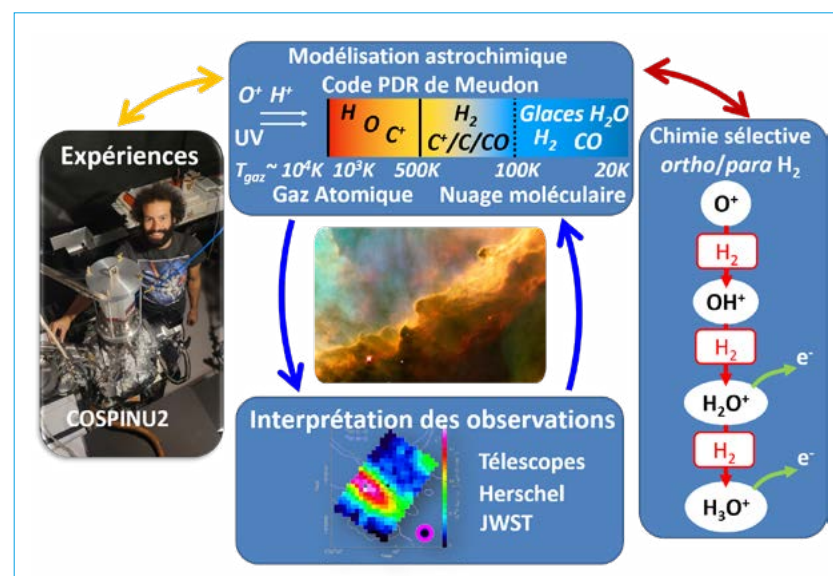
CALTECH-NASA) et les expériences de laboratoire (LERMA-Sorbonne Université).

**Comment Japhar Michoud a-t-il été retenu pour ce travail de thèse ?**

Nous avons effectivement retenu Japhar : son stage de Master 2 Physique de Sorbonne Université l'a amené à travailler sur les effets de conversion de spin nucléaire de H<sub>2</sub>O en matrice de gaz rare à basse température (typiquement 4 K). Il avait donc les connaissances de base idéales pour s'approprier notre sujet à l'interface des expériences de laboratoire et des problématiques astrophysiques.

**Pourquoi avoir répondu à l'AAP de ISIM plutôt qu'un autre ?**

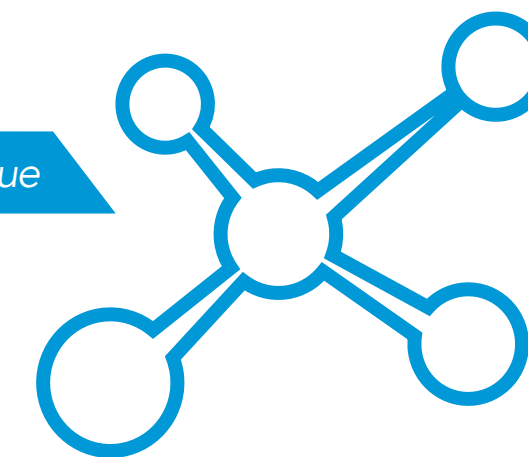
Parmi les critères de sélection des projets soutenus par l'initiative, l'interdisciplinarité est centrale. L'initiative finance volontairement des projets doctoraux à l'interface entre plusieurs disciplines (physique, chimie,



de gauche à droite - Franck Le Petit, Japhar Michoud, Xavier Michaut

astrophysique, astrochimie, modélisation, dans notre cas) ; ce qui n'est pas forcément facile dans le cadre des appels d'offre classiques des écoles doctorales. Notre projet cohabit toutes les cases sur le papier. Et la labellisation de notre projet par un dispositif sélectif et d'excellence comme celui des initiatives thématiques de SU apporte un gage de grande qualité à notre travail aux yeux du monde de la recherche.



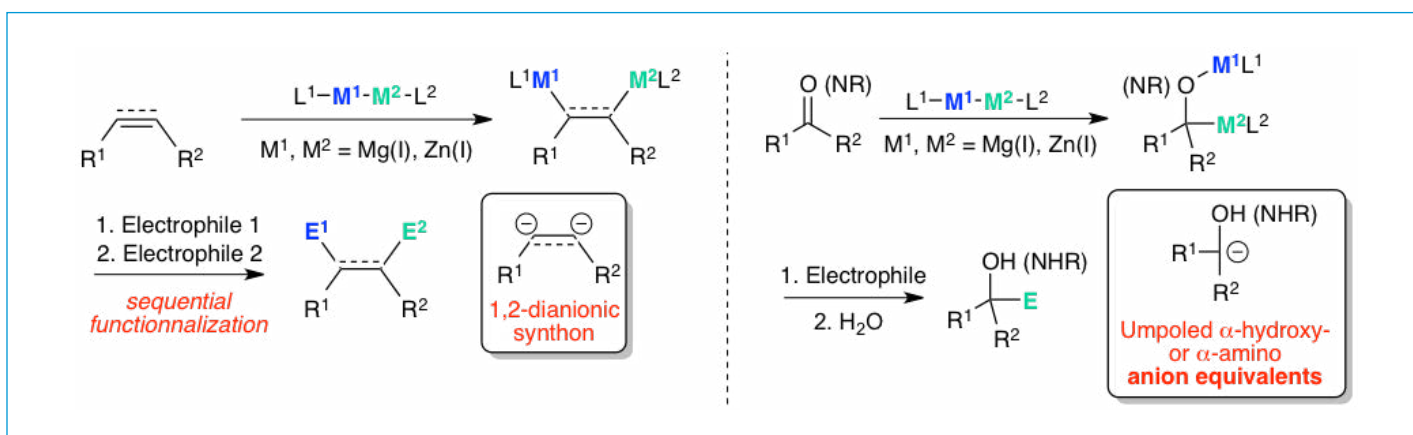


# LoVaMOR: Low Valent Metals : Organometallic Reactivity

## Votre projet porte l'acronyme LoVaMOR. En quoi consiste-t-il ?

LoVaMOR est l'acronyme de Low Valent Metals : Organometallic Reactivity. Nous allons étudier la réactivité de nouvelles espèces organométalliques à base de zinc et de magnésium : ce sont des espèces assez rares, de basse valence (c'est-à-dire dont le degré d'oxydation formel est bas) et dont la réactivité ne semble pas ou très peu explorée dans la littérature. Nous allons plus particulièrement étudier la réactivité des liaisons multiples carbone-carbone ou carbone-oxygène dans le cas de substrats organiques classiques, comme des alcynes ou des dérivés carbonylés.

Notre projet porte donc sur la réactivité des composés organiques vis-à-vis de ces nouveaux composés organométalliques à base de zinc et de magnésium pour essayer de découvrir de nouvelles réactions. Nous ne sommes pas dans le domaine d'applications de types matériaux mais plutôt dans le domaine de la synthèse multi-étapes. Nous avons comme ambition de trouver des raccourcis dans la succession des étapes de synthèse et/ou de diminuer les quantités de solvants. L'idée est de trouver une réactivité et une sélectivité spécifiques pour créer de nouvelles méthodes de synthèses qui amélioreraient le rendement ou la rapidité des synthèses.



Principaux objectifs du projet LoVaMOR

## Pourquoi avoir choisi ces espèces à base de zinc ou de magnésium ?

Nous les avons choisies par analogie avec des espèces connues à base de bore : il existe depuis très longtemps des composés de type bore à basse valence. Mais depuis 2007, nous savons qu'il existe des espèces analogues à base de zinc et depuis 2009 à base de magnésium. La réactivité de ces espèces est mal connue. Comme les espèces correspondantes à base de bore ont trouvé beaucoup d'applications aujourd'hui, nous nous sommes dit qu'il serait intéressant d'étudier les réactivités particulières de ces nouvelles espèces à base de zinc ou de magnésium.

La chimie du bore est une chimie assez ancienne et extrêmement développée : elle autorise beaucoup de réactions, généralement des réactions catalytiques, qui permettent d'effectuer des transformations spécifiques utilisées avec succès en chimie de synthèse.

## Quel est l'objectif idéal de votre recherche ?

Notre objectif serait qu'à partir de ces nouvelles espèces nous puissions former des composés 1,2-bimétalliques, c'est-à-dire de nouveaux composés porteurs d'une liaison organométallique sur deux carbones adjacents, ce qui autoriserait une réactivité spécifique sur chacun des deux carbones. A partir d'un seul composé de départ on serait alors capable de brancher deux fonctionnalités différentes, à volonté et sélectivement. L'idée est de prendre une triple liaison, de la faire réagir avec un composé de basse valence pour obtenir un alcène portant un métal sur chacun des deux carbones voisins puis de faire réagir ces deux organométalliques successivement. Ce type de réaction n'est pas connu et permettrait de former des alcènes porteurs de deux substituants variables à volonté en une seule étape. Généralement ces préparations se font en plusieurs étapes et les réaliser en une seule étape permettraient des économies de temps, de solvant...

## Porteurs de projet :

**Fabrice Chemla**  
(Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

**Stéphanie Halbert**  
(Laboratoire de Chimie Théorique)

## Doctorant :

**Mikaël Le Roch**  
(École doctorale Chimie Moléculaire)

## Quelles sont les applications de ce type de chimie ?

Généralement, les applications sont dans le domaine de la synthèse de molécules d'intérêt biologique. Mais notre projet se positionne clairement dans la recherche fondamentale : l'intérêt principal est de comprendre la réactivité de ces espèces rares et atypiques qui ne sont pas présentes sur Terre et de développer de nouvelles connaissances sur ce type de liaison. Il faut comprendre que le zinc existe sur Terre sous forme de zinc métal, comme sur les toits de Paris, ou sous forme d'oxydation 2, le blanc de zinc utilisé en peinture par exemple. Nous nous intéressons au zinc d'oxydation 1 qui n'existe pas sur Terre à l'état naturel, ce qui pose de sérieux problèmes conceptuels de compréhension sur la nature des liaisons que ce Zn<sup>1+</sup> va pouvoir développer.

C'est pourquoi ce projet de recherche est fortement collaboratif : il est monté en partenariat avec le Laboratoire de Chimie Théorique car il nécessite une expertise en modélisation. Dans mon équipe, nous travaillons sur le côté pratique, l'expérimentation, et dans l'autre équipe du LCT, Stéphanie Halbert travaille sur la modélisation pour comprendre ce que nous observons et tenter de prévoir ce que nous pourrions observer.

## Comment fonctionne cette collaboration ?

Nous avons déjà travaillé sur d'autres projets du même type avec le LCT, ce sont des collègues de Jussieu qui abordent la chimie organométallique par la voie de la recherche théorique. De leur côté, ils font des calculs ab initio et modélisent pour reproduire par le calcul ce que nous observons par l'expérimentation. L'idée est de développer un modèle qui reproduisent le plus fidèlement possible la réalité.

Mikaël Le Roch, le doctorant lauréat du projet, mène à la fois les expérimentations mais a également commencé à travailler sur la partie modélisation et calcul du projet. Et il a déjà bien avancé puisqu'il a trouvé une méthode de calcul qui permet de reproduire certaines de nos observations expérimentales.

## Comment s'est déroulée la sélection du doctorant ?

Nous avons reçu assez de candidatures pour réduire notre sélection à l'entretien de trois candidats. Mikaël est sorti du lot : il était celui qui avait la formation la plus avancée dans les deux domaines théoriques et pratiques.

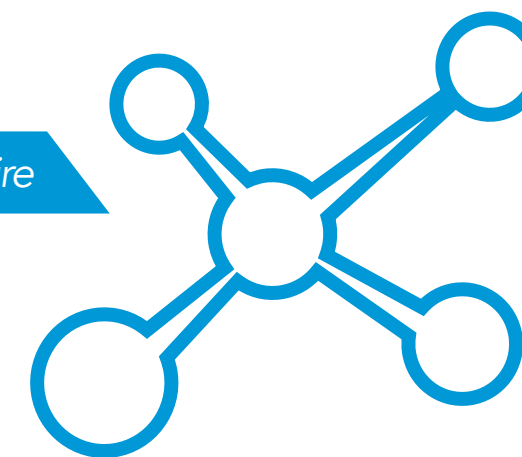
Le projet nécessite un étudiant qui possède cette double compétence avec une formation solide en chimie théorique et qui soit un chimiste organicien qui maîtrise les manipulations expérimentales. Le projet se déroulera avec ces deux aspects en simultané et le doctorant aura donc deux superviseurs : Stéphanie Halbert pilote les aspects de modélisation et je pilote les aspects expérimentaux. Mikaël aura finalement une double compétence à la fin de son doctorat.



Mikaël Le Roch au travail.

## Que pensez-vous des projets de l'ISIM et de ses missions ?

Isim apporte la possibilité d'introduire concrètement de l'interdisciplinarité dans des programmes de recherche. Les appels à projets sont aujourd'hui de plus en plus interdisciplinaires et collaboratifs mais les initiatives ont l'ambition louable et affichée de consolider ces démarches collaboratives. Et l'ISIM permet aussi de renforcer la communauté des chimistes autour d'objets de recherche communs.



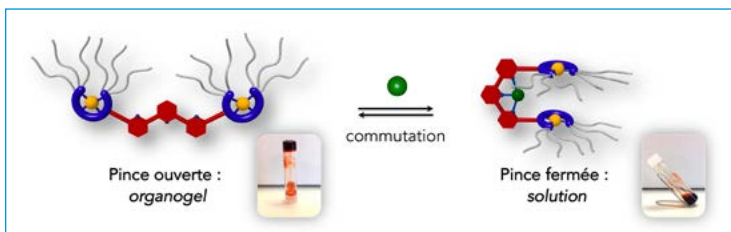
# SwitchGel: Molecular tweezers for multifunctional switchable organogels

## Votre projet est lauréat de l'AAP doctorant 2021 de l'ISIM. Quel est votre sujet de recherche ?

Notre projet consiste à développer des systèmes moléculaires commutables : des organogels multifonctionnels qui répondent à des stimuli et exploitent le mouvement mécanique de pinces moléculaires. Notre système passe d'une forme à l'autre, de la position fermée à la position ouverte, par un stimuli, en l'occurrence l'ajout ou le retrait d'un cation métallique.

Nous avons ainsi une machine moléculaire à deux positions et notre idée est d'utiliser ce passage de l'une à l'autre pour contrôler des propriétés gouvernées à l'échelle moléculaire. Dans notre projet, nous voudrions exploiter le changement géométrique entre les deux configurations pour déclencher une transition entre une solution et un gel. Et nous voulons en plus que ce passage au gel déclenche une modification de propriétés optiques pour obtenir des matériaux intelligents.

Pour mener au mieux ce projet, il est nécessaire de pouvoir simultanément travailler sur la synthèse moléculaire du matériau et sa caractérisation : le projet est donc bâti sur la collaboration de deux laboratoires, l'IPCM auquel j'appartiens et le LRS de Clément Guibert, co-porteur du projet.



## Quels sont les savoir-faire de chacun ?

Dans mon laboratoire, le travail sera de préparer la synthèse de la base moléculaire pour sélectionner les propriétés désirées. Nous avons déjà travaillé sur la luminescence en intégrant du platine dans le système. De son côté, Clément Guibert du LRS apporte l'expertise de l'étude de systèmes auto-assemblés : il est spécialiste de la caractérisation physico-chimique des matériaux avec différentes techniques de diffusion de rayonnement : diffusion dynamique de la lumière, DLS, diffusion de rayons X aux petits angles, SAXS...

## Quelles sont les difficultés liées à ce projet ?

Prévoir le comportement de gélification d'une molécule est très difficile : c'est empirique, on crée les molécules puis on teste avec différents solvants, à différentes concentrations puis... on observe. Des fois, il y a gélification, des fois non.

## Plus précisément, quel sera le travail de thèse de votre doctorant ?

Une grosse partie de son travail est la synthèse des molécules puis leur caractérisation à l'échelle moléculaire. La difficulté réside dans la limite de certaines techniques d'analyses. La RMN par exemple est moins efficace avec des assemblages complexes. D'où la nécessité de faire appel à différentes méthodes pour comprendre ces phénomènes dans le détail. Il y aura donc un important travail de synthèse organique de nos pinces en plusieurs étapes. Ensuite, nous étudierons les commutations à l'aide de dosages avec différentes méthodes d'observation pour avoir accès aux propriétés d'agrégation. Enfin, nous nous attacherons à la caractérisation des gels obtenus.

Nous travaillons sur une molécule comportant des complexes platine-salén qui ont des propriétés de luminescence bien connues. Cette molécule forme un gel dans certains solvants sous sa forme ouverte. Quand elle est fermée, elle reste en solution et quand elle se réouvre on revient au point de départ donc sur un gel. C'est un premier résultat encourageant !

Mais il reste beaucoup de travail pour comprendre les mécanismes : étudier ces gels, observer l'empilement des molécules, mieux comprendre leurs interactions qui induisent une gélification... Et il faudra s'intéresser à leurs propriétés de luminescence. On a introduit une partie contenant du platine qui permet d'avoir de la phosphorescence, il reste à voir si ça marche aussi dans le gel. Nous pourrions ensuite envisager d'autres types de systèmes avec du zinc à la place du platine pour avoir d'autres types d'interactions intermoléculaires et aussi d'autres propriétés, par exemple de la fluorescence au lieu de la phosphorescence.

## Porteurs de projet :

**Clément Guibert**  
(Laboratoire de Réactivité de Surface)

**Guillaume Vives**  
(Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

## Doctorant :

**Pablo Msellem**  
(École Doctorale Chimie Moléculaire Paris Centre)

## Comment s'est montée la collaboration ?

C'est notre première collaboration pour un projet de recherche mais nous nous sommes déjà rencontrés auparavant à l'occasion des Olympiades Internationales de la Chimie de Paris en 2019 : Clément participait à l'organisation des épreuves en France et j'ai conçu un des problèmes de l'épreuve théorique. Quand l'AAP de l'ISIM s'est mis en place, j'avais déjà commencé à développer des systèmes pouvant gélifier. Je savais que Clément avait des compétences en postdoc pour caractériser des gels et que le LRS pouvait enrichir grandement la caractérisation de mes systèmes grâce à ses appareils variés et adaptés.

## Quel serait l'objectif à atteindre ?

Le projet est à visée principalement fondamentale mais l'idée est quand même d'obtenir des matériaux intelligents en combinant le mouvement d'une machine moléculaire et des changements de propriété. Si ces systèmes sont capables de reconnaître des molécules polluantes, commander la gélification pourrait permettre une dépollution plus facile par exemple. A l'issue du programme, nous voudrions des systèmes complètement caractérisés et compris pour envisager des publications. Parallèlement, nous avons déjà été contactés par la SATT Lutec pour surveiller dès le début la délicate question des brevets.

## Comment s'est passé le recrutement ?

Pablo avait suivi le cours de chimie supramoléculaire du M2 de Sorbonne Université ; je l'avais eu en cours à cette occasion. C'est un ancien étudiant de Chimie Paris qui faisait son stage de M2 dans une entreprise de synthèse à façon mais souhaitait faire sa thèse dans un laboratoire académique. Parmi les différents dossiers, son profil était le plus intéressant surtout avec son attrait marqué pour l'interdisciplinarité du projet. Pour Pablo, c'est une bonne expérience, il va acquérir des compétences transverses : la maîtrise de différentes méthodes de mesures et de caractérisation et aussi l'expérience de la synthèse moléculaire. Il nous fallait quelqu'un qui ait une formation pluridisciplinaire, et le goût d'acquérir des compétences complémen-

taires de la synthèse moléculaire, la chimie supramoléculaire et la caractérisation physicochimiques.

## Pourquoi avoir répondu à l'appel à projet de l'ISIM ?

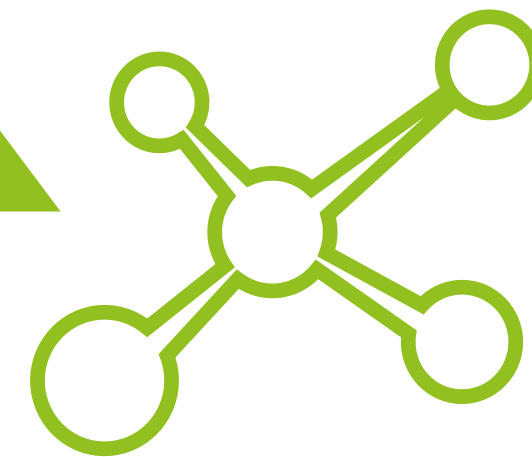
Notre projet est un projet clairement « chimie moléculaire » qui entre directement dans les recherches soutenues par l'ISIM. J'avais déjà présenté des projets au LabEx Michem et j'avais l'impression que l'initiative s'appuyait sur la communauté MiChem, j'ai continué assez naturellement à soumettre mes projets. C'est toujours un plus d'avoir des labélisations comme celle de l'ISIM de SU : un tel financement sur des projets à long terme permet de relever des défis ambitieux et de publier les résultats dans des journaux de référence. Le doctorant travaillant sur un sujet pluridisciplinaire durant trois ans, cela permet aussi de jouer un rôle important dans sa formation. Former les étudiants à la recherche fait partie de nos missions et des ambitions de l'ISIM. Et l'ISIM joue un rôle important d'animation de la vie scientifique : organiser des journées entre por-



de gauche à droite - Clément Guibert, Pablo Msellem, Guillaume Vives

teurs de projets ou des séminaires thématiques permet d'échanger et de rencontrer d'autres chercheurs au sein de la communauté et d'enrichir notre univers de recherche. C'est important et notre doctorant y contribuera par des présentations orales et des posters !





## MoCoAstrE: Molecular Complexity in Astrophysical Environments: Genesis of Complex Organic Molecules From Interstellar Dusts to Planetary Atmospheres

**Vous êtes porteur de projet lauréat de l'AAP 2020 pour un contrat postdoctoral. Quel est le sujet de votre projet de recherche ?**

Nous nous intéressons à l'apparition de la vie sur Terre : c'est un des sujets les plus fascinants pour l'humanité mais qui reste encore extrêmement complexe. La question de l'origine de la vie demeure sans réponses : les précurseurs organiques favorables au développement de la vie ont-ils été formés dans l'atmosphère terrestre primitive ou dans le milieu interstellaire (MIS) puis apportés sur Terre par des météorites ? Dans le cadre de ce projet nous cherchons à décrire les processus de formation et d'évolution dans des conditions extrêmes similaires aux conditions du MIS de molécules prébiotiques telles que les briques  $-NH-CH(R)-CO-$ , le motif qui constitue le squelette de la protéine.

Beaucoup de molécules prébiotiques, précurseurs directs de protéines et d'acides aminés, ont déjà été observées dans le milieu interstellaire : le méthoxyméthanol, le propanal, le glycolaldéhyde, le formamide, l'acide acétique... La question est de savoir comment ces molécules prébiotiques se sont formées et de comprendre quelles transformations elles peuvent avoir subi pour évoluer vers des composés plus complexes comme les acides aminés ou les protéines.

Plus précisément, nous allons observer les processus physico-chimiques de formation de molécules

organiques complexes ayant des fonctions CO, CN et NH (des groupements essentiels à la vie terrestre) et leurs évolutions à l'interface solide-gaz (réactions induites thermiquement) dans des conditions extrêmes reproduites en laboratoire :

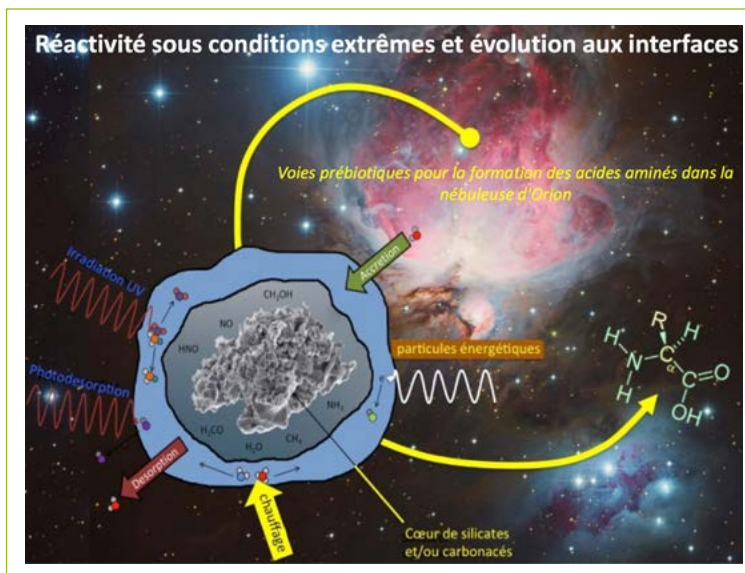
- très basses températures (3 – 10 K),
- faibles pressions  $10^{-10}$  mbar,
- sources atomiques (H, N, O...),
- rayonnement cosmiques (rayonnement VUV 90-200 nm, particules énergétiques keV et MeV).

### Quelles applications envisagées ?

Il n'y a pas d'applications à proprement parler, l'ambition est de mieux comprendre les mécanismes de création de la vie. La connaissance des voies réactionnelles conduisant à la formation de molécules organiques complexes et leurs injections en phase gazeuse associée à leurs recherches à travers des missions d'observations représentent un pas important vers la compréhension de la complexité moléculaire dans les conditions extrêmes du milieu interstellaire.

### S'il y a collaboration, comment et pourquoi s'est montée le partenariat avec l'autre laboratoire ou équipe ?

Ce projet est monté en collaboration avec l'équipe «Chimie de l'espace» du professeur Alexis Markovits du laboratoire de Chimie Théorique. La combinaison de deux approches différentes permet une meilleure description de la formation de molécules prébiotiques sous condition extrême.



### Porteurs de projet :

#### Lahouari Krim

(De la Molécule aux Nano-objets : Réactivité, Interactions et Spectroscopies)

#### Alexis Markovits

(Laboratoire de Chimie Théorique)

### Postdoctorant :

#### Mohamad Ibrahim

(De la Molécule aux Nano-objets : Réactivité, Interactions et Spectroscopies)

La modélisation d'une réaction chimique dans une glace d'eau diffère de la modélisation pour la phase gaz. Les deux équipes ont un grand savoir faire pour modéliser des réactions chimiques dans des glaces d'eau sous conditions extrêmes ainsi que les processus d'hydratation progressifs des réactifs.

### Votre projet semble porter une forte dimension interdisciplinaire ?

Effectivement, les deux approches des équipes sont différentes et complémentaires. Les résultats issus de ce projet permettront d'exploiter pleinement les données recueillies par de nombreuses observations astronomiques et de prédire l'abondance des espèces déjà détectées par des observations astronomiques ou de guider les futures missions d'observation. Ce projet est donc le meilleur moyen de s'ouvrir vers une interdisciplinarité entre les sciences chimiques, physiques et biologiques centrée autour de la compréhension de l'origine de la vie.

### Vous avez obtenu le financement d'un contrat postdoctoral. Comment s'est passé son recrutement postdoc ?

Nous avons lancé un appel à candidater via les sites de laboratoires, les réseaux types *Physique & Chimie du Milieu Interstellaire*, le Groupements de Recherche «Edi-

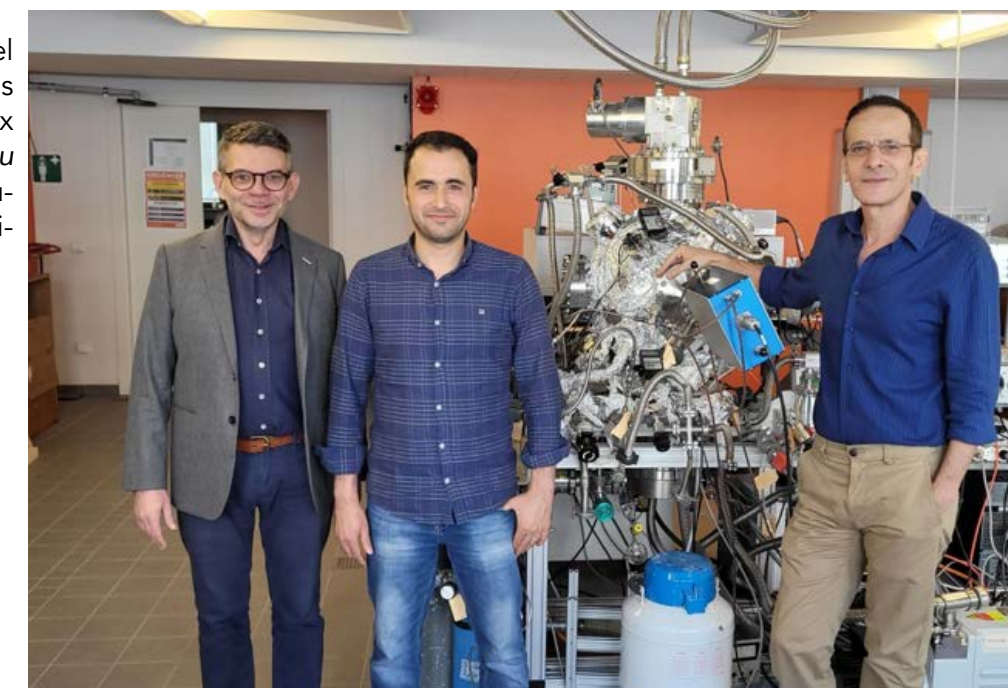
fices Moléculaires Isolés et Environnés» (EMIE) ou encore le Groupements de Recherche «Spectroscopie Moléculaire» (SpecMo).

Nous avons finalement présélectionné 12 candidats dont 5 ont été auditionnés. Et nous avons finalement retenu Mohamad Ibrahim : Mohamad a une formation en chimie physique expérimentale et en transfert du rayonnement.

### Quels sont les plus de l'initiative selon vous ?

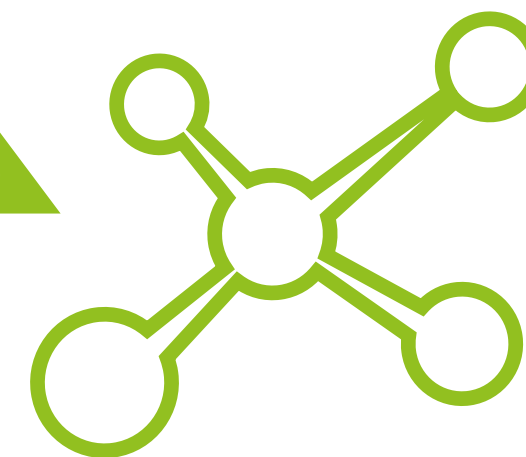
L'Appel à projet de l'ISIM fait partie des AAP pluridisciplinaires auxquels j'ai répondu et qui permettent de financer des post-doc : l'avantage de celui de l'ISIM est d'imposer une ouverture vers des collaborations entre laboratoires de l'Alliance de SU.

Cette collaboration entre expérimentateurs de MONARIS et théoriciens du LCT a été initiée grâce à l'isim : c'est finalement l'Appel à projet qui a permis de fédérer deux équipes de recherche de deux laboratoires différents autour d'un sujet commun.



de gauche à droite - Alexis Markovits, Mohamad Ibrahim, Lahouari Krim





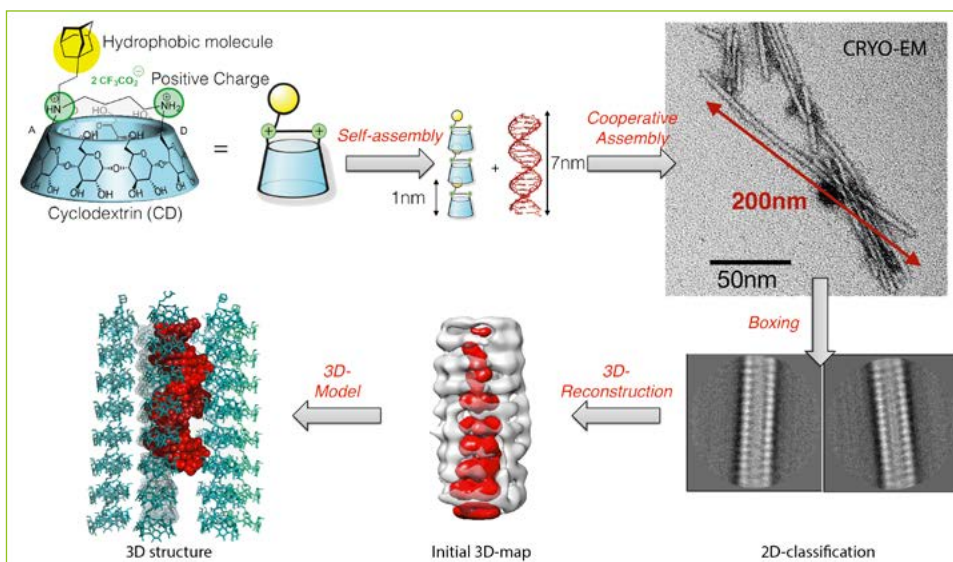
## Cyclo-Cryo: Structure determination of an artificial virus made of self-assembling cyclodextrin and dsDNA by cryo-EM

### Pouvez-vous nous dire sur quoi porte votre projet de recherche ?

La nature est capable de créer de magnifiques assemblages supramoléculaires de protéines : des microtubules, des fibrilles, pour le bon fonctionnement cellulaire, mais aussi des virus hélicoïdaux ou icosaédriques qui perturbent les cellules hôtes. Ces assemblages sont totalement homogènes en forme et en taille. Le contrôle de l'assemblage de petites molécules "sur mesure" avec des architectures prévisibles, monodisperses, à l'échelle du nanomètre ou du micro-mètre, en milieu

aqueux, est un défi fantastique pour le scientifique moléculaire !

fois un système artificiel. Pour cela, nous avons synthétisé des cyclodextrines fonctionnelles portant une molécule hydrophobe et des charges positives. En mélangeant ces cyclodextrines modifiées (qui ne sont pas des molécules biologiques) et de l'ADN, ces molécules se sont associées naturellement pour former des fibrilles de dimension homogène. Il y a bien auto-association grâce à une inclusion de la partie hydrophobe d'une cyclodextrine dans la cavité de la suivante et interaction avec l'ADN avec des interactions électrostatiques.



Afin d'élucider la structure de l'assemblage à l'échelle atomique, nous utilisons la technique de la microscopie électronique en condition cryogénique (cryo-EM) combinée à l'analyse d'images. Ces dernières années, l'utilisation de la cryo-EM a conduit à une révolution dans la biologie structurale et est devenue une nouvelle discipline dominante permettant la détermination des structures des protéines et des macromolécules au niveau atomique et une meilleure compréhension des mécanismes fonctionnelles de ces protéines.

Dans notre cas, les constructions sont visualisées et imagées par cryo-EM et les structures sont calculées à résolution atomique. Ainsi, la connaissance détaillée de l'assemblage moléculaire entre les cyclodextrines et les segments d'ADN servira à des études de modélisation pour comprendre les règles d'assemblage et étendre les applications à d'autres molécules dont les ARNs.

### Plus précisément quel est le but de ce projet postdoctoral d'un an ?

Notre but est d'élucider la structure moléculaire et de comprendre le mécanisme d'assemblage de ces constructions régulières en utilisant pour la première

### Quel est l'impact scientifique que vous voudriez atteindre idéalement ?

Si le projet est de nature fondamentale, son implication peut être très appliquée et avoir un fort impact. La crise sanitaire actuelle de la pandémie de SRAS-

### Porteurs de projet :

**Matthieu Sollogoub**  
(Institut Parisien de Chimie Moléculaire)  
**Catherine Vénien-Bryan**  
(Institut de Minéralogie, Physique des Matériaux et Cosmochimie)

### Postdoctorant :

**Mauricio da Costa**  
(Institut de Minéralogie, Physique des Matériaux et Cosmochimie)

Cov2 nous a montré que la vaccination est jusqu'à présent la seule arme que nous pouvons utiliser. Les transporteurs d'ARN non viraux développés par Moderna et Pfizer ont remporté un grand succès dans la mise sur le marché des vaccins. Par conséquent, le développement de vecteurs innovants basés sur des molécules notoirement non toxiques est d'un intérêt primordial. Nous avons déjà mis en évidence que ces constructions pouvaient induire une transfection de siRNA sur cellule hôte.

### Quelle est la part collaborative de votre projet ?

Le projet réunit des partenaires aux savoir-faire complètement différents et complémentaires. Je suis personnellement spécialisée dans l'étude structurale par cryo-microscopie électronique combinée à l'analyse d'images à haute résolution. Le professeur Matthieu Sollogoub est lui spécialisé dans la synthèse des cyclodextrines et la chimie supramoléculaire.

### Comment s'est déroulé le recrutement de votre postdoctorant ?

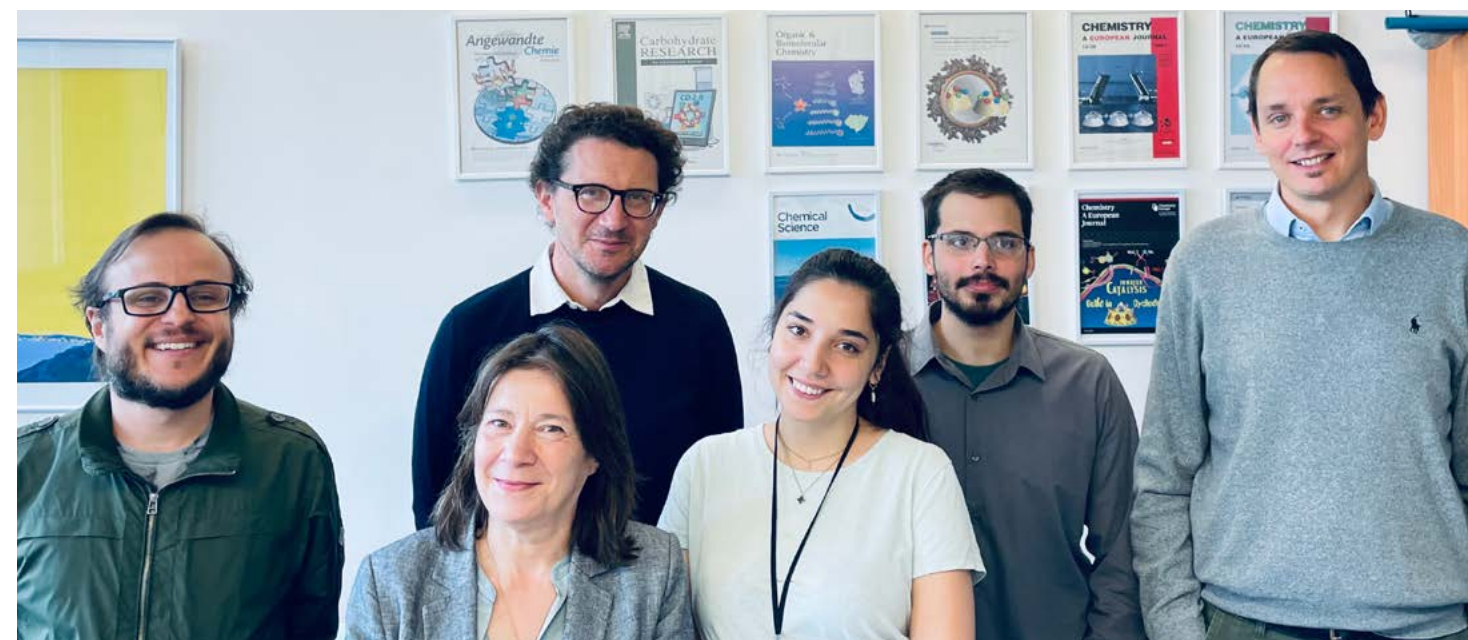
Nous avons recruté le docteur Mauricio G.S. da Costa. J'avais déjà collaboré avec Mauricio sur des études

de cryo-microscopie électronique ainsi que sur le développement d'un logiciel permettant une meilleure interprétation des structures dans les 3 dimensions (3D) calculées à partir d'images de cryo-microscopie. Mauricio était sur place et disponible, entre le temps de l'annonce de la sélection du projet et le début du contrat, il n'y avait que quelques mois. Il a été facile de recruter ce post-doc qui s'est consacré uniquement sur l'analyse d'images.

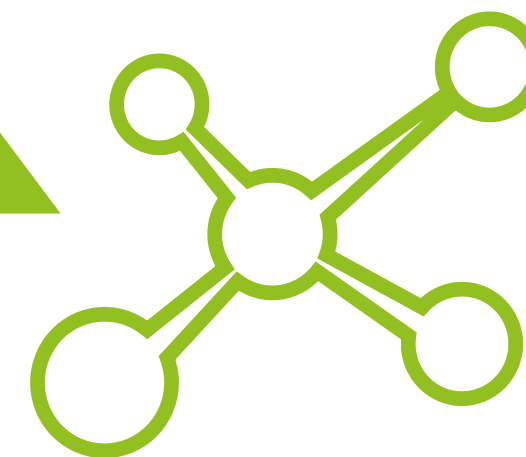
### Que pensez-vous de l'AAP de l'ISIM ?

Le dossier à soumettre est de taille raisonnable et la sélection du projet s'effectue à un niveau internationale. La mise en place est rapide, ce qui permet de renforcer une collaboration efficace, grâce à la mise en place du salaire d'un post-doc et des fonds pour les dépenses de consommables sans délais. L'obtention de ce financement est aussi un tremplin pour la soumission à d'autres appels d'offres pour lesquels notre projet a été sélectionné comme "Défi auto-organisation" du CNRS et une ANR (SUPREM).

de gauche à droite - Carlos Fernandes, Catherine Vénien-Bryan, Matthieu Sollogoub, Rebecca Churamini, Rafael Ferreira Veloso et Mickael Menand







# SOCRATE: Seeing electrOCatalysis at woRk with time-resolved electrochemical Tip-SERS

## Parlez-nous de votre projet de recherche. Dans quel champ s'inscrit-il ?

Notre projet de recherche s'inscrit dans le domaine de l'électrochimie : cette discipline consiste à étudier le transfert d'électrons entre une électrode et une espèce chimique en solution et à caractériser les nouvelles espèces produites.

L'électrochimie est présente dans de nombreux procédés industriels et dispositifs de la vie courante. De fait, elle jouera un rôle clef dans la transition énergétique : de nombreuses petites molécules comme le dioxyde de carbone ou le dioxygène peuvent être transformées par électrochimie ; le dioxygène par exemple est un des deux réactifs des piles à combustibles à hydrogène. Cependant, pour être utilisable, il faut que le processus de réduction de l'oxygène en eau ne soit pas trop énergivore. Or, les réorganisations structurales importantes associées au transfert d'électron (et de protons) ont pour conséquence de coûter cher en énergie.

Pour pallier cela, nous utilisons des catalyseurs électrochimiques qui peuvent être des composés moléculaires ou inorganiques. Ils sont disposés à la surface des électrodes et leur rôle est de catalyser la réaction en diminuant l'énergie nécessaire pour arriver aux composés intermédiaires réactionnels. Pour concevoir un catalyseur efficace, il faut rentrer dans l'intimité de la réaction électrochimique et déterminer les différentes étapes. Des informations très importantes sont obtenues en utilisant uniquement les techniques électrochimiques, mais celles-ci donnent souvent une caractérisation incomplète, les matériaux et molécules étant devenus progressivement trop complexes : des méthodes complémentaires sont alors nécessaires pour les étudier.

## Votre projet propose-t-il de nouvelles méthodes d'analyse ?

Dans le cadre du projet SOCRATE, nous utilisons deux techniques spectroscopiques :

- La première est la spectroscopie Raman, qui détermine les vibrations du matériau d'électrode ou des systèmes adsorbés. Celle-ci est développée au Laboratoire Interfaces et Systèmes Electrochimiques (LISE).

- La seconde est développée au Laboratoire de Chimie Physique - Matière et Rayonnement (LCPMR) : c'est la spectroscopie de photoélectrons X (XPS : X photoelectron spectroscopy). Elle permet en particulier de trouver le degré d'oxydation des intermédiaires.

Ce que nous cherchons à faire, c'est de relier le potentiel de l'électrode aux intermédiaires présents, si possible avec un suivi en fonction du temps. Il faut donc synchroniser l'électrochimie et la spectroscopie, tout en gardant une sensibilité suffisante.

## Quelles seront les étapes du projet ?

Pour être plus précis, notre projet consiste à déposer un dérivé du méthylviologène sur une pointe en or qui permet de retrouver une bonne sensibilité en spectroscopie Raman. Il s'agit de la technique EC-TipSERS (Electrochemical tip Surface Enhanced Raman Spectroscopy) inventée au LISE. Nos travaux porteront ensuite à observer en temps réel la réduction de l'oxygène. Nous étendrons finalement l'approche aux matériaux inorganiques comme des oxydes de cobalt. L'XPS nous permettra d'obtenir des informations structurales importantes sur les systèmes déposés sur l'électrode. La suite de ce projet sera de s'attaquer à la résolution spatiale.

## Porteurs de projet :

### Jean-Jacques Gallet

(Laboratoire de Chimie Physique Matière et Rayonnement)

### Emmanuel Maisonhaute

(Laboratoire Interfaces et Systèmes Electrochimiques)

## Postdoctorant :

### Jad Rabah

(Laboratoire Interfaces et Systèmes Electrochimiques)

## Comment s'est montée la collaboration entre le LISE et le LCPMR ?

Le LISE et le LCPMR sont deux laboratoires qui développent de l'instrumentation de haut niveau dans le domaine de la chimie physique. Nous sommes en discussion depuis plusieurs années à ce propos et le projet SOCRATE formalise naturellement notre collaboration.

L'analyse XPS est complémentaire de la spectroscopie Raman mais usuellement pratiquée sous vide. Le LCPMR possède au synchrotron SOLEIL une des rares expériences qui permet d'acquérir des données en milieu humide, voire liquide et électrochimique. Les approches instrumentales sont en fait très différentes dans nos deux domaines. Les expériences d'électrochimie peuvent être planifiées à la journée, alors que les analyses XPS à SOLEIL sont planifiées plusieurs mois auparavant.

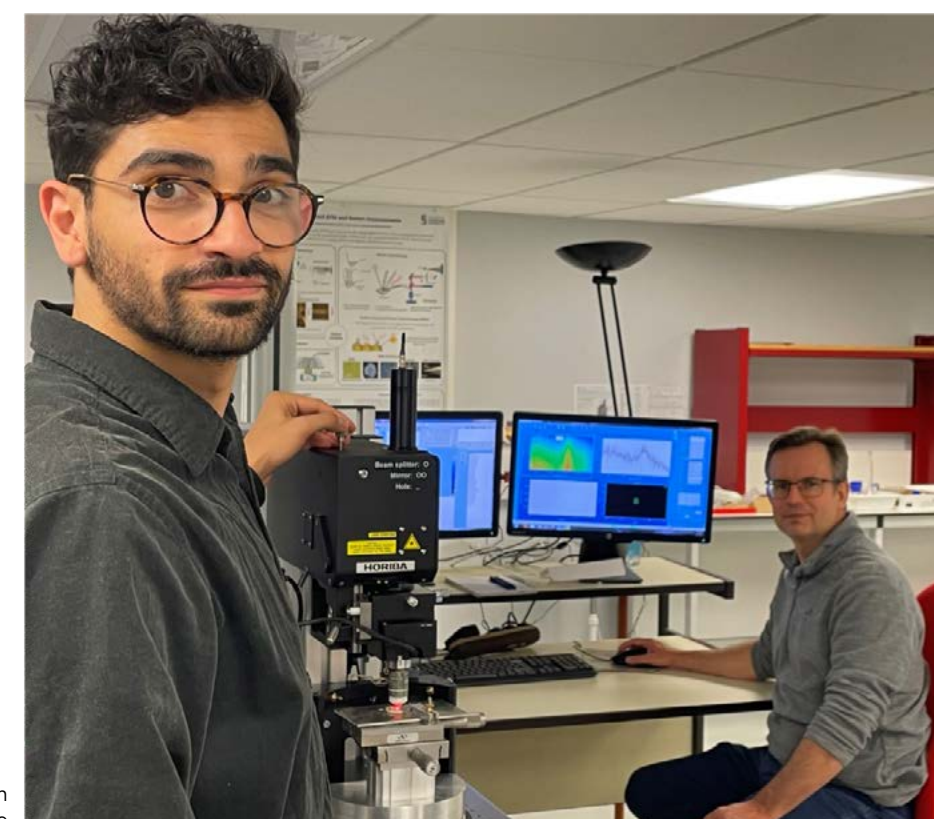
## L'ISIM a soutenu votre projet en finançant un contrat post-doctoral...

Effectivement, nous avons recruté Jad Rabah sur ce poste pour une année : il était déjà en post-doctorat au LISE sur le contrat ANR Fast-Giant. Jad a fait une thèse en synthèse organique et organométallique, mais il a également réalisé des mesures de photophysique, de spectroscopie et d'électrochimie rapide (en

collaboration avec le LISE). Ses deux postdoctorats consécutifs au LISE complètent sa formation initiale en chimie moléculaire avec des techniques de chimie physique avancées.

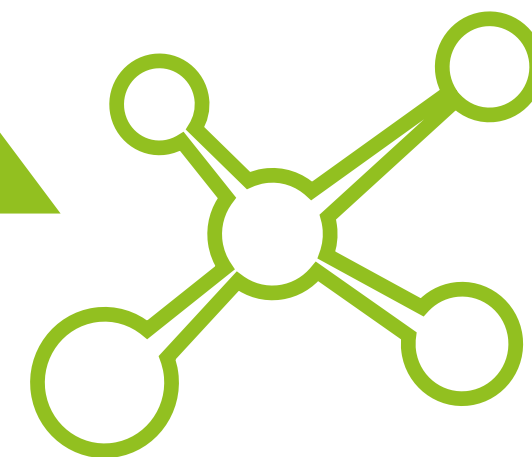
## Que pensez-vous de l'initiative ISIM ?

Centrée sur les approches moléculaires, l'ISIM met en avant les approches chimiques pour répondre aux demandes sociétales. Les équipes ne sont pas spécialistes de la conception des systèmes, mais proposent des techniques avancées pour comprendre leur fonctionnement et in fine les optimiser. Les développements instrumentaux et méthodologiques représentent une part importante du projet ISIM.



de gauche à droite - Jad Rabah  
Emmanuel Maisonhaute





# MIC-Au: Emergence of Mesoionic Carbenes for the Stabilization of Gold Nanoparticles

**Bonjour. Vous êtes lauréat d'un contrat de recherche postdoctoral 2021. En quoi consiste votre projet ?**

Notre projet consiste à développer une nouvelle classe de ligands carbènes pour faciliter et améliorer la stabilisation et la fonctionnalisation de nanoparticules d'or.

Ces nanoparticules (NPs) de taille nanométrique sont des édifices métalliques avec des atomes d'or au degré d'oxydation 0. Elles sont généralement instables du fait de leur grande énergie de surface. Les édifices nécessitent donc d'être stabilisés par des ligands qui se greffent en surface et qui évitent leur agrégation. Les carbènes N-hétérocycliques (NHCs) se sont révélés récemment d'excellents ligands pour ces NPs.

Dans le projet MICAu<sup>(1)</sup>, nous nous concentrons sur

Aujourd'hui, nous avons mis au point une synthèse fiable et reproductible de NPs d'or stabilisées par des MICs et les résultats nous semblent maintenant assez solides pour envisager d'être diffusés : nous avons déjà une publication à soumettre<sup>(2)</sup> et une deuxième qui est bien avancée.

**En quelques mots, qu'est-ce que la chimie Click ?**

Le concept de chimie Click a été développé au début des années 2000 par Barry Sharpless, prix Nobel américain de chimie. Le principe est d'assembler (cliquer) deux fragments de façon irréversible généralement par une réaction de cycloaddition [3 + 2] entre un alcyne vrai et un azoture d'alkyle. Cette réaction peut être réalisée de façon thermique (cycloaddition de Huisgen) mais les conditions sont alors assez drastiques : l'avantage de la chimie Click est qu'elle se pratique à température ambiante grâce à la présence d'un catalyseur. Elle peut même être réalisée dans des milieux biologiques, ce qui est bien commode pour la pharmaco-chimie.

**Quel sont les objectifs que vous vous êtes idéalement fixés ?**

Nous souhaitons déjà obtenir un protocole de synthèse des nanoparticules complètement fiable et reproductible. Ensuite, nous voulons caractériser très précisément la liaison du carbène aux atomes d'or en surface des nanoparticules, ce qui dans la littérature reste encore mystérieux : nous nous appliquons à une détermination structurale très poussée. Enfin, nous voulons explorer tout le champ des possibles de ces ligands fonctionnels originaux : peut-on utiliser ces ligands comme des briques de fondation ? Les ligands eux-mêmes peuvent-ils subir de la chimie de fonctionnalisation ? Ce serait la cerise sur le gâteau, mais aurons-nous vraiment le temps ? notre projet est porté par un postdoctorant en contrat pour seulement une année.

**Effectivement, vous avez recruté Omar Sadek en postdoc. Comment s'est passée la sélection ?**

Nous avons diffusé l'annonce par deux canaux qui se sont avérés efficaces : le compte twitter de l'IPCM et LinkedIn. En deux jours, nous avons déjà reçu

**Porteurs de projet :**

**Louis Fensterbank**  
(Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

**Francois Ribot**  
(Laboratoire de Chimie de la Matière Condensée de Paris)

**Postdoctorant :**

**Omar Sadek**  
(Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

des très bons dossiers dont celui de Omar. Finalement, nous nous sommes arrêtés à une liste d'une dizaine de candidatures. Nous en avons sélectionné 5 puis 3 pour les entretiens. Omar est sorti du lot assez naturellement.

**Le projet est collaboratif. Avec une autre équipe de l'Institut Parisien de Chimie Moléculaire ou un autre laboratoire ?**

Le projet est complètement collaboratif : il ne pourrait pas se faire sans Corinne Chanéac et François Ribot du Laboratoire de Chimie de la Matière Condensée de Paris. A l'IPCM avec Clément Chauvier et Omar Sadek, on se charge de façonner les ligands. On peut aussi fabriquer les nanoparticules. Mais pour ce qui est de leurs analyses, par spectroscopie ou microscopie, ce sont les spécialistes de la chimie des matériaux du LCMCP qui s'en occupent. Cette collaboration se développe depuis longtemps et elle a notamment été abondée par les labex MiChem et MATISSE. Le projet nécessite aussi des compétences en spectroscopie XPS : ces mesures sont assurées par un laboratoire de Chimie Paris. S'il y a juste une compétence qui nous échappe sur ce projet, c'est sur la question de la modélisation... visiblement les experts en modélisation des nanoparticules sont assez rares.

**A quoi servirait la modélisation ?**

Les modélisations serviraient plutôt à comprendre comment les ligands vont se poser sur les édifices et surtout mieux comprendre les forces motrices qui

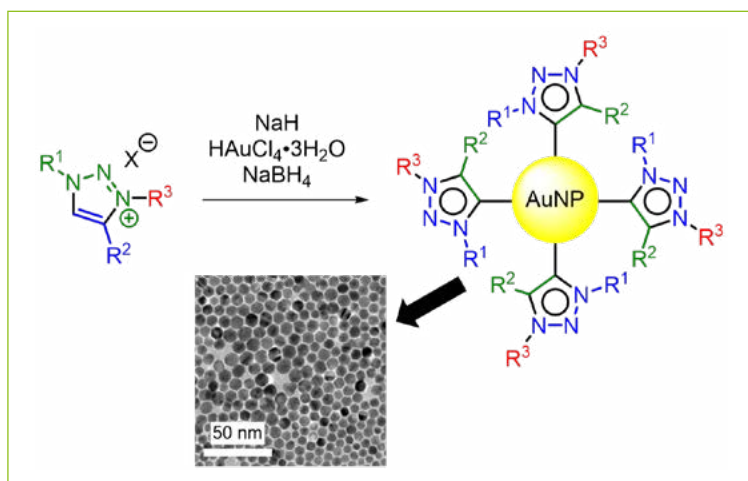
guident la taille des objets. Il demeure toujours une inconnue dans toutes ces chimies de formation de nanoparticules : on part de complexes métalliques qui sont oxydés, puis on les réduit progressivement et ces différentes étapes de réduction demeurent très obscures. Venant du domaine moléculaire où on regarde à l'atome prêt, j'ai vraiment l'impression d'être face à une sorte de boîte noire : on finit par obtenir ce qu'on veut mais il reste beaucoup de chose à comprendre dans le processus. C'est à ce niveau que la modélisation jouerait un rôle intéressant.

**Et l'ISIM ? qu'apporte l'initiative à votre projet ?**

Avec MiChem, le brassage des communautés, des idées et le développement des projets transdisciplinaires a montré l'enrichissement de la recherche en chimie moléculaire. On peut juste regretter que le niveau de financement de l'ISIM reste peut-être trop modeste : il y a beaucoup de chimistes à Sorbonne Université et une partie des problèmes sociétaux contemporains relèvent de l'énergie et du développement durable. Les solutions à venir vont passer par une fusion entre chimie des matériaux et chimie moléculaire. Il y a énormément de bons projets et bien trop peu de ressources.

1. Partenaires du projet MICAu : Corinne Chanéac (LCMCP), Clément Chauvier (IPCM), Louis Fensterbank (IPCM, porteur du projet), François Ribot (LCMCP), Omar Sadek (post-doc ISIM).

2. voir : <https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/article-details/625ea3a35b90090c47146272>



l'utilisation d'une nouvelle famille de NHCs comme ligands de surface : les carbènes mésoioniques (MICs) qui n'avaient pas encore été utilisés dans ce cadre quand le projet a commencé. Nous les avons choisis pour plusieurs raisons : grâce à leur caractère électronique donneur élevé, ils s'engagent dans des liaisons robustes avec le métal. D'autre part, leurs précurseurs résultent d'une étape de chimie Click, facile à mettre en œuvre qui assure une grande variabilité de substrats et donc une large diversité de fonctionnalisation des NPs.



Omar Sadek

Postdoctorant



Corinne Chanéac



Clément Chauvier

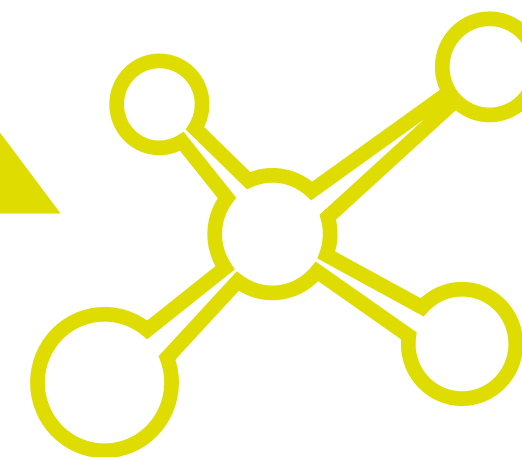


Louis Fensterbank



François Ribot

Encadrants



Projets Doctoraux

**Projet :** From solution to surface: 2D-organization of fluorescent functionality on graphene based materials

**Acronyme :** DECORATE

**Porteur de projet :** Imad Arfaoui (MONARIS - De la Molécule aux Nano-objets : Réactivité, Interactions et Spectroscopies)

**Co-encadrant :** Petra Rudolf (Surfaces and Thin Films Dept., Zernike Institute for Advanced Materials), Lydia Sosa-Vargas (IPCM - Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

**École doctorale :** ED 388 - Chimie physique et chimie analytique de Paris Centre

**Projet :** Theory of Photoinduced Proton-Coupled Electron Transfer in 'Nanozymes' and Polaritonic Optical Cavities

**Acronyme :** nanoPET

**Porteur de projet :** Alex Chin (INSP - Institut des Nanosciences de Paris)

**Co-encadrant :** Riccardo Spezia (LCT Laboratoire de Chimie Théorique), Simon Huppert (INSP - Institut des Nanosciences de Paris)

**École doctorale :** ED 564 - Physique en Ile-de-France

**Projet :** Magnetic Molecularly Imprinted Polymers in Organic Synthesis: From Standard to Dynamic Kinetic Resolution

**Acronyme :** MIPTRAP

**Porteur de projet :** Cyril Ollivier (IPCM- Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

**Co-encadrant :** Nébéwia Griffete (PHENIX - Physicochimie des Electrolytes et Nanosystèmes Interfaciaux)

**École doctorale :** ED406 - Chimie Moléculaire Paris Centre

Projets Postdoctoraux

**Projet :** Fluorescent logic gates for imaging in neurosciences

**Acronyme :** NeuroLogic

**Porteur de projet :** Blaise Dumat (LBM - Laboratoire des Biomolécules, équipe Peptides, Glycoconjugués et métaux en biologie)

**Co-encadrant :** Vincent Vialou (IBPS - équipe Neurobiologie des maladies psychiatriques, Laboratoire Neurosciences)

**Projet :** Molecular photodetector based on polyoxometalates and on pseudo-MOSFET transducers

**Acronyme :** Transduc-POM

**Porteur de projet :** Olivier Pluchery, (INSP - Institut des NanoSciences de Paris)

**Co-encadrant :** Anna Proust, F. Volatron, S. Renaudineau (IPCM - Institut Parisien de Chimie Moléculaire), Irina Ionica, Xavier Mescot (Institut de Microélectronique Electromagnétisme et Photonique IMEP-LAHC, MINATEC-INPG)

Projets Équipement

**Projet :** Routine Analysis by Gas Chromatography coupled to Mass Spectrometry within the iSiM Alliance

**Acronyme :** GCMS@iSiM

**Porteur de projet :** Clément Chauvier (IPCM - Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

**Co-encadrant :** Dror Warschawski (LBM), Katia Comte (MnHn), Erwann Guénin (TIMR-UTC)

**Projet :** Fluorescence microscope to investigate the interactions between man-made objects and living organisms

**Acronyme :** FluoMicro

**Porteur de projet :** Vincent Corcé (IPCM - Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

**Co-encadrant :** Michele Salmain (IPCM - Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

**Projet :** Probing light absorption of photo-irradiated solutions

**Acronyme :** PROLIGHT

**Porteur de projet :** Guillaume Izzet (IPCM - Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

**Co-encadrant :** Cyril Ollivier, Virginie Mansuy, Louis Fensterbank (IPCM - Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

**Projet :** High Throughput HUB for XPS

**Acronyme :** HUB-XPS

**Porteur de projet :** Rochet François (LCPMR - Laboratoire de Chimie Physique Matière et Rayonnement)

**Co-encadrant :** Christophe Petit (MONARIS - De la Molécule aux Nano-objets : Réactivité, Interactions et Spectroscopies)



