

JOURNEE SCIENTIFIQUE

de l'INSTITUT de CHIMIE de CLERMONT-FERRAND (ICCF)



Vendredi 7 février 2020

Amphi de Recherche, Pôle physique



Programme

Heure	Nom de l'orateur	Titre
8 h 30		SCF Jeunes chimistes
8 h 40	Peng CHENG	Decatungstate/H ₂ O ₂ system as an efficient photocatalyst for the decontamination of water
9 h 00	Gérald MUNOZ	Une nouvelle échelle "gros grains" pour la modélisation des réseaux élastomères réticulés
9 h 20	Nour BOU KARROUM	Mise au point d'une nouvelle stratégie de marquage par fluorescence pour un suivi dans un modèle <i>in vivo</i> : <i>Caenorhabditis elegans</i>
9 h 40	Philip CHENNEL	Evaluation des phénomènes de sorption entre des médicaments ophtalmiques et un dispositif d'administration
10 h 00		Pause
10 h 40	Rodolphe VALLEIX	Quantum dots colloïdaux de phosphore d'indium pour des applications LED
11 h 00	Boris EYHERAGUIBEL	TARA OCEAN - Aux origines de la pollution plastique <i>Mission microplastiques 2019</i>
11 h 20	Sabine SARRAUTE	Service Analyses Thermiques et Physico-chimiques
11 h 40	Mohamed-Mounder KOUICEM	Etude des mécanismes d'adhérence entre un support en PMMA et les films minces déposés par voie plasma
12 h 00	Hubert CASAJUS	Evolved thermostable Transketolase for the valorization of vegetable oils

Nom et prénom de l'intervenant : Peng CHENG

Statut : Doctorant

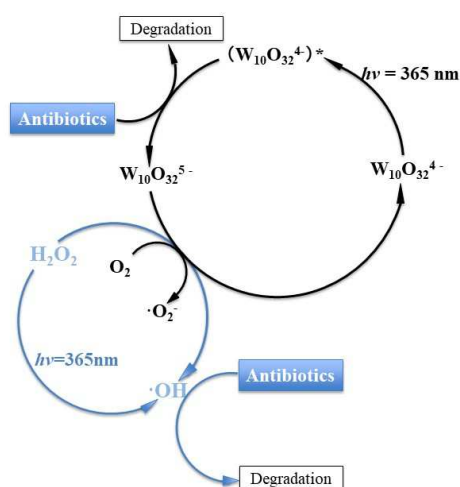
Equipe(s) et thématique(s) : Photochimie / PRE

Decatungstate/ H_2O_2 system as an efficient photocatalyst for the decontamination of water

P. CHENG, M. SARAKHA, G. MAILHOT

Nowadays, the water remediation from pharmaceutical and pesticides compounds is of high interest. Thus, the extensive use of these highly hazardous pollutants and therefore the contamination of air, soil, surface and ground waters has an unavoidable effect of human health. Advanced Oxidation Processes (AOPs) are the best promising techniques to update of the treatment plants enable to remove emerging contaminants. They are based on the generation of hydroxyl radicals ($\cdot\text{OH}$). These radicals are very strong oxidants and can react with a very wide variety of organic pollutants. The water soluble polyoxometalate sodium decatungstate, $\text{Na}_4\text{W}_{10}\text{O}_{32}$, has been investigated mainly for its catalytic versatility both in organic chemistry and in environmental applications. In the latter case, it has largely been employed as a catalyst in the field of water contamination treatment, especially as homogeneous photocatalyst for the degradation of organic pollutants in order to minimize their environmental persistence and hazardous effect.

The 365 nm excitation of $\text{W}_{10}\text{O}_{32}^{4-}$ leads to the formation of an oxygen-to-metal charge transfer excited state $\text{W}_{10}\text{O}_{32}^{4-*}$. Such reactive species is able to oxidize organic compounds through electron transfer or/and hydrogen abstraction. Such mechanism leads to the formation of the one electron reduced form of decatungstate $\text{W}_{10}\text{O}_{32}^{5-}$. The reduction of molecular oxygen to superoxide anion by such species may regenerate the starting catalyst, $\text{W}_{10}\text{O}_{32}^{4-}$ [1-3]. In the present work, the reduced species of decatungstate, $\text{W}_{10}\text{O}_{32}^{5-}$ has been efficiently used for the reduction of hydrogen peroxide in order to produce hydroxyl radicals. The whole system is described in the scheme 1.



Scheme 1. Photocatalytic behaviour of $\text{W}_{10}\text{O}_{32}^{4-}$ in presence of H_2O_2

Nom et prénom de l'intervenant : MUNOZ Gérald

Statut : Doctorant

Équipe(s) et thématique(s) : TIM / Interface Moléculaire et Modélisation Multi-échelle

Une nouvelle échelle “gros grains” pour la modélisation des réseaux élastomères réticulés

G. MUNOZ, A. DEQUIDT, N. MARTZEL, R. BLAAK, É. MUNCH, P. MALFREYT

La résistance à la fracture est une propriété indispensable pour les industriels, en particulier ceux travaillant avec des élastomères (polymères réticulés). Dans un polymère réticulé très fortement déformé, la force que subit chaque chaîne dépend de la structure locale du réseau (longueur des chaînes, nombre d'enchevêtrements, géométrie locale...). De manière générale, la rupture d'une chaîne est engendrée par une tension extrême. Suite à une rupture, la contrainte précédemment supportée par la chaîne est redistribuée à ses voisines, qui voient leurs tensions augmenter et elles aussi finir par rompre. S'en suit éventuellement une avalanche de ruptures qui conduit à une rupture totale du matériau. Afin d'étudier le comportement des réseaux élastomères, nous avons développé des modèles et outils numériques permettant de simuler nos polymères à l'échelle du réseau réticulé. Notre approche diffère des modèles analytiques historiques par l'utilisation de modèles gros grains (basé sur les modèles des réseaux élastiques avec des paramètres issus de mécanique quantique, dissipative particle dynamics ou bien de données expérimentales). Un de nos premiers résultats a été de pouvoir mesurer la distribution locale de la contrainte pendant l'élongation du matériau.

Nom et prénom de l'intervenant : Nour BOU KARROUM

Statut : ATER

Equipe(s) et thématique(s) : COM / CESMA

Mise au point d'une nouvelle stratégie de marquage par fluorescence pour un suivi dans un modèle *in vivo* : *Caenorhabditis elegans*

N. BOU KARROUM, C. MICHELIN, P. CHALARD, P. VEISSEIRE, S. BORNES, M. BONNET

L'objectif de ce projet est de mettre au point une technique de marquage fluorescent permettant de suivre en microscopie à fluorescence le devenir d'une molécule ou d'un microorganisme *in vivo*, dans l'intestin du nématode *Caenorhabditis elegans*. Cette approche permettra de vérifier l'ingestion de la molécule et/ou du microorganisme et d'étudier son impact *in vivo*. Pour cela, une sonde fluorescente sera chimiquement synthétisée. Elle sera couplée à une molécule d'intérêt (anti-inflammatoire, anti-oxydante, anti-pathogène) elle-même attachée à la surface d'une bactérie ou sera internalisée dans un microorganisme à potentiel bénéfique chez l'hôte (activité probiotique, intérêt nutritionnel). Nous pourrons ainsi suivre la fluorescence grâce à la transparence du nématode, et étudier le devenir et l'impact de ces microorganismes et molécules marqués *in vivo*.

Nom et prénom de l'intervenant : CHENNELL Philip

Statut : MCU-PH

Equipe(s) et thématique(s) : MPS / DMIC2

Evaluation des phénomènes de sorption entre des médicaments ophtalmiques et un dispositif d'administration

P. CHENNELL, Y. LE BASLE, V. SAUTOU

Les phénomènes de sorption entre des médicaments ophtalmiques et le dispositif qui sert à leur administration peuvent avoir un impact significatif sur la quantité de principe actif réellement délivrée. L'objectif de cette étude a été d'évaluer ces phénomènes entre des médicaments ophtalmiques et un dispositif d'administration contenant un matériau connu pour être à risque d'interactions.

Huit médicaments ont été mis en contact avec les parties à risque (en conditions statiques par immersion et en conditions simulant l'utilisation du dispositif), et les concentrations en principe actif (PA) ont été monitorées par chromatographie liquide avec détecteur UV-vis pendant la durée de l'étude. Une étude du matériau visant à rechercher la présence des principes actifs après contact a aussi été réalisée par XPS, ATR-FTIR et mesure du potentiel Zeta de surface.

Sur les 8 médicaments testés, 4 n'ont montrés aucun signes de phénomènes de sorption (concentrations en PA stables), mais 4 autres ont présentés des pertes pouvant aller jusqu'à 85% en PA. Les études du matériau ont mis en évidence les difficultés à pouvoir détecter de très faibles quantités de PA, mais ont malgré tout confirmé la présence d'interactions pour 2 médicaments. Cependant, l'influence de nombreux paramètres reste encore à préciser.

Nom et prénom de l'intervenant : VALLEIX Rodolphe

Statut : doctorant

Equipe(s) et thématique(s) : MI / ML

Quantum dots colloïdaux de phosphure d'indium pour des applications LED

R. VALLEIX, D. BOYER, P. BOUTINAUD, G. CHADEYRON

Dans la course à la miniaturisation des systèmes optiques tels que les dispositifs d'éclairage ou d'affichage, le développement de nanoparticules luminescentes représente un axe de développement majeur. Les nanocristaux de semi-conducteurs colloïdaux fluorescents, communément appelés « quantum dots » (QDs), sont de bons candidats pour de telles applications. Les QDs ont généralement un diamètre inférieur à 10 nm et présentent des propriétés optiques ajustables en fonction de leur taille. Cependant, les QDs ayant actuellement la meilleure stabilité sous irradiation continue (UV) et les performances optiques les plus élevées contiennent du cadmium (Cd), quasiment interdit en Europe (RoHS et REACH). Le but de ce travail est de développer des QDs sans Cd avec un contrôle précis de la stœchiométrie et du diamètre final des QDs avec une distribution de taille étroite. Pour répondre à cet objectif, nous avons synthétisé des QDs de phosphure d'indium (InP) à partir d'halogénures d'indium et d'aminophosphine, permettant de couvrir une gamme de longueurs d'onde allant de 480 à 680 nm.

Nom et prénom de l'intervenant : EYHERAGUIBEL Boris

Statut : Chercheur contractuel

Equipe(s) et thématique(s) : BIOMETA / META

TARA OCEAN - Aux origines de la pollution plastique

Mission microplastiques 2019

*B. EYHERAGUIBEL, M. TRAÏKIA, B. DIEME, C. JOUSSE, M. LEREMBOURE,
P. AMATO, A.-M. DELORT*

Aujourd'hui, on estime que 80 % des plastiques en mer sont d'origine terrestre et il est urgent d'explorer et de décrire les fuites de ces déchets vers la mer pour mieux endiguer cette « hémorragie ». Sur une période de 6 mois, de mai à novembre 2019, la goélette Tara a parcouru les 4 façades maritimes européennes et prélevé 2700 échantillons sur les embouchures de 9 grands fleuves en Europe (45 sites). Il s'agit de la première mission dédiée à la pollution plastique des fleuves réalisée à l'échelle européenne. Elle a été initiée par la Fondation Tara Océan, en partenariat avec 17 laboratoires de recherche et coordonnée scientifiquement par le CNRS. Ses objectifs : identifier les sources de pollution, comprendre la fragmentation des microplastiques dans les fleuves, prédire leur dispersion vers l'océan, comprendre leurs impacts sur la biodiversité marine et leurs effets sur la chaîne alimentaire. Dans le cadre de cette mission, l'équipe BioMeta s'intéresse particulièrement à la colonisation et l'activité microbienne à la surface des plastiques. Elle collabore au développement d'approches multi-omiques (métabolomique) afin d'identifier les microorganismes capables de jouer un rôle dans la fragmentation et la biodégradation des plastiques. Elle étudie également la toxicité des microplastiques sur les organismes en analysant les polluants qui peuvent s'accumuler à leur surface.

Nom et prénom de l'intervenant : SARRAUTE Sabine

Statut : IE

Equipe(s) et thématique(s) : Service Analyses Thermiques et Physico-chimiques (SATEPC)

Service Analyses Thermiques et Physico-chimiques

S. SARRAUTE

La vocation de ce service est de donner accès à des techniques d'analyses pour la caractérisation physicochimique et thermodynamique de systèmes d'intérêt. Ce service regroupe des techniques et des compétences humaines fortes en **analyses thermiques et thermodynamiques** (calorimétrie, thermogravimétrie, digramme de phases) et en **analyses physicochimiques** (potentiométrie, propriétés de transport, propriété volumique).

Nom	Spécialité
Sabine Sarraute <i>Responsable du service</i>	Propriétés de transport, DSC
Karine Ballerat-Busserolles <i>Référent scientifique</i>	Calorimétrie et analyse thermique (DSC), mesures potentiométriques, densimétrie
Nicole Nenot	Calorimétrie et analyse thermique, potentiométrie
Lawrence Frezet	Analyse thermique (ATD, ATG)
Jean-Michel Andanson	Viscosité, Densité et thermomicroscope

L'accès du service est ouvert à toutes les équipes de l'ICCF mais également à d'autres laboratoires de recherche publique ou à des entreprises extérieures dont la société CALNESIS est un partenaire privilégié.

Nom et prénom de l'intervenant : KOUICEM Mohamed Mounder

Statut : Doctorant

Equipe(s) et thématique(s) : MI / MATEPP

Etude des mécanismes d'adhérence entre un support en PMMA et les films minces déposés par voie plasma

*M. M. KOUICEM¹, E. TOMASELLA¹, A. BOUSQUET¹, G. MONIER², C. ROBERT-GOUMET²,
L. DUBOST³*

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, SIGMA Clermont, ICCF, F-63000 Clermont-Ferrand, France

² Université Clermont Auvergne, CNRS, Institut Pascal, F-63000 Clermont-Ferrand, France

³ IREIS/ HEF Groupe, Av. B. Fourneyron 42166 Andrézieux Bouthéon.

Le groupe HEF propose à ses différents clients des services de traitement de surface de polymère pour des applications optiques ou de décoration. Le polyméthacrylate de méthyle (PMMA) est l'un des polymères les plus utilisés pour ces applications. Il offre d'excellentes propriétés optiques et mécaniques, une grande précision de moulage et possède des coûts de commercialisation très bas. Toutefois, les revêtements déposés par plasma (PVD-PECVD) sur ce substrat s'avèrent peu adhérents, ce qui est un frein à leur utilisation optimale en condition d'usage. L'objectif de cette étude est de comprendre les mécanismes d'interactions entre le PMMA et le plasma et de proposer des solutions de traitement de surface permettant d'obtenir une adhérence forte et durable. Plusieurs moyens d'investigations physico-chimiques ou mécaniques ont été mis en place pour qualifier les matériaux : Test de quadrillage, XPS, ATR-FTIR, MEB, SEO (Spectroscopie à émission optique).

Nom et prénom de l'intervenant : CASAJUS Hubert
Statut : Post-doctorant
Equipe(s) et thématique(s) : BIOMETA / BIOCAT

Evolved thermostable Transketolase for the valorization of vegetable oils

H. CASAJUS, T. DE DIOS MIGUEL, E. METAY, N. DUGUET, W.-D. FESSNER, F. CHARMANTRAY, L. HECQUET

The production of bio-based aliphatic aldehydes from vegetable oils, renewable raw material, offers many applications. Chemical processes by oxidative cleavage or in the presence of organocatalysts such as analogs of thiamine have been reported^{1,2}. These processes require very high temperature, organic solvents and generate toxic by-products.

The goal of this study is to develop a novel ecofriendly enzymatic C-C bond cleavage process catalyzed by a thiamine diphosphate (ThDP) dependent enzyme, transketolase (TK) (Figure 1). This enzyme is commonly used for the stereoselective formation of a C-C bond³ but our project aims to study the reverse TK-catalyzed reaction for the C-C bond cleavage of a modified fatty acid **1** derived from methyl oleate as substrate in order to generate highly valuable aldehydes **2**.

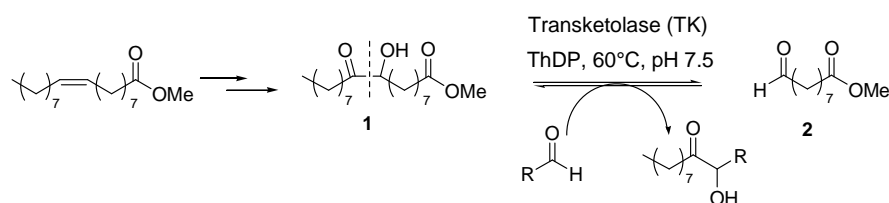


Figure 1: Main route to fatty aldehydes **2** from a modified methyl oleate derivative **1**

For this study, the thermostable TK from *Geobacillus stearothermophilus* (TKgst)⁴ will be used firstly to synthesize different hydroxyketones analogues of substrate **1**. Then, the conditions and the results of the enzymatic cleavage catalyzed by different TKgst variants will be discussed.

References

- 1 E. Deruer, N. Duguet and M. Lemaire, *ChemSusChem*, 2015, 8, 2481–2486.
- 2 N. D. Vu, S. Bah, E. Deruer, N. Duguet and M. Lemaire, *Chem. – Eur. J.*, 24, 8141–8150.
- 3 Y. Kobori, D. C. Myles and G. M. Whitesides, *J. Org. Chem.*, 1992, 57, 5899–5907.
- 4 J. Abdoul-Zabar, I. Sorel, V. Hélaine, F. Charmantray, T. Devamani, D. Yi, V. de Berardinis, D. Louis, P. Marlière, W.-D. Fessner and L. Hecquet, *Adv. Synth. Catal.*, 2013, 355, 116–128.