

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand



½ Journée Scientifique ICCF

Jeudi 5 janvier 2023

13h30 – 16h30

Amphi Recherche

Programme scientifique

	Intervenants	Titre de l'intervention	Equipe
13h30	Sylvie DUCKI	<i>Escape ta Science !</i>	COM
13h50	Sébastien DE WINDT	<i>Résonance paramagnétique électronique Application de la technique à l'étude de la fluoruration des oxydes de manganèse</i>	MI
14h10	Mehdi SAHIHI	<i>Adsorption of SARS-CoV-2 spike protein onto the surface of materials</i>	TIM
14h30	Julien SARMET	<i>Interleaved electroactive molecules into LDH working on both electrodes of an aqueous high- power battery</i>	MI
14h50	Jérémy CATHALAN	<i>Investigation sur le rôle des nitrates dans la synthèse Pechini de luminophores sans terres rares à base d'aluminoborate</i>	MI
15h10	Guillaume VOYARD	<i>Le service de Chromatographie de l'ICCF au service du traitement des eaux et de l'environnement</i>	SSTAR
15h30	Léo PAULAT	<i>Study of new fructose-6-phosphate aldolases from extremophilic organisms</i>	BIOMETA
15h50	Mateus GARCIA RODOLFO	<i>Top-down approach for modeling block copolymers</i>	TIM
16h20	Fabrice LEROUX	Clôture de la Journée Scientifique	

ESCAPE TA SCIENCE !

Sylvie DUCKI, Vassili PRUDHOMME, Robin AUGUSTE, Laurie GONTHIER, Laura FRICOT
Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND

« Escape ta science » est un jeu collaboratif où les participants doivent résoudre des énigmes, trouver des indices, déchiffrer des codes pour passer à l'étape suivante. L'idée est d'utiliser le processus d'enquête pour transmettre / diffuser de la culture scientifique. Les énigmes sont variées pour favoriser la collaboration des joueurs : logique, connaissances, manipulation, déduction, association d'idées.

Les objectifs sont pédagogiques et ludiques à la fois permettant aux joueurs de :

- Réfléchir / raisonner (mobiliser des connaissances, résoudre des problèmes),
- Manipuler (faire un puzzle, ajouter des réactifs),
- Communiquer (comprendre les explications et interagir avec les autres joueurs)
- Comprendre (apprendre par le jeu, comprendre la science qui nous entoure)

Ce projet a bénéficié d'une subvention « Evènements Science et Société » dans le cadre du projet stratégique « Science Avec et Pour la Société en Auvergne » (SAPSAU), labellisé « SAPS – Science Avec et Pour la Société » par le MESRI (2022-2024).[1]



Figure 1: De gauche à droite Sylvie DUCKI, Vassili PRUDHOMME, Robin AUGUSTE, Laurie GONTHIER, Laura FRICOT. © Pierre GRASSET

REFERENCES:

[1] LE LAB – Le Journal de la Recherche de l'Université Clermont Auvergne, #12, Novembre 2022 (ISSN n° 2427-402X)

Résonance paramagnétique électronique

Application de la technique à l'étude de la fluoration des oxydes de manganèse

Sébastien DE WINDT¹, Katia GUERIN-ARAUJO DA SILVA, Marc DUBOIS

¹ *Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND*

La résonance paramagnétique électronique (RPE) est une technique de spectroscopie permettant d'obtenir des informations sur les composés dont le nuage électronique est paramagnétique. Un des cas d'utilisation de cette technique est celui de l'analyse de l'état d'oxydation des métaux de transitions, par exemple dans le cadre de l'étude de la fluoration des oxydes de manganèse.

La technique sera brièvement présentée avant d'illustrer par une galerie de spectres de référence son application à l'étude des composés de manganèse. Je détaillerai ensuite la mise en œuvre de la RPE comme méthode de dosage en phase solide des ions Mn^{2+} ou Mn^{4+} , avec pour application notable la détermination de degrés de pureté. Je détaillerai ensuite la mise en œuvre de la RPE comme méthode de suivi de l'état d'oxydation du manganèse en fonction de l'avancement d'une réaction de fluoration.

Enfin, la dernière partie concernera le récemment acquis dispositif de contrôle de la température de mesure en illustrant son utilisation par une étude de l'effet du refroidissement sur le nuage électronique d'un oxyde de manganèse (II).

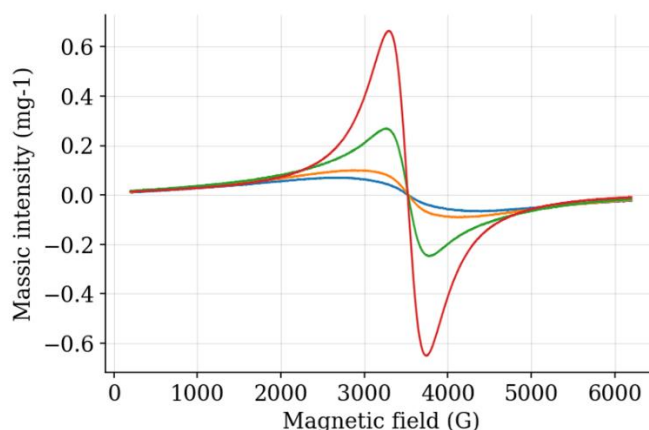


Figure 1: Spectres RPE de différents composés de manganèse

REFERENCES:

- [1] *Hagen, W. R. Biomolecular EPR Spectroscopy. (2009).*

Mehdi SAHIHI¹

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND

The interaction of virion with inanimate surfaces could be the main source of indirect infection. Here, we used MD simulation method to investigate the interaction of the SARS-CoV-2 spike protein with surface of polymers, metals and carbon-based materials. Indeed, the main motivations for this work are: i) to clarify the molecular and atomic details of the interaction between SARS-CoV-2 virus and different materials; ii) to reveal the difference between up and down conformations of the spike protein for interaction with surfaces and iii) to classify the available results for interaction of SARS-CoV-2 spike protein with different materials in a reasonable manner.

The results show that spike protein adsorbed onto the surfaces of investigated materials with following mechanism: the protein adjusted its spatial conformation in a couple of time steps, then started to interact with the surfaces rapidly, and finally achieved the equilibrium state with readjusted conformation. However, the final conformations and interaction energy of the protein on the surface of materials are completely different. We can imagine four different types of materials based on their interaction with SARS-CoV-2 spike protein: i) materials that have no special effect on infective viral particles e.g., polymeric materials (RMSD and No. contacts are below 10 Å and 100, respectively); ii) materials that may inactivate SARS-CoV-2 virus but are less likely to accumulate infective viral particles e.g., metals and carbon-based materials (RMSD above 10 Å and No. contacts below 100); iii) materials with ability to capture and accumulate the infective viral particles but cannot to inactivate them and are able to inhibit transmission e.g., skin models (RMSD below 10 Å and No. contacts above 100) and iv) materials that not only have high affinity for capturing the SARS-CoV-2 virus but also, may denature the spike protein and inactivate the virus (RMSD and No. contacts above 10 Å and 100, respectively).

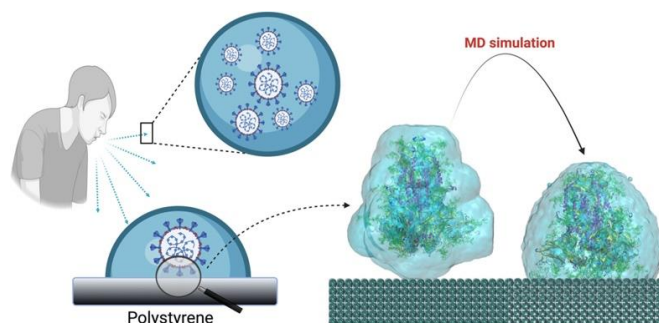


Figure 1: The contact of the virion particle with the surface is made through their S proteins.

REFERENCES:

- [1] M. Sahihi and J. farauo, *Langmuir* 2022, 38, 48, 14673–14685

Interleaved electroactive molecules into LDH working on both electrodes of an aqueous high-power battery

Julien SARMET¹, Christine TAVIOT GUEHO¹, Fabrice LEROUX¹, Philippe STEVENS², Thierry Brousse³

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND

² EDF R&D, Department LME, Avenue des Renardières, 77818 Moret-sur-Loing Cedex, France

³ Nantes Université, CNRS, Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel, IMN, 2 rue de la Houssinière BP32229, 44322 Nantes cedex 3, France

En sélectionnant deux espèces électroactives, l'une comme électrode positive et l'autre négative, il est possible de concevoir de nouveaux dispositifs de stockage d'énergie. Chaque matériau d'électrode est basé sur des espèces électroactives, le phosphate de riboflavine (RF) d'un côté et le carboxylate de ferrocène (FCm) de l'autre, intercalées dans une structure hôte d'hydroxyde double lamellaire (HDL) afin d'éviter toute migration et instabilité possibles des molécules. L'intercalation de ces molécules est démontrée par DRX. Une fois les molécules intercalées avec succès, le comportement électrochimique de chaque assemblage hybride est examiné séparément dans un électrolyte aqueux pour caractériser les réactions d'oxydoréduction au cours du cyclage. Puis les deux matériaux d'électrodes sont placés dans un dispositif à trois électrodes, adaptant leur masse pour équilibrer le premier processus électrochimique, pour former un nouveau supercondensateur asymétrique original. Les premières investigations seront exposées en fonction de la nature du sel d'électrolyte et de la vitesse de cyclage.

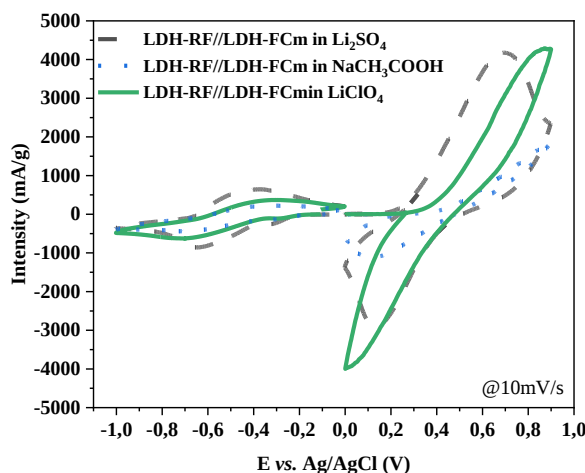


Figure 1 : Voltammétrie cyclique d'électrodes HDL-RF et HDL-FCm dans l'acétate de sodium, le sulfate de lithium et le perchlorate de lithium à 1M à 10mV/s : potentielle combinaison pour former un système électrochimique complet

Investigation sur le rôle des nitrates dans la synthèse Pechini de luminophores sans terres rares à base d'aluminoborate

Jérémy CATHALAN,^{1,2} Audrey Potdevin,¹ Mathieu Salaün,² François Réveret,¹ Alain Ibanez,² Isabelle Gautier-Luneau,² Geneviève Chadeyron,¹

¹ Université Clermont Auvergne, Clermont Auvergne INP, CNRS, Institut de Chimie de Clermont-Ferrand, 63000, Clermont-Ferrand

² Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, Institut Néel, 38000, Grenoble

Les dispositifs émettant une lumière blanche à partir de diodes électroluminescentes (LEDs) représentent une avancée technologique majeure sur les marchés de l'éclairage et de l'affichage, donnant lieu à une réduction significative de la consommation d'énergie. Les systèmes commercialisés de nos jours, généralement basés sur la conversion partielle de l'émission d'une LED bleue par un mélange de luminophores jaune (YAG:Ce³⁺) et rouge (matrice dopée Eu²⁺), contiennent des ions de terres rares (TR). Ce sont des éléments chimiques considérés comme critiques en raison des problèmes environnementaux, économiques et géopolitiques liés à leur extraction et au fait que seuls quelques pays en produisent. Ce constat a mené les chercheurs à s'intéresser à des solutions alternatives : des luminophores sans terres rares. C'est dans ce contexte que nous nous sommes intéressés au développement d'aluminoborates (AB), synthétisés par la méthode Pechini, impliquant une étape de chauffage soit par reflux soit en autoclave assisté par micro-ondes (MO). L'optimisation des paramètres de synthèse a permis d'aboutir à des poudres caractérisées par une large bande d'émission couvrant tout le spectre du visible sous excitation UV ou bleue (365 à 450 nm).² L'évolution des propriétés optiques à la suite de la modification de la méthode de chauffage a été étudiée et l'origine de la luminescence dans ces matériaux discutée, en se basant plus spécifiquement sur le rôle des nitrates.

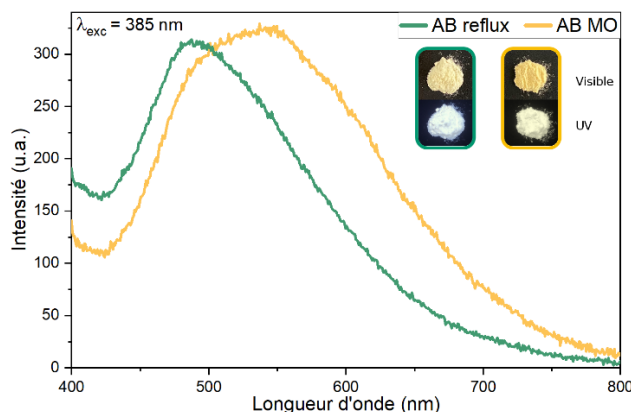


Figure 1: Spectres d'émission normalisés sous excitation UV à $\lambda_{exc} = 385$ nm des poudres aluminoborates synthétisées par la méthode Pechini avec chauffage à reflux et en autoclave assisté par micro-ondes

REFERENCES:

- [1] Salaün, M. et al. *MRS Bull.*, 47, 231-242 (2022)
- [2] Cathalan, J. et al. *J Mater Sci.* 57, 15829-15842 (2022)

**Le service de Chromatographie de l'ICCF
au service du traitement des eaux et de l'environnement.**

Guillaume VOYARD,

¹ *Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND*

Le Service de Chromatographie fait partie des SSTAR (Services Scientifiques, Techniques et Administratifs de la Recherche) de la Recherche.

S'appuyant sur une vingtaine de systèmes de Chromatographie Liquide, ce service permet (à l'ensemble de la communauté scientifique de l'ICCF mais également aux autres laboratoires locaux et industriels) de répondre à des problématiques d'analyses comme la quantification de composés de synthèses, l'études de produits de dégradation/photodégradation, la quantification d'acides aminés dans l'environnement, etc...

Le service a, par exemple, développer des méthodes d'analyse qualitatives et quantitatives de métaux de transitions dans les eaux de rejet et à travailler sur sa dépollution [1].

Depuis 2019, le service est également équipé d'un système d'analyse de Chromatographie Ionique couplé à de la spectrométrie de Masse permettant d'élargir le panel qualitatif d'analyse à la famille des acides carboxyliques, anions et cations présents dans divers compartiments environnements [2],[3].

REFERENCES:

[1] Method for treating chromium present in effluents, and corresponding equipment. Prulho Romain, Champeau Benoit, Mailhot Gilles, Brigante Marcello, Guillaume Alexandre. Brevet international WO 2015/145051 A1. 1er octobre 2015.

[2] Effect of UVC pre-irradiation on the Suwannee river Natural Organic Matter (SRNOM) photooxidant properties.

D Palma, A Khaled, M Sleiman, G Vyard, C Richard - Water Research, 2021

[3] Interdisciplinary strategy to survey phytoplankton dynamics of a eutrophic lake under rain forcing: description of the instrumental set-up and first results.

F Noirmain, JL Baray, F Tridon, P Cacault, H Billard , G Vyard et all - Biogeosciences Discussions, Dec 2022

½ Journée scientifique – ICCF 5 janvier 2023

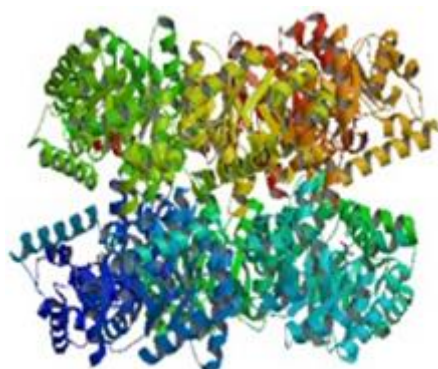
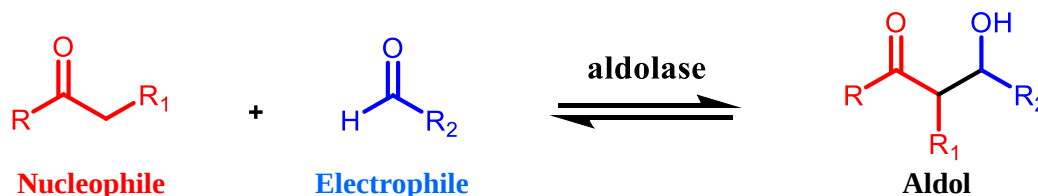
Study of new fructose-6-phosphate aldolases from extremophilic organisms

Léo Paulat¹, Cédric Gastaldi¹, Marielle Lemaire¹, Virgil Hélaine¹, Lionel Nauton¹, Jean-Louis Petit², Véronique de Berardinis² and Christine Guérard-Hélaine¹

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND

² Genoscope – UMR 8030, 2 rue Gaston Crémieux, 91057 Evry-Courcouronnes

Biocatalysis is a tool to access new products of interest in a greener and more eco-friendly way. It allows us to respond to many current issues related to the 12 principles of green chemistry. In this context, Aldolases are C-C bond forming enzymes of particular interest for synthetic applications. Indeed, the aldol reaction allows to generate up to 2 asymmetric centers, providing chiral adducts. Depending on the aldolases used, the stereochemistry of these asymmetric centers can be controlled ^[1].



FSA : Decameric structure

Fructose-6-phosphate aldolase (FSA) belonging to class I aldolases, was discovered in *E. coli* by Shürmann and Sprenger^[2] in the 2000s. It was demonstrated as the first aldolase able to use hydroxyacetone^[3], as nucleophile substrate, and furthermore particularly robust, efficient and versatile towards other nucleophiles such as dihydroxyacetone, hydroxybutanone^[4] and glycolaldehyde^[5]. These discoveries were the basis for mutagenesis^[1] work or for the search from biodiversity for new aldolases presenting for example different stereochemistries. In the framework of our collaboration with the Génoscope (Evry), two FSA from acidophilic organisms are studied, one from, *Acidobacteria Bacterium* (A0A399XV01) and one from *Acidiplasma Aeolicum* (A0A0Q0RVA3). These catalysts have revealed atypical properties.

Molecular modeling and their kinetic constants determination helped their characterization. These results will be presented here, as well as some synthetic applications.

¹ Hélaine, V.; Gastaldi, C.; Lemaire, M.; Clapés, P.; Guérard-Hélaine, C. *ACS Catal.* **2022**, 12 (1), 733–761. <https://doi.org/10.1021/acscatal.1c04273>.

² Schürmann, M.; Sprenger, G. A. *Journal of Biological Chemistry* **2001**, 276 (14), 11055–11061. <https://doi.org/10.1074/jbc.M008061200>.

³ Schürmann, M.; Schürmann, M.; Sprenger, G. A. *Journal of Molecular Catalysis B: Enzymatic* **2002**, 19–20, 247–252. [https://doi.org/10.1016/S1381-1177\(02\)00174-1](https://doi.org/10.1016/S1381-1177(02)00174-1).

⁴ Sugiyama, M.; Hong, Z.; Liang, P.-H.; Dean, S. M.; Whalen, L. J.; Greenberg, W. A.; Wong, C.-H. *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, 129 (47), 14811–14817. <https://doi.org/10.1021/ja073911i>.

⁵ Garrabou, X.; Castillo, J. A.; Guérard-Hélaine, C.; Parella, T.; Joglar, J.; Lemaire, M.; Clapés, P. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, 48 (30), 5521–5525. <https://doi.org/10.1002/anie.200902065>.

Top-down approach for modeling block copolymers

Mateus GARCIA RODOLFO¹, Joel TCHOUFAG², Florent GOUJON¹, Alain DEQUIDT¹

¹ *Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND*

² *Manufacture Française des Pneumatiques Michelin, 23, Place des Carmes, 63040 Clermont-Ferrand, France*

Thermoplastic elastomers are an important class of polymeric materials that presents the ease of processability of thermoplastics and the elasticity of classical rubbers. Micro-phase separated block copolymers containing a soft (low-T_g) and a hard (high-T_g) species achieve these thermoplastic and elastomeric properties not by primary bond cross-linking between chains, but by forming a 3D network of rigid domains bridged by the soft blocks [1].

We introduce recent advances on a top-down approach to model such systems. Self-consistent field theory (SCFT) is used to study the phase behavior of a block copolymer, which determines its most stable phase and its density field [2]. This field is then used as a bias to generate a coarse-grained particle model of the block copolymer with the density-biased Monte Carlo (DBMC) technique [3]. Because this technique doesn't take into account the excluded volume of the particles when generating their positions, it is necessary to relax the system before starting a simulation. This relaxation is achieved with dissipative particle dynamics (DPD). The system is then ready to be used in coarse-grained simulations for the study of its behavior under high strain, for example.

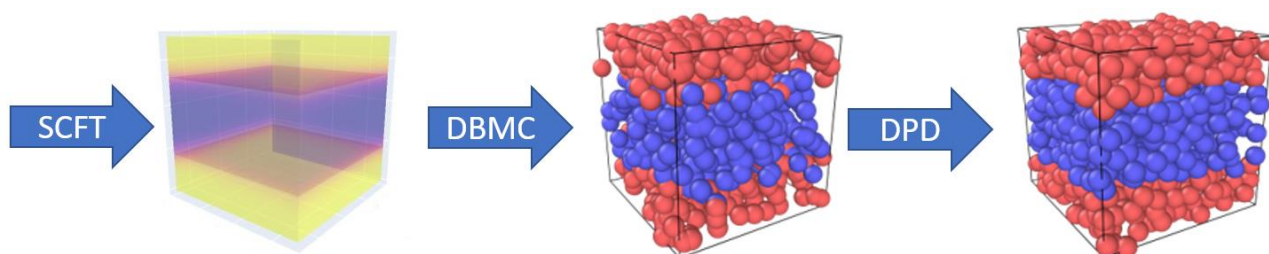


Figure 1: Steps of the top-down approach for modeling phase-separated block copolymers.

REFERENCES:

- [1] Spontak, Richard J., and Nikunj P. Patel. "Thermoplastic Elastomers: Fundamentals and Applications." *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, vol. 5, no. 5–6, 2000, pp. 333–40, [https://doi.org/10.1016/S1359-0294\(00\)00070-4](https://doi.org/10.1016/S1359-0294(00)00070-4).
- [2] Arora, Akash, et al. "Broadly Accessible Self-Consistent Field Theory for Block Polymer Materials Discovery." *Macromolecules*, vol. 49, no. 13, July 2016, pp. 4675–90, <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.6b00107>.
- [3] Aoyagi, Takeshi, et al. "A General-Purpose Coarse-Grained Molecular Dynamics Program." *Computer Physics Communications*, vol. 145, no. 2, 2002, pp. 267–79, [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(02\)00271-0](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(02)00271-0).