

2022

# Highlights

Laboratoire de chimie  
de coordination



# Sommaire

---

**3** Édito

**4** Laboratoire de chimie de coordination : présentation et chiffres clés

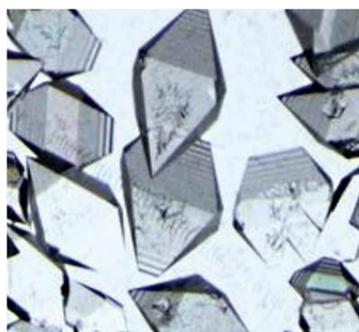
**6** Chimie et catalyse



**11** Chimie et santé



**15** Chimie et matériaux



**20** Les temps forts de 2022

**22** Lexique

# Édito

---

Chers amis et collègues,

Je suis heureux de vous présenter la brochure "Highlights du LCC 2022", qui rassemble les principales avancées scientifiques de notre laboratoire de chimie de coordination (LCC) de l'année écoulée. Nous sommes fiers de partager les résultats de nos équipes dans les domaines de la chimie et de la catalyse, de la chimie et de la santé, ainsi que de la chimie et des matériaux.

Parmi les faits marquants de l'année, nous avons réussi à valoriser la biomasse par hydrogénation sélective à l'aide de nanoalliages qui peuvent fournir une réactivité améliorée en catalyse. Nous avons également découvert une nouvelle famille d'anti-inflammatoires, qui pourraient être utilisés pour traiter des maladies chroniques. Dans le domaine des matériaux, les études par diffraction des rayons X sous pression permettent de mieux comprendre les relations structure-propriété des matériaux à transition de spin. Les matériaux à transition de spin sont des matériaux qui ont des propriétés magnétiques uniques et peuvent être utilisés dans les technologies de l'énergie, les ordinateurs quantiques et les capteurs. En utilisant des rayons X pour étudier ces matériaux sous pression, nous pouvons découvrir de nouvelles propriétés et les utiliser pour développer de nouveaux matériaux.

Nous avons également noué des partenariats académiques et industriels, qui nous ont permis de mettre en application notre recherche et de la rendre accessible à un public plus large, et signé une nouvelle convention avec l'université de Carthage en Tunisie.

Le LCC procure un environnement stimulant pour nos chercheurs qui ont, cette année encore, remporté de nombreux prix et distinctions, récompensant l'excellence de leur travail dans leur domaine. Je suis également fier de vous annoncer que nous avançons sérieusement pour construire un nouveau bâtiment sur notre campus dans le cadre du projet LCC-BAT-INNOV, pour non seulement agrandir notre espace de recherche mais aussi accueillir des partenaires industriels et start-ups. Nous visons à mettre l'innovation au cœur de notre laboratoire, reconnu pour son excellence en recherche fondamentale. Ce bâtiment permettra aux partenaires industriels et start-ups de travailler aux côtés de nos chercheurs et de bénéficier de notre expertise technique et scientifique pour développer leurs propres projets innovants. Cela permettra aussi à nos chercheurs une proximité avec des industriels que nous espérons fructueuse.

Enfin, je tiens à souligner notre engagement à diffuser la culture scientifique. Nous avons organisé des portes ouvertes pour la fête de la science pour sensibiliser le public à l'importance de la recherche scientifique et inciter les jeunes à poursuivre des études dans les domaines de la chimie et de la science en général. Nous avons également organisé d'autres rencontres tout au long de l'année pour partager les dernières avancées de la recherche.

En conclusion, l'année 2022 a été riche en projets, en découvertes et en avancées pour le LCC, et nous espérons que cette brochure vous donnera une idée de l'excellence de notre travail et de l'engagement de notre laboratoire envers la recherche pour continuer à contribuer au développement de la science au service de la société.

Sincèrement,

Azzedine Bousseksou

# Présentation et chiffres-clés du laboratoire



## La recherche au LCC

La recherche développée au LCC possède une unité thématique qui s'articule autour de la chimie des métaux et des hétéro-éléments.

Les domaines d'application sont la catalyse, la synthèse organique, la synthèse macromoléculaire, les matériaux moléculaires, les nanosciences, la chimie bio-inorganique, les médicaments...



## Nombre de personnels

À présent, plus de 250 personnes travaillent au laboratoire de chimie de coordination, selon la répartition suivante :

- 82 chercheurs et enseignant-chercheurs
- 42 personnels d'accompagnement de la recherche
- 65 doctorants et doctorantes et 16 post-docs
- 12 stagiaires
- 38 contractuels



## Équipes de recherche

13 équipes de recherche sont réparties parmi les trois axes thématiques du laboratoire :

- « chimie et catalyse »
- « chimie et santé »
- « chimie et matériaux »

Les recherches menées sont à l'interface avec d'autres disciplines : la chimie fine et catalyse à l'interface avec le génie des procédés ; les matériaux moléculaires à l'interface avec la physique et la chimie bio-inorganique et le rôle des métaux en biologie à l'interface avec la santé et les sciences de la vie.



## Services scientifiques et techniques

Le LCC possède 13 services scientifiques et techniques qui représentent l'ensemble de l'équipement et du soutien à la recherche nécessaire au fonctionnement d'une grosse unité de recherche travaillant essentiellement dans le domaine de la chimie moléculaire.

Les services du LCC sont intégrés dans les services de la structure fédérative en chimie moléculaire et ouverts à la communauté scientifique toulousaine.



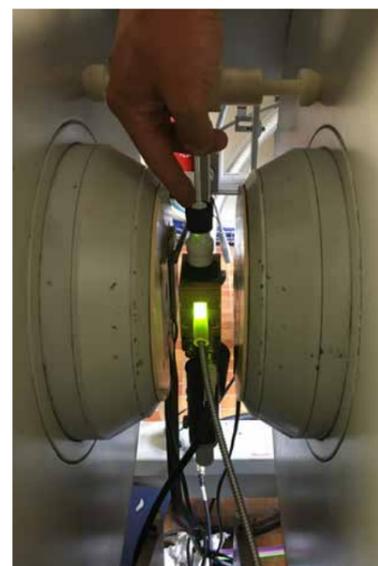
© Cyril FRESILLON / CNRS Photothèque



© Cyril FRESILLON / CNRS Photothèque



© Cyril FRESILLON / CNRS Photothèque



© Bruno MELET / LCC Toulouse

Ci-dessus, quatre équipements de recherche (de gauche à droite) : résonance magnétique nucléaire (RMN), microscopie électronique à transmission, diffraction de rayons X et résonance paramagnétique électronique (RPE)



## *Production scientifique*

En moyenne par an, **200 publications** et **12 ouvrages scientifiques** sont issus du laboratoire.

**17 thèses** en moyenne sont soutenues par an.

Le laboratoire accueille également chaque semaine une **conférence** d'un laboratoire ou organisme extérieur.



## *Collaborations internationales*

Le LCC a mis en place **deux laboratoires internationaux** avec le Mexique et les États-Unis, **trois projets internationaux** de coopération scientifique avec l'Espagne, la Russie et le Brésil et **plusieurs groupements de recherches** internationaux avec notamment la Russie, le Japon et l'Ukraine.



## *Innovation et industries*

Le LCC participe annuellement à environ **8 dépôts de brevets**. Le transfert technologique s'opère au travers des **contrats de collaboration** mis en place avec nos partenaires industriels, dans des domaines applicatifs très variés, et dans lesquels nos équipes de recherche apportent leur expertise.



## *Formations*

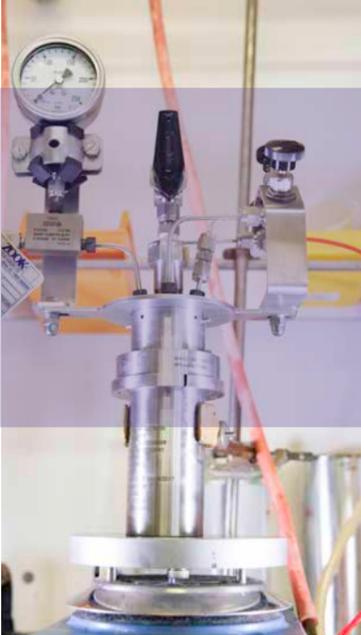
Le LCC est impliqué dans la formation d'étudiants *via* l'encadrement de doctorants et post-doctorants mais également *via* la dispense d'enseignements en licence et master à l'université Paul Sabatier, à l'INP de Toulouse et l'IUT de Castres.



## *Prix et distinctions*

En moyenne chaque année, ce sont **10 prix et distinctions** qui sont attribués à des membres du laboratoire.





# I. Chimie, catalyse

## Transformation énantiosélective acellulaire de CO<sub>2</sub> en sucre

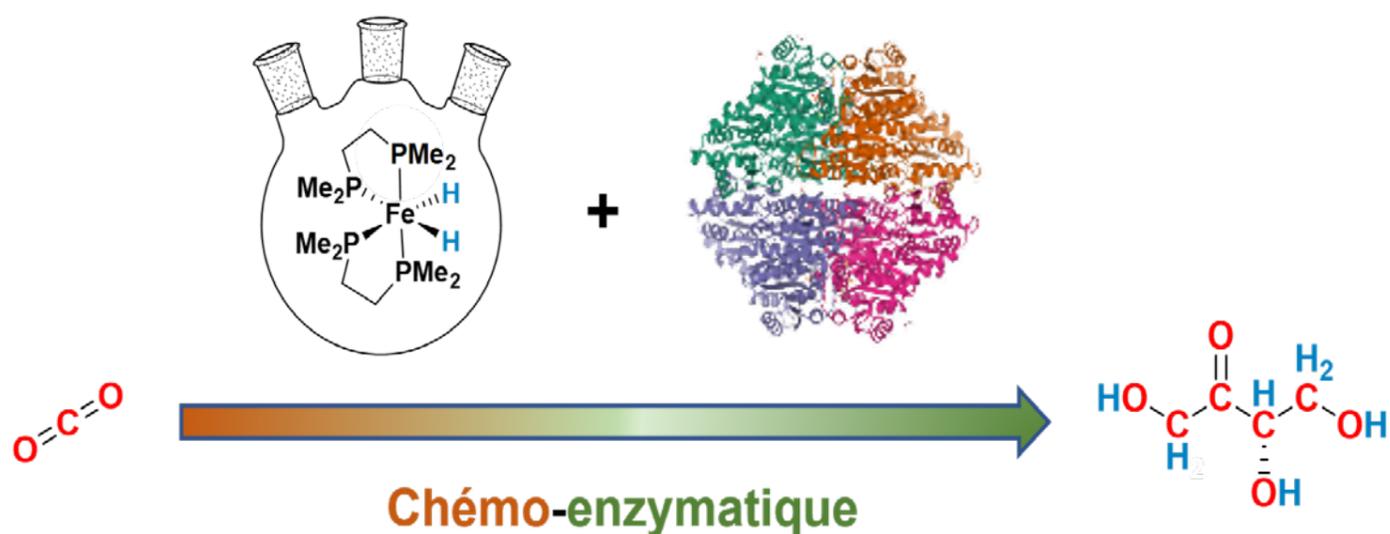
Mots-clés : cascade, énantiosélective, CO<sub>2</sub>

La photosynthèse est le processus clé permettant aux organismes vivants d'utiliser le CO<sub>2</sub> comme vecteur d'énergie et source de carbone sur Terre. Pour les chimistes une telle transformation est un défi synthétique majeur, puisqu'il implique de pouvoir à la fois réduire le CO<sub>2</sub> et former des liaisons C-C pour générer des chaînes polyols comportant des centres carbonés asymétriques.

Dans ce travail, nous avons utilisé nos connaissances sur la réduction sélective du CO<sub>2</sub> en analogue de formaldéhyde par hydroboration catalysée par un complexe hydrure de fer.

L'étude a consisté à modifier les conditions de cette réduction chimique pour assurer la compatibilité de cette étape avec l'étape suivante de transformation enzymatique.

Cette cascade chémo-enzymatique a notamment permis de synthétiser le L-Erythrose, un sucre à 4 carbones peu abondant. Ce procédé représente la première transformation acellulaire du CO<sub>2</sub> en sucre de manière parfaitement énantiosélective.



© S. BONTEMPS / LCC Toulouse

### Référence

Enantioselective reductive oligomerization of carbon dioxide into L-erythrose via a chemo-enzymatic catalysis, Sarah Desmons,\* Katie Grayson-Steel, Nelson Nuñez-Dallos, Laure Vendier, John Hurtado, Pere Clapés, Régis Fauré, Claire Dumon, Sébastien Bontemps\*  
J. Am. Chem. Soc. **2021**, 143, 16274–16283, <https://doi.org/10.1021/jacs.1c07872>

### Collaboration

R. Fauré et C. Dumon, TBI.

### Financement

Région Midi-Pyrénées et Université Fédérale de Toulouse  
ANR programme JCJC "ICC"  
Carnot 3BCAR projet SUCRES

### Équipe

Activation de petites molécules



## Manganèse : un métal roturier qui gagne ses lettres de noblesse

Mots-clés : Manganèse, catalyse, synthèse organique

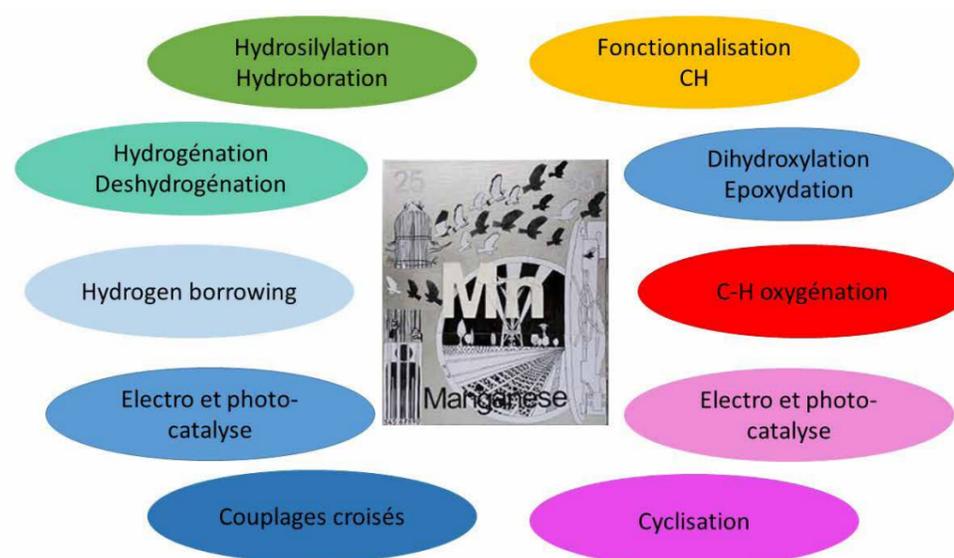
La catalyse homogène utilisant les métaux de transition est en développement constant depuis la fin des années 1960. La plupart des avancées historiques a été réalisée avec des métaux nobles. Cependant, au cours des 20 dernières années, l'évolution des exigences économiques, géopolitiques et environnementales a encouragé les chercheurs à développer des alternatives reposant sur l'application de métaux non-nobles, abondants et moins onéreux.

Le manganèse remplit non seulement ces critères mais possède également le plus large éventail d'états d'oxydation des métaux de la première rangée du bloc d, de -III à +VII, offrant ainsi un vaste terrain de jeu pour le développement de catalyseurs efficaces lorsqu'il est associé à un ligand judicieusement conçu. Toutes ces caractéristiques font du manganèse un candidat idéal pour élaborer des catalyseurs complémentaires des systèmes catalytiques impliquant d'autres métaux non nobles tels que le nickel, le fer, le cobalt ou le cuivre.

Une équipe de chercheurs toulousains, spécialisée en chimie du manganèse et ses applications en catalyse, a participé à la rédaction et l'édition du livre "Manganese Catalysis in Organic Chemistry".

Ce dernier couvre les applications les plus importantes en synthèse organique telles que les réactions de réduction et d'oxydation, de formation de liaisons C-C, C-N, C-X, de couplage croisé, d'activation des liaisons C-H, en passant par les réactions de dihydroxylation et d'époxydation.

Ce livre constitue un ouvrage de référence pour tout chimiste organicien, universitaire ou industriel, intéressé par la catalyse avec des métaux non nobles, la synthèse organique et la chimie durable.



© J.-B. SORTAIS / LCC Toulouse

### Référence

Manganese Catalysis in Organic Synthesis, J.-B. Sortais (Ed.) WILEY-VCH GmbH, Weinheim, Germany, 2021, including two chapters from A.A. Grineva, N. Lugan and D.A. Valyaev: "Organometallic Manganese Compounds in Organic Synthesis." and from J.-B. Sortais, R. Buhaibeh, Y. Canac: "Manganese-Catalyzed Hydrogenation and Hydrogen Transfer Reactions."

### Équipe

Ingénierie moléculaire des pré-catalyseurs

## Des ppm de palladium catalysent l'hydrogénation d'alcènes en flux

Mots-clés : Hydrogénation, Palladium (Pd), Spillover

La catalyse d'hydrogénation sur des métaux finement divisés a été introduite par Paul Sabatier à Toulouse il y a plus d'un siècle. Il s'agit aujourd'hui d'un des procédés catalytiques les plus importants, trouvant de nombreuses applications industrielles. Quelques années après les travaux de Sabatier, Hugh S. Taylor a proposé que des atomes métalliques de surface sous-coordinés devaient présenter une grande réactivité. Depuis lors, les chimistes n'ont cessé de travailler à la diminution de la taille des nanoparticules (NP) métalliques jusqu'à la taille ultime, l'atome isolé (AI).

La catalyse supportée sur AI est actuellement un axe de recherche majeur en catalyse. Dans ces systèmes, l'absence d'effet d'ensemble et l'existence d'effets électroniques forts induisent une réactivité très différente de celle des NP métalliques. Les études actuelles menées sur les catalyseurs à AI se concentrent principalement sur leur distinction des NP et la possibilité d'une synergie entre ces deux espèces n'a été que rarement explorée.

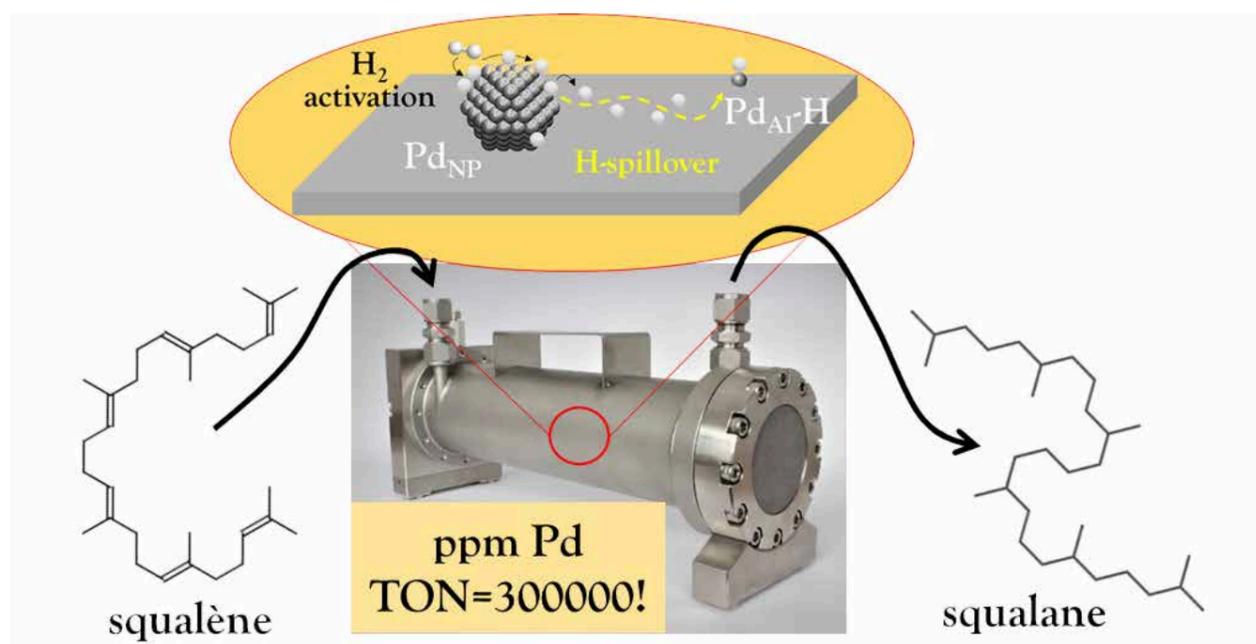
Une catalyse coopérative opère entre des AI de Pd ( $\text{Pd}_{\text{AI}}$ ) et des NP de Pd ( $\text{Pd}_{\text{NP}}$ ) supportés sur carbone

pour l'hydrogénation d'alcènes. Elle implique :

- l'activation de  $\text{H}_2$  sur les  $\text{Pd}_{\text{NP}}$ ,
- le spillover d'hydrogène des  $\text{Pd}_{\text{NP}}$  vers les  $\text{Pd}_{\text{AI}}$  via le support
- la réaction catalytique sur des espèces  $\text{H-Pd}_{\text{AI}}$  extrêmement réactives.

La préparation et la caractérisation de catalyseurs où des  $\text{Pd}_{\text{AI}}$  et des  $\text{Pd}_{\text{NP}}$  coexistent sur un support carboné a été décrite. Ces catalyseurs sont extrêmement actifs pour l'hydrogénation d'alcènes.

Il est démontré que le squalène pur (sans solvant) peut être converti en squalane (un actif cosmétique important) en utilisant seulement 300 ppm de Pd à 120 °C sous 20 bars de  $\text{H}_2$  (cf. Figure). La stabilité du catalyseur a été évaluée dans un réacteur à flux continu et un turnover (TON) supérieur à 300 000 a été mesuré, sans aucune perte d'activité. Un passage à l'échelle pilote sur un microréacteur commercial continu a été validé. Ces travaux ont permis le développement d'une nouvelle génération de catalyseurs stables et hautement actifs intégrant l'utilisation ultra-rationnelle d'un métal précieux critique et stratégique.



© Philippe SERP / LCC Toulouse

### Référence

Solvent-Free Hydrogenation of Squalene Using Parts per Million Levels of Palladium Supported on Carbon Nanotubes: Shift from Batch Reactor to Continuous-Flow System, B. Guicheret, L. Vanoye, C. Rivera-Carcamo, C. de Bellefon, P. Serp, R. Philippe, A. Favre-Reguillon, *ChemSusChem* **2022**, e202200916  
<https://doi.org/10.1002/cssc.202200916>

### Collaborations

- CP2M - Université Lyon UMR 5128 CNRS – CPE Lyon

### Financements

Agence Nationale de la Recherche (projet ANR ANR-19-CE07-0030, COMET)  
FUI (projet DEEPER - contrat n° 15 021131 01 – CNR006)

### Équipe

Catalyse et chimie fine



## Des ligands redox-actifs pour changer la sélectivité de réactions catalysées au rhodium

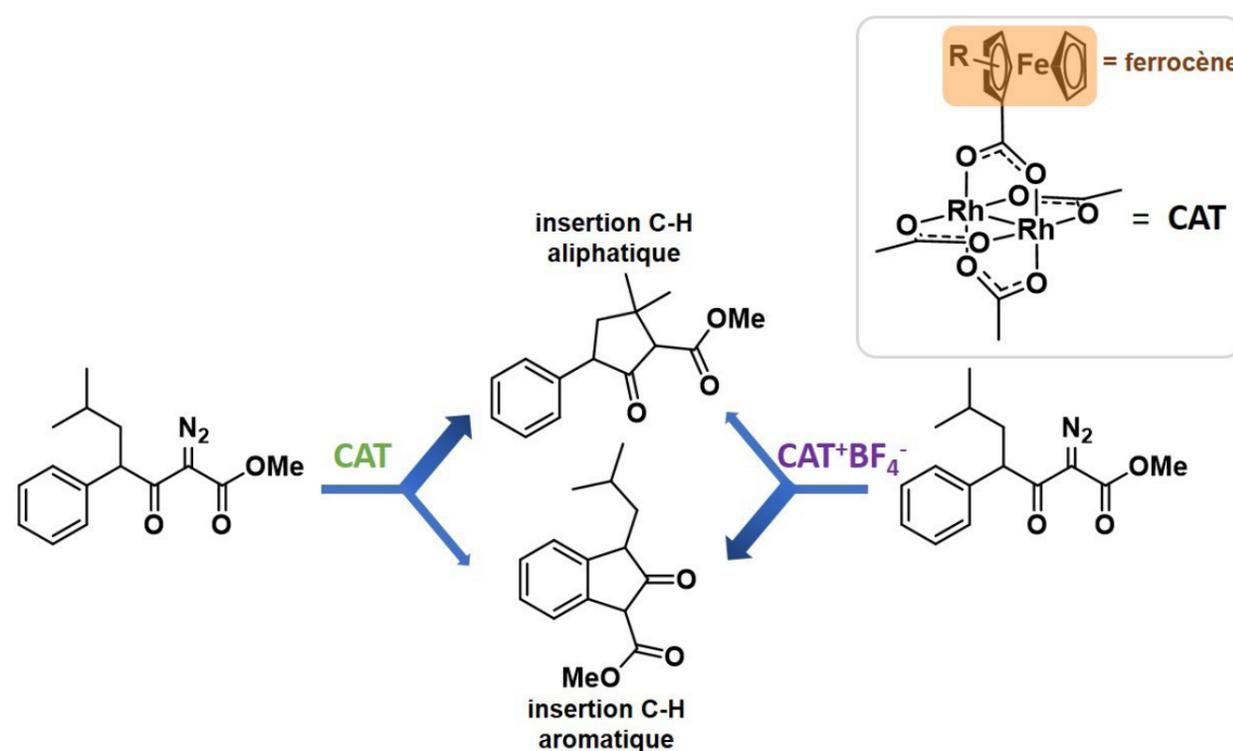
Mots-clés : Ferrocène, dirhodium, diazos

Les complexes de dirhodium(II) sont des catalyseurs extrêmement efficaces pour transformer des substrats diazos en composés organiques complexes. De nombreuses transformations peuvent être effectuées par ces complexes, notamment insertions dans des liaisons C-H ou X-H, cyclopropanations, cycloadditions. Pour certains substrats, des problèmes de chimiosélectivité peuvent se poser. Les ligands sur le catalyseur de dirhodium(II) ont une influence certaine sur la sélectivité de ces réactions de par leurs propriétés stériques et électroniques. Si l'influence des propriétés stériques a pu être mise en évidence dans des travaux récents, l'influence des propriétés électroniques seules est difficile à évaluer. D'un autre côté, depuis une vingtaine d'années, de nombreux travaux montrent que le changement d'état d'oxydation d'un ligand rédox-actif sur un métal peut modifier la réactivité de ce complexe.

Nous avons introduit des ligands carboxylates ferrocéniques rédox-actifs dans des complexes

de dirhodium(II) afin d'étudier l'influence de l'oxydation du ferrocène sur la sélectivité de réactions de décomposition de substrats diazos. Onze nouveaux complexes hétéroleptiques de dirhodium(II) possédant un seul ligand ferrocénique ont ainsi été préparés et analysés par électrochimie en voltammétrie cyclique. Quatre complexes ont ainsi été sélectionnés et évalués en catalyse dans leur forme oxydée et réduite sur un substrat diazo susceptible de former deux produits résultant d'une insertion C-H aliphatique ou aromatique.

Nous avons ainsi montré que nous pouvons changer la chimiosélectivité de cette réaction en oxydant le ferrocène en ferrocénium, avec un rapport entre les deux produits passant de 0,7 à 1,5. La preuve de concept ayant été obtenue, nous étudions maintenant l'influence du contre-anion (dans la forme oxydée), du solvant et du nombre de ligands ferrocéniques coordonnés au dirhodium sur la sélectivité, avec différents substrats diazos.



© A. LABANDE / LCC Toulouse

### Référence

Heteroleptic Dirhodium(II) Complexes with Redox-Active Ferrocenyl Ligands: Synthesis, Electrochemical Properties, and Redox-Responsive Chemoselectivity in Carbene C-H Insertion, Ruzhylo, I., Sournia-Saquet, A., Moreau, A., Delord, T., Manoury, E., Poli, R., Labande, A., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2022**, e202200033., <https://doi.org/10.1002/ejic.202200033>

### Collaborations

- Ces travaux ont été réalisés en collaboration avec le Dr Philippe DAUBAN (ICSN, CNRS, Gif-sur-Yvette).

### Financements

- ANR PRC CHamRhOx (ANR-19-CE07-0043)

### Équipe

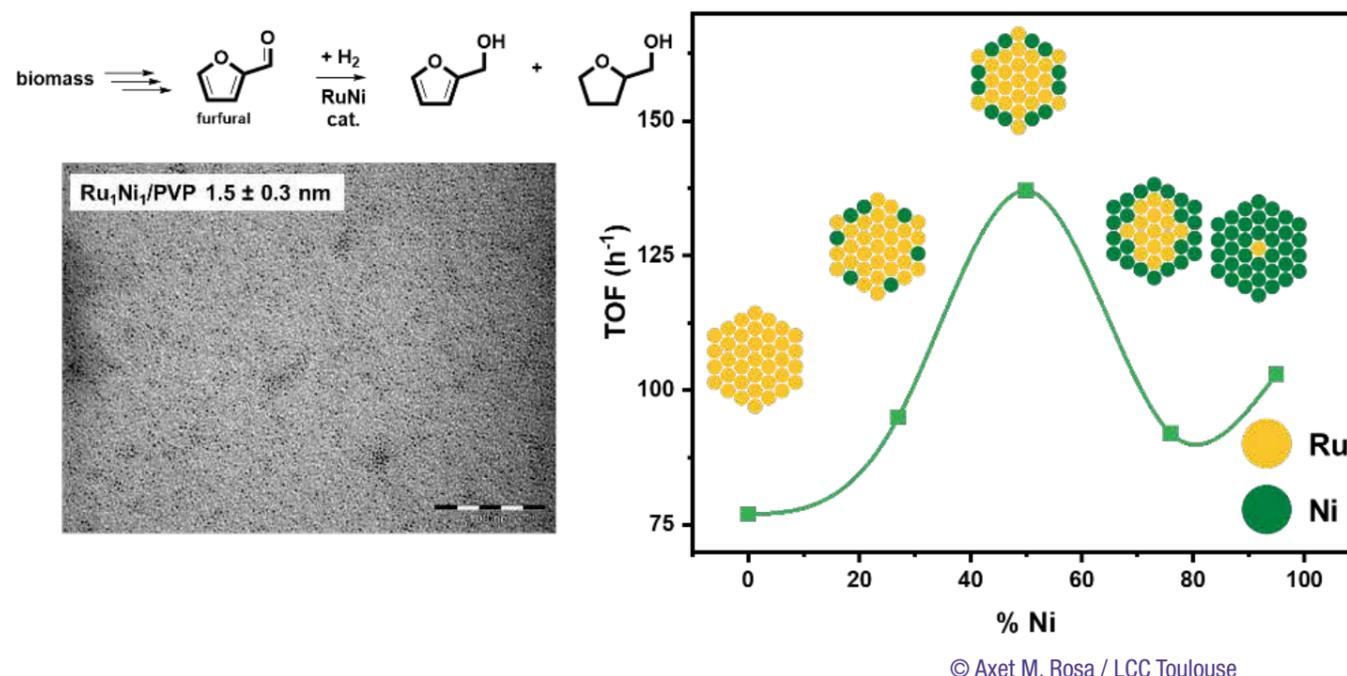
Ligands, Architectures Complexes et Catalyse

## Valorisation de la biomasse par hydrogénation sélective

Mots-clés : Catalyse, biomasse, hydrogénation

Les nanoalliages constitués de plusieurs métaux, souvent bimétalliques, mais aussi trimétalliques et plus, représentent un ensemble prometteur de matériaux pour plusieurs applications. En catalyse, les nanoalliages peuvent fournir une réactivité améliorée par rapport aux homologues à un seul métal en raison d'un effet de synergie entre les métaux associés. Les caractéristiques des nanoparticules bimétalliques étant déterminées par les différences de propriétés entre les métaux qui les composent, telles que l'électronégativité ou les potentiels d'ionisation, mais aussi par l'ordre chimique (alliage, cœur-coquille, entre autres) des métaux, ainsi que leur taille et leur forme, une synthèse contrôlée est donc requise pour un gain en activité et sélectivité.

En vue de leur évaluation en hydrogénation catalytique du furfural, une molécule issue de la biomasse, des nanoparticules de RuNi avec un cœur de ruthénium et une coquille enrichie en nickel ont été préparées en utilisant plusieurs rapports Ru/Ni. Les catalyseurs avec du Ni en surface sont très sélectifs pour la réduction de la liaison C=O, tandis que les catalyseurs avec du Ru à la surface conduisent à l'hydrogénation du cycle hétéroaromatique. Des calculs DFT effectués sur des nanoparticules de Ru hydrogénées mettent en évidence des différences sur les énergies d'adsorption sur la surface métallique qui sont en accord avec les résultats de catalyse.



### Référence

Bimetallic RuNi nanoparticles as catalysts for upgrading biomass: metal dilution and solvent effects on selectivity shifts, Cardona-Farreny, M., Lecante, P., Esvan, J., Dinoi, C., Del Rosal, I., Poteau, R., Philippot, K., Axet, M. R., *Green Chem.* **2021**, 23, 8480-8500. <https://doi.org/10.1039/D1GC02154K>

### Collaborations

- Pierre Lecante CEMES, CNRS Toulouse
- Jérôme Esvan CIRIMAT, Université de Toulouse, CNRS-INPT-UPS
- Chiara Dinoi, Iker del Rosal, Romuald Poteau, LPCNO INSA-CNRS-UPS, Université de Toulouse

### Équipe

Ingénierie des nanoparticules métalliques



## II. Chimie et santé

### Rôle de l'ARN G-quadruplex dans l'infection par le virus VIH-1

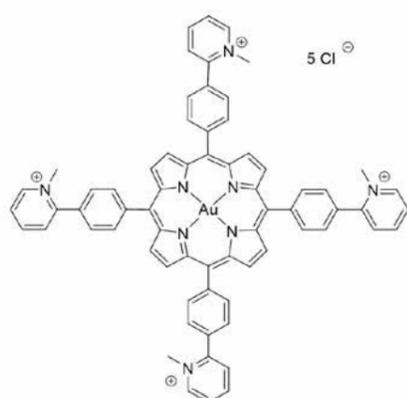
Mots-clés : Virus VIH-1, ARN G-quadruplex, métalloporphyrines

Les acides nucléiques G-quadruplex sont des structures secondaires d'ARN ou d'ADN à quatre brins que l'on trouve dans des séquences riches en guanines. Ils se forment par appariement de guanines par plateaux de quatre guanines. Ces structures sont impliquées dans la régulation de nombreux processus biologiques mais leur rôle chez les virus est moins connu. Le génome du virus VIH-1 contient 10 séquences susceptibles de former un G-quadruplex. Il est à noter que ces séquences sont hautement conservées dans le virus VIH-1, ce qui suggère un rôle vital de ces dernières pour le virus.

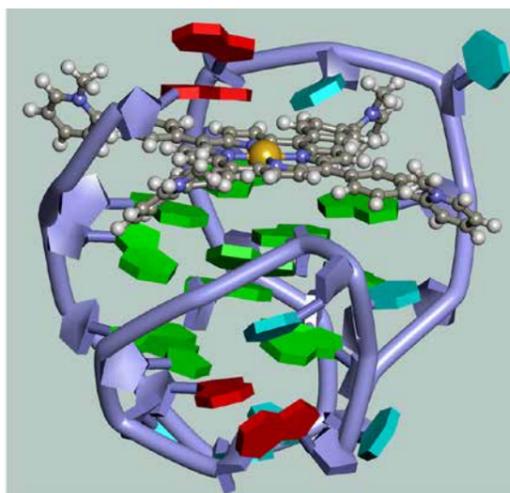
Nous avons préparé des complexes métalliques à base de porphyrines d'or(III) pour cibler les G-quadruplex de manière spécifique. Ces complexes inhibent la prolifération virale à des concentrations du même ordre de grandeur

que l'AZT (zidovudine), un médicament antiviral classique dans le traitement du virus VIH-1. Cependant, leur cible pharmacologique s'avère différente comme démontré dans l'étude. En effet, nous avons pu montrer que la cible des porphyrines d'or était des ARN G-quadruplex qui se forment dans les toutes premières étapes du cycle viral, au cours de l'initiation de la transcription inverse de l'ARN viral dans la cellule infectée.

Ce travail a donc permis de démontrer d'une part, l'importance / existence de structures G-quadruplex sur l'ARN du virus au cours de son infection et d'autre part, la possibilité de cibler ces éléments avec des petites molécules ouvrant ainsi la voie à de potentiels médicaments ayant un mécanisme d'action original par rapport à ce qui existe actuellement en thérapie antivirale.



Porphyrine d'or



Modélisation de l'interaction de la porphyrine sur un G-quadruplex. Les guanines sont en vert. (Jean-Luc Stigliani, LCC)

© Geneviève PRATVIEL / LCC Toulouse

#### Référence

Deciphering RNA G-quadruplex function during the early steps of HIV-1 infection

Samir Amrane, Chloé Jaubert, Amina Bedrat, Tiffany Rundstadler, Patricia Recordon-Pinson, Cindy Aknin, Aurore Guédin, Aurore De Rache, Laura Bartolucci, Ibra Diene, Frédéric Lemoine, Olivier Gascuel, Geneviève Pratiel, Jean-Louis Mergny, Marie-Line Andreola, *Nucleic Acids Res.* **2022**, <https://doi.org/10.1093/nar/gkac1030>

#### Collaborations

- ARNA Laboratory, MFP Laboratory, Université de Bordeaux, Bordeaux
- Institut Pasteur, Université de Paris, Institut de Systématique, Évolution, Biodiversité (ISYEB, UMR 7205) Paris
- Laboratoire d'Optique & Biosciences, Ecole Polytechnique, Palaiseau

#### Financements

ANRS Maladies Infectieuses Émergentes – Agence autonome de l'Inserm (ANRS AAP1-2015)

#### Équipe

Alzheimer, amyloïdes et chimie bio-inorganique

## Une nouvelle famille d'anti-inflammatoires

Mots-clés : Dendrimères, anti-inflammatoire, système immunitaire

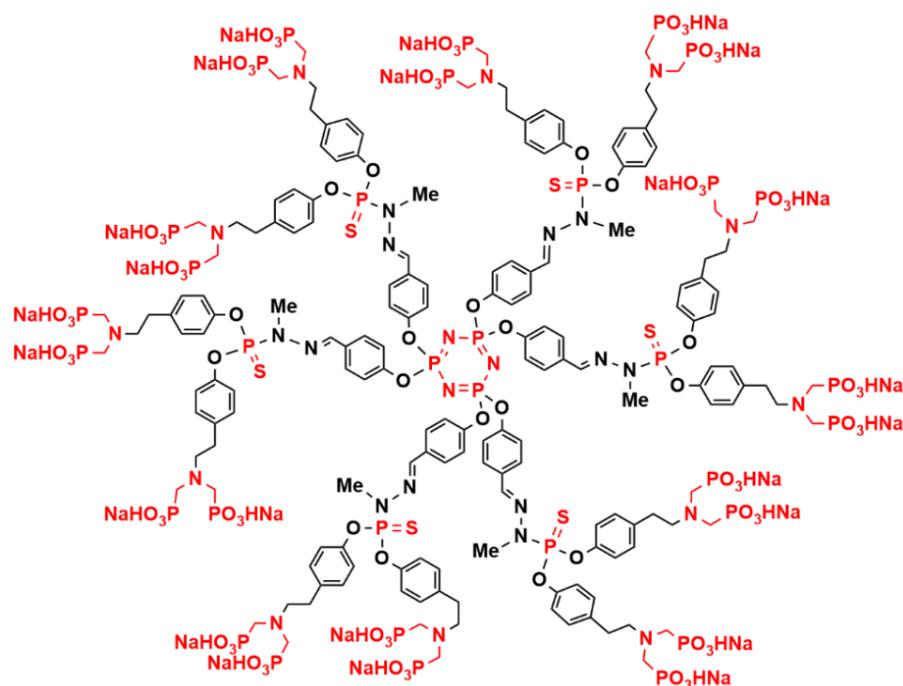
Dans cette revue, différents types de dendrimères phosphorés (macromolécules hyper-ramifiées), solubles dans l'eau, ont été synthétisés pour leurs nombreuses propriétés biologiques.

Particulièrement, un dendrimère fonctionnalisé par des azabisphosphonates en surface est capable de stimuler le système immunitaire humain *ex vivo*. Ce dendrimère est internalisé par les monocytes (un type de globules blancs) en quelques secondes et induit leur activation selon un processus anti-inflammatoire. La présence du dendrimère entraîne également l'inhibition de la différenciation des monocytes en ostéoclastes (cellules multinucléaires qui détruisent les os), ainsi que la prolifération des lymphocytes T CD4+ qui sont pro-inflammatoires.

Enfin, après 2 à 3 semaines de culture de cellules mononucléaires du sang périphérique (globules blancs), on observe une multiplication très importante du nombre de cellules *natural killer* capables de lutter contre différents types d'infections et de cancers.

Au vu de toutes ces propriétés, l'influence de ce dendrimère fonctionnalisé a été testée *in vivo* sur plusieurs modèles animaux, contre différentes maladies inflammatoires chroniques ou aiguës, telles que la sclérose en plaques, la polyarthrite rhumatoïde, l'uvéite, le psoriasis, mais aussi contre la leucémie myéloïde, qui est un cancer hématologique. L'innocuité a été démontrée chez la souris, car il n'y a pas d'agrégation plaquettaire, pas d'hémolyse et pas de perturbation de la formule hématologique. La sécurité du dendrimère azabisphosphonate a également été évaluée sur des primates non humains (singes) qui ont reçu des injections répétées, dans le cadre d'un test préclinique de réduction des risques. Les paramètres biochimiques, hématologiques et immunologiques du sang périphérique sont restés dans une plage physiologique normale tout au long de l'étude, et aucun effet secondaire notoire n'a été observé.

Une étude effectuée avec des dendrimères ayant les mêmes fonctions en surface mais une structure interne différente a montré l'importance de cette dernière.



© Anne-Marie CAMINADE / LCC Toulouse

### Référence

Safe Curing inflammatory diseases using phosphorous dendrimers. Caminade A.M., Turrin C.O., Poupot R. *WIREs Nanomedicine & Nanobiotechnology* **2022**, e1783, <https://doi.org/10.1002/wnan.1783>

### Collaborations

- Rémy Poupot (INFINITY, Toulouse),
- IMD-Pharma (co-fondée par Cédric-Olivier Turrin, Rémy Poupot, et Serge Calet) <http://www.imd-pharma.com/>

### Équipe

Dendrimères et hétérochimie



## Une voie originale de préparation de peptoïdes cycliques anti-bactériens

Mots-clés : Polymères cycliques, peptoïdes, antibactériens

Les polymères polypeptidiques synthétiques sont des molécules biocompatibles qui ont un large éventail d'applications. Certains ont démontré une activité antimicrobienne très efficace, y compris contre les bactéries résistantes aux antibiotiques. Le mécanisme d'action est lié à leurs propriétés physicochimiques, dont le caractère amphiphile confère la capacité de déstabiliser les membranes bactériennes. Ils sont sensibles à la dégradation par les protéases empêchant par exemple leur administration par voie orale. Cependant, des analogues N-alkylés de polypeptides synthétiques : les polypeptoïdes, présentent une résistance accrue à la protéolyse.

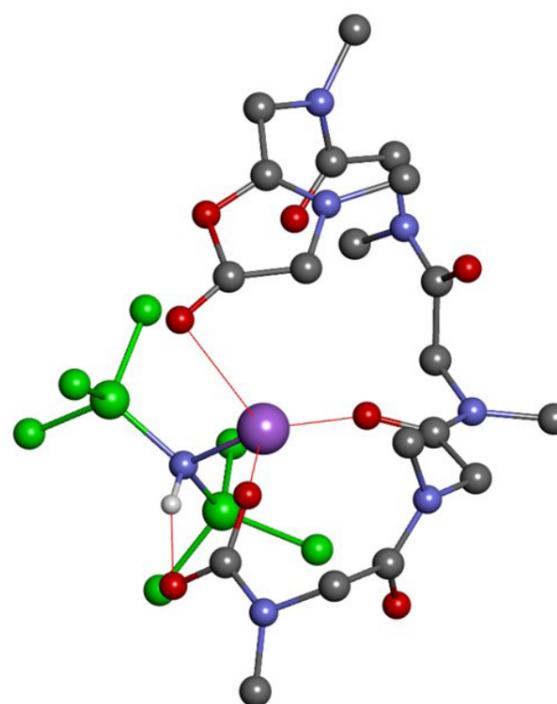
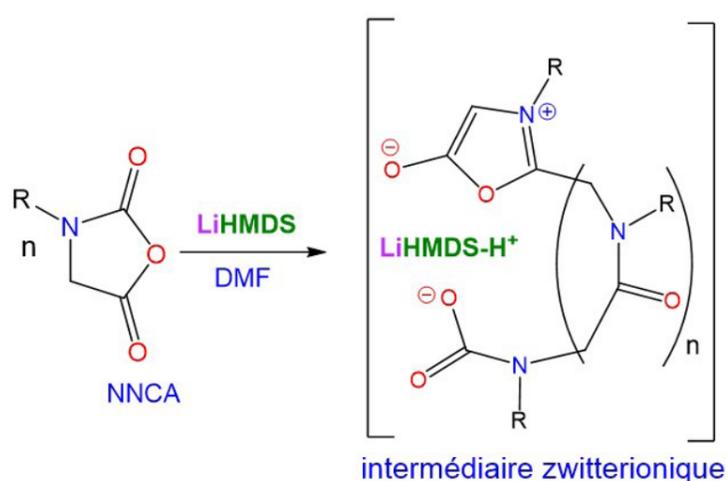
Ce travail présente une voie simple de synthèse de poly  $\alpha$ -peptoïdes à partir de N-alkyl-N-carboxyanhydrides (NNCA). L'originalité de la méthode tient dans le fait que la polymérisation est réalisée en milieu polaire, dans le diméthylformamide (DMF), en utilisant le bis(triméthylsilyl) amidure de lithium (LiHMDS) comme base forte.

Les polymères obtenus par cette méthode sont

de nature cyclique et non pas linéaires. Jusqu'à présent, la formation de peptoïdes cycliques de haut poids moléculaire n'était rendue possible que par l'emploi de solvants apolaires. La formation de peptoïdes cycliques dans des solvants très polaires tels que le DMF n'avait jamais été décrite.

Des calculs de DFT effectués sur un modèle intermédiaire zwitterionique ont montré que la forme cyclique est favorisée sur le plan énergétique par rapport à la forme linéaire. L'intermédiaire cyclique interagit avec le LiHMDS grâce à la formation de plusieurs liaisons stabilisantes (représentées par des traits rouges) entre le polymère et le cation  $\text{Li}^+$ . La petite taille de  $\text{Li}^+$  favorise le rapprochement de l'extrémité carboxyle anionique et du groupement dihydrooxazolium, qui conduira dans un deuxième temps à la fermeture du cycle.

Cette nouvelle méthode ouvre des perspectives pour la conception de macrocycles cationiques antibactériens.



© Jean-Luc STIGLIANI / LCC Toulouse

### Référence

Safe Cyclic Poly( $\alpha$ -peptoid)s by Lithium bis(trimethylsilyl)amide (LiHMDS)-Mediated Ring-Expansion Polymerization: Simple Access to Bioactive Backbones; P. Salas-Ambrosio, A. Tronnet, M. Since, S. Bourgeade-Delmas, J-L Stigliani, A. Vax, S. Lecommandoux, B. Dupuy, P. Verhaeghe, C. Bonduelle. *J.A.C.S.* **2021** 143 (10), 3697-3702.  
<https://doi.org/10.1021/jacs.0c13231>

### Collaborations

- Université Bordeaux, LCPO, UMR 5629, F-33600, Pessac, France

### Équipe

Chimie et biologie médicinales pour l'oncologie

## Lawsonie : transformation d'un pigment de tatouages en médicaments.

Mots-clés : Lawsonie, réactions multicomposantes, activités antiparasitaires

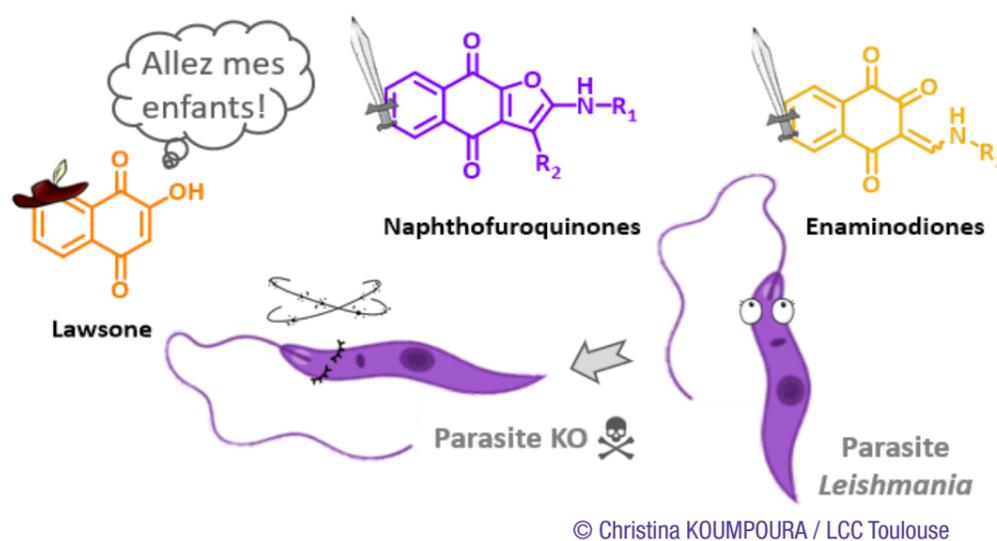
La lawsonie (2-hydroxy-1,4-naphthoquinone) est une naphthoquinone naturelle, connue comme un pigment rouge-orangé qui est utilisé depuis les temps anciens pour faire des tatouages. La famille de naphthoquinones et ses dérivés est très riche en molécules actives contre différents pathogènes. Par exemple l'atovaquone est un médicament majeur utilisé contre le paludisme.

Le paludisme et la leishmaniose sont deux maladies parasitaires très graves pour la santé humaine. Elles se répandent essentiellement dans les régions tropicales en Afrique et en Asie et se transmettent à l'Homme par des piqûres d'insectes infectés par le parasite *Plasmodium* (241 millions de cas, 627.000 décès en 2020) ou *Leishmania* (1.2 million de cas, 65.000 décès/an). Les traitements actuels ont souvent des effets secondaires et ils sont de moins en moins efficaces en raison des parasites de plus en plus résistants.

Dans notre équipe, chimistes et biologistes se sont intéressés à concevoir, synthétiser et tester

des composés basés sur le motif lawsonie. Dans ce cadre, nous décrivons la première synthèse d'une série de naphthofuroquinones en utilisant une réaction multi-composante par micro-ondes (approche chimie verte). Cela implique les trois partenaires : la lawsonie, un aldéhyde et un isocyanure. Suivant la réactivité intrinsèque de l'aldéhyde, nous obtenons des naphthofuroquinones ou des naphtho-énaminodiones jamais rapportées auparavant. Les structures de nos produits ont été confirmées par RMN bidimensionnelle et diffraction des rayons X.

Tous les composés ont été évalués contre *Plasmodium falciparum* et *Leishmania donovani*. Parmi les deux bibliothèques de molécules obtenues, les naphtho-énaminodiones présentent les meilleures activités contre les deux parasites. Ces activités ont été confortées par des études *in silico* sur deux cibles potentielles de la mitochondrie de *Plasmodium falciparum* et des travaux sont en cours pour élucider le mécanisme d'action contre *Leishmania donovani*.



### Référence

Design of Anti-infectious Agents from Lawsonie in a Three-Component Reaction with Aldehydes and Isocyanides. Christina L. Koumpoura, Michel Nguyen, Christian Bijani, Laure Vendier, Elena G. Salina, Silvia Buroni, Giulia Degiacomi, Sandrine Cojean, Philippe M. Loiseau, Françoise Benoit-Vical, Alfonso T. Garcia-Sosa, Anne Robert, Michel Baltas. *ACS Omega* **2022** 7 (40), 35635-35655. <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c03421>

### Collaborations

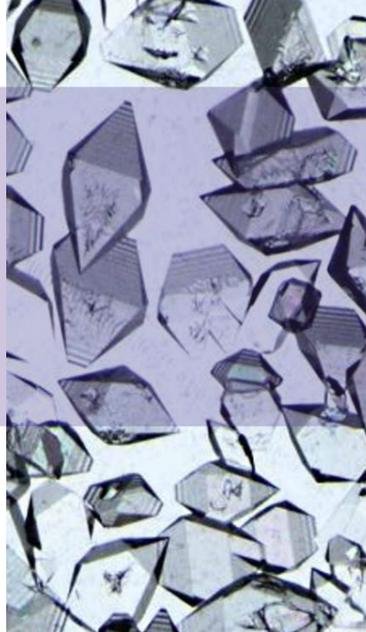
- Université Paris Saclay - Faculté de Pharmacie (France),
- Université de Tartu- Institut de Chimie (Estonie),
- Université de Pavia - Département de biologie et biotechnologie « L. Spallanzani » (Italie).

### Financements

Ces travaux ont été financés par le Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), l'Université Paul Sabatier, l'Institut National de la Santé et de la Recherche Médicale (Inserm) et la Fondation pour la Recherche Médicale, FRM « Équipe EQU202103012596 ».

### Équipe

Nouvelles molécules antipaludiques et approches pharmacologiques



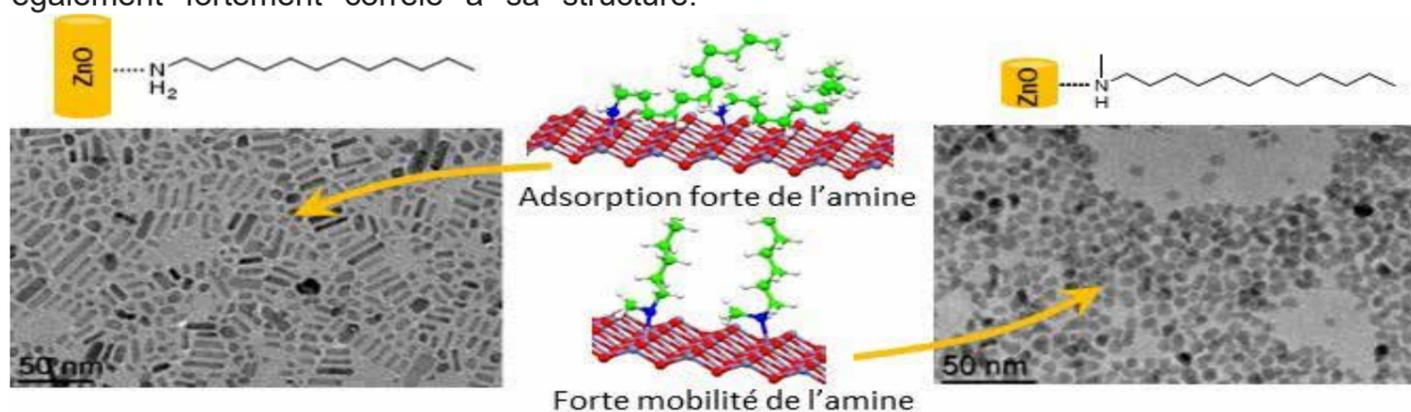
### III. Chimie et matériaux

## La force cachée des liaisons H faibles !

Mots-clés : Nanochimie, DFT, spectroscopie RMN

Les tensioactifs aminés jouent un rôle clé sur la croissance anisotrope contrôlée des nanoparticules de ZnO obtenues par hydrolyse organométallique dans des conditions douces. L'influence des substituants alkyles présents sur l'atome d'azote des amines est analysée à la fois sur le plan théorique par modélisation DFT et sur le plan expérimental par spectroscopie RMN multinucléaire ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  et  $^{17}\text{O}$ ). Dans les étapes initiales menant à la croissance de particules colloïdales de ZnO, la nature des espèces moléculaires qui sont impliquées dans la solution dépend fortement de la structure du tensioactif aminé. En utilisant des amines primaires, secondaires ou tertiaires, nous obtenons respectivement des adduits stables entre l'amine et le zinc formant des oligomères, des adduits faibles qui n'oligomérisent pas, ou des adduits très faibles. Ensuite, lors du suivi de la réaction, nous avons montré que sur les surfaces des nanocristaux de ZnO en croissance le comportement dynamique de l'amine est également fortement corrélé à sa structure.

Nous avons identifié qu'en présence d'amines tertiaires, secondaires ou primaires, soit aucune adsorption significative de  $[\text{Zn}\dots\text{N}]$ , soit une adsorption de surface avec une mobilité de surface notable, soit une adsorption très forte se met en place, respectivement. Ce comportement dynamique de surface joue un rôle prédominant dans la croissance des nanocristaux et l'orientation de la morphologie finale des nanocristaux de ZnO. En formant des liaisons hydrogène à la surface des nanoparticules pendant le processus de croissance, les amines primaires conduisent spécifiquement à la formation de nanobatonnets. Inversement, des nanoparticules et des agrégats isotropes sont obtenus lorsque des amines secondaires et tertiaires sont utilisées, respectivement. Ces résultats mettent en lumière le rôle des interactions faibles en surface, ici les liaisons H, qui régissent la croissance des nano-objets, et qui sont donc cruciales à identifier, étudier et contrôler.



© Myrtil Kahn / LCC Toulouse

#### Référence

Anisotropic Growth of ZnO Nanoparticles Driven by the Structure of Amine Surfactants: The Surface Dynamic on Nanocrystal Rules, Yiping Whang, Zhihua Zhao, Yannick Coppel, Christine Lepetit, Christophe Mingotaud, and Myrtil L. Kahn, *Nanoscale Advances* **2021**, 3, 6088 – 6099, <https://doi.org/10.1039/D1NA00566A>

#### Collaborations

Laboratoire des interactions moléculaires et réactivités chimiques et photochimiques IMRCP, Toulouse

#### Financements

CNRS, CSC (Chinese Science Council).

#### Équipe

Nanochimie, organisation et capteurs

## Efficacité spectaculaire de modifications post-synthétiques sur des complexes de fer II à transition de spin : rôle du solvant

Mots-clés : Complexes à transition de spin, modification post-synthétique, effet du solvant

Certains complexes de métaux de transition peuvent exister sous deux états stables : l'état bas spin (BS) et l'état haut spin (HS). La transition de spin (TS), qui correspond au passage réversible d'un état à l'autre, peut être déclenchée par l'action d'un stimulus externe comme une irradiation lumineuse ou un changement de température. Du fait de cette commutation qui génère des propriétés physiques bien distinctes, ces matériaux pourraient trouver des applications notamment en électronique, en optique et dans les actionneurs mécaniques. Les nombreux atouts du complexe  $[\text{Fe}(\text{NH}_2\text{trz})_3](\text{NO}_3)_2$ , notamment sa bistabilité proche de la température ambiante, font que ce composé à TS est un excellent candidat pour son utilisation dans des dispositifs. Dans l'objectif d'obtenir un composé répondant encore mieux aux conditions recherchées pour une application, nous avons souhaité synthétiser rapidement une diversité de dérivés de ce complexe. Des résultats récents montrent que ces nouveaux composés ont pu être obtenus efficacement grâce à une méthode de modification post-synthétique (PSM). Une méthode PSM consiste à modifier les fonctions organiques d'un matériau, à l'état solide et préalablement formé.

Cette méthode a notamment l'avantage de permettre

1) la formation d'une famille de molécules à

partir d'un même composé parent ;

2) l'obtention de matériaux non accessibles par d'autres méthodes ;

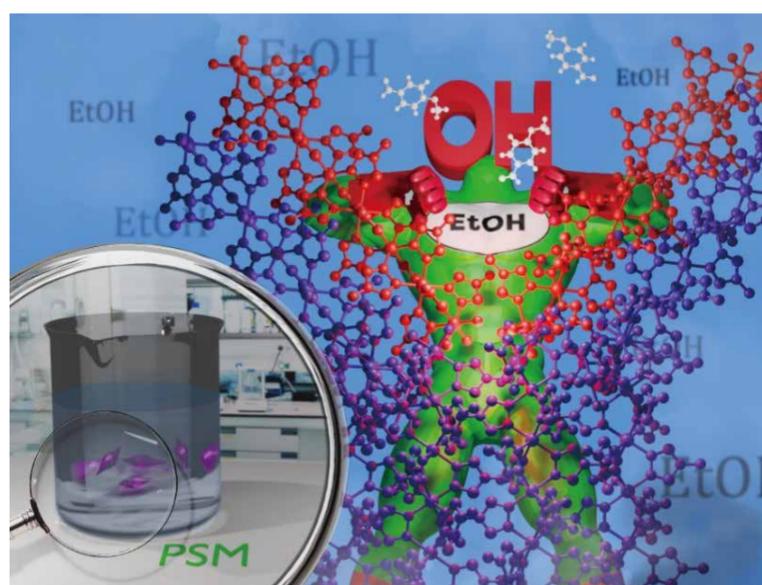
3) de conserver les caractéristiques structurales du matériau parent.

Le fait d'obtenir une modification complète des fonctions amines sur le complexe à TS suscite cette interrogation : comment est-il possible de réaliser une réaction PSM sur un composé dont l'arrangement moléculaire est compact et présente une faible porosité. A noter que le composé à TS est un polymère de coordination 1D, mais les nombreuses interactions de type liaisons hydrogènes entre les chaînes polymériques créent un pseudo matériau 3D. Nous avons pu démontrer que le solvant de la réaction joue un rôle central dans le succès de cette méthode de synthèse. En fait, l'éthanol interagit par interaction de type liaison hydrogène avec le composé ce qui conduit à la séparation des chaînes polymériques. Ainsi l'aldéhyde peut rentrer en contact avec les fonctions  $\text{NH}_2$  présentes sur le complexe et conduire à la formation de l'imine.

Ces résultats montrent sans ambiguïté que :

1) le solvant peut modifier de façon importante l'arrangement moléculaire d'un composé insoluble ;

2) la méthode PSM ne se limite pas aux matériaux présentant une forte porosité.



© Santiago PIEDRAHITA-BELLO / LCC Toulouse

### Référence

Post-synthetic modification mechanism for 1D spin crossover coordination polymers, Enríquez-Cabrera A., Getzner L., Salmon L., Routaboul L., Bousseksou A. *New J. Chem.* **2022**, 46, 22004-22012, <https://doi.org/10.1039/D2NJ04015H>

### Financements

- ANR NAGAM (ANR-19-CE09-0008-01),
- CONACyT pour la bourse post-doctorale (Enríquez-Cabrera A),
- Bourse de stage (Getzner L.) Erasmus Scholarship No. 1304753.

### Équipe

Matériaux moléculaires commutables

## Photolibération de monoxyde d'azote (NO) sous irradiation à deux photons de complexes bimétalliques de ruthénium à ligand nitrosyle

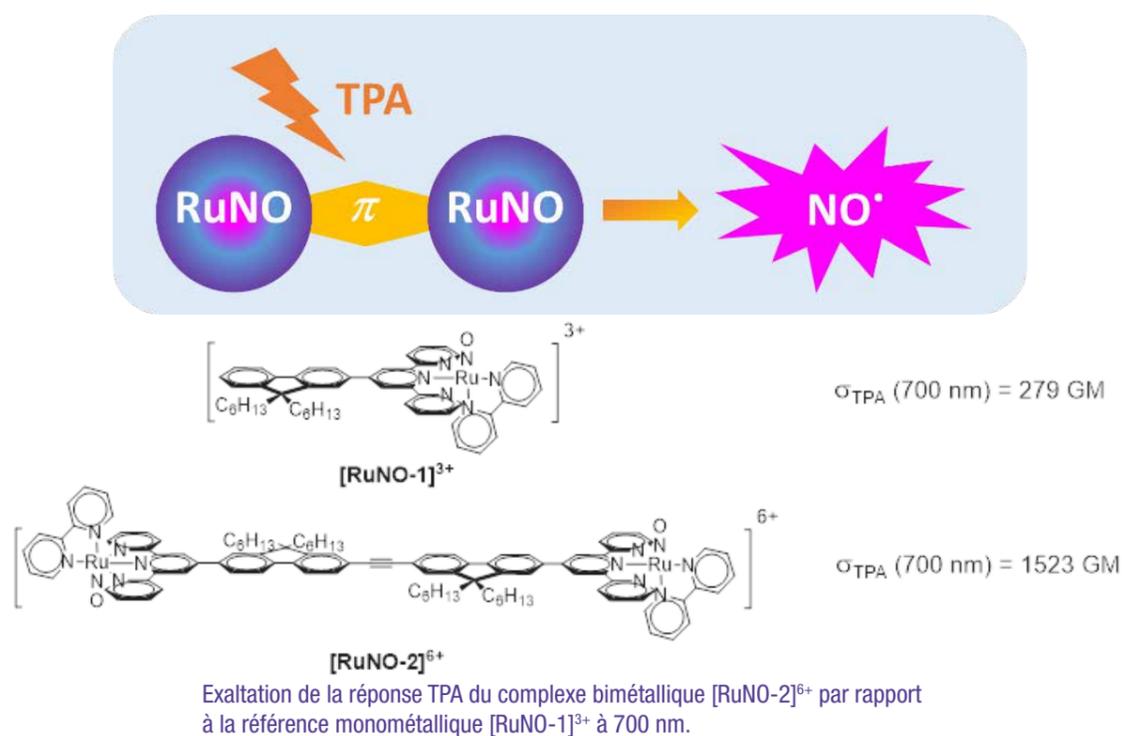
Mots-clés : Complexes bimétalliques de ruthénium à ligand nitrosyle photoréactifs, libération d'agents thérapeutiques, absorption à deux photons

La découverte de l'importance du monoxyde d'azote (NO<sup>•</sup>) en milieu biologique est à l'origine de l'attribution du prix Nobel de médecine en 1998. Depuis cette date, les systèmes donneurs de NO<sup>•</sup> sont activement recherchés, en particulier ceux qui permettent de libérer NO<sup>•</sup> sous irradiation lumineuse, en raison du caractère non invasif de la lumière. Les plus prometteurs sont les complexes de ruthénium à ligand nitrosyle (RuNO) pour lesquels la longueur d'onde ( $\lambda$ ) est comprise entre 300 et 500 nm. Comme les tissus biologiques absorbent dans cette gamme de longueur d'onde, le défi consiste à utiliser l'absorption « à deux photons » (TPA), où un photon émis à  $\lambda = 300\text{--}500$  nm peut être remplacé par deux photons émis à  $\lambda/2$ , dans un domaine où les tissus biologiques sont relativement transparents. Au niveau moléculaire, la TPA est quantifiée par la section efficace ( $\sigma_{\text{TPA}}$ ) exprimée en Goeppert-Mayer (GM).

Les premiers RuNO obtenus dans l'équipe ont été des systèmes donneurs-accepteurs (dipolaires) dans lesquels un fragment fluorène

riche en électrons est relié au nitrosyle accepteur d'électron, par délocalisation électronique. Le complexe [RuNO-1]<sup>3+</sup> représenté ci-dessous illustre cette approche : il possède une valeur de  $\sigma_{\text{TPA}}$  de 279 GM à 700 nm. Diverses modifications structurales obtenues dans l'équipe conduisent au mieux à doubler la valeur de  $\sigma_{\text{TPA}}$ , ce qui demeure insuffisant pour accéder à des systèmes applicables. Une avancée significative a été obtenue en 2022 en remplaçant la structure électronique dipolaire par une structure bimétallique quadripolaire (centro-symétrique).

Ainsi, le complexe [RuNO-2]<sup>6+</sup> présente une valeur de  $\sigma_{\text{TPA}}$  de 1523 GM à 700 nm, soit plus de 5 fois supérieure à sa référence monométallique. Cet exemple illustre parfaitement qu'un système bimétallique ne doit pas être regardé comme la simple superposition de deux complexes monométalliques accolés. Ces structures, plus sophistiquées que les espèces dipolaires de première génération, représentent une percée significative dans la recherche de donneurs de NO efficaces à deux photons.



### Référence

Bimetallic Ruthenium Nitrosyl Complexes with Enhanced Two-Photon Absorption Properties for Nitric Oxide Delivery, Y. Juárez-Martínez, P. Labra-Vázquez, A. Enríquez-Cabrera, A. F. Leon-Rojas, D. Martínez-Bourget, P. G. Lacroix, M. Tassé, S. Mallet-Ladeira, N. Farfán, R. Santillan, G. Ramos-Ortiz, J.-P. Malval, I. Malfant, *Chem. Eur. J.* **2022**, 28, e202201692 (1-14).

### Collaborations

N. Farfán (UNAM, Mexico), G. Ramos (CIO, León), J.P. Malval (Mulhouse).

### Financements

CNRS (France), Université Paul Sabatier (COMUE) et Région Midi-Pyrénées, CONACyT (Mexique), LIA-LCMMC (France-Mexique), IRP-CMMC (France-Mexique).

### Équipe

Molécules et composites pour l'optique

## Fonctionnalisation et sorption d'une architecture supramoléculaire microporeuse

Mots-clés : Matériau moléculaire microporeux, chimie supramoléculaire

Les solides microporeux formés de molécules associées par des liaisons hydrogène (liaison-H) sont une classe de matériaux moléculaires d'intérêt croissant. Des propriétés typiques des solides poreux, comme la porosité permanente, l'adsorption sélective et la séquestration d'adsorbats ou encore la détection, ont été obtenues pour de telles architectures supramoléculaires.

L'approche suivie par l'équipe pour élaborer de tels matériaux implique des complexes de coordination chargés négativement, typiquement des complexes métal-oxalate, et des cations organiques de type pyridinium. Les premiers jouent le rôle d'accepteurs de liaisons H et les seconds de donneurs de liaisons H. Les liaisons-H ioniques qui en résultent sont plus fortes que les liaisons-H classiques. Cette particularité, qui fait l'originalité de notre approche, a permis d'accéder à une série inédite de structures poreuses iso-structurales nommées

SPA-1(R), dont les canaux sont décorés par des groupes R polaires, apolaires ou un mélange des deux (voir figure). Ces modifications ont permis d'ajuster les caractéristiques de sorption des solides formés en conservant des porosités très proches. A titre d'illustration, pour R = CH<sub>3</sub>, des adsorptions rapides de dioxyde de carbone ou d'iode sont obtenues alors qu'elles sont bien moins efficaces (voire inexistantes) lorsque R = OH. Cependant ce dernier groupe est idéal pour une adsorption rapide d'eau aux faibles valeurs de vapeurs saturantes et pour séquestrer son adsorbat plus fortement.

Ces résultats exceptionnels dans le domaine des architectures supramoléculaires poreuses sont liés à la robustesse des synthons d'association intervenant dans la formation de SPA-1(R), qui imposent une structure identique pour chaque SPA-1(R) indépendamment du groupe R porté par le cation.

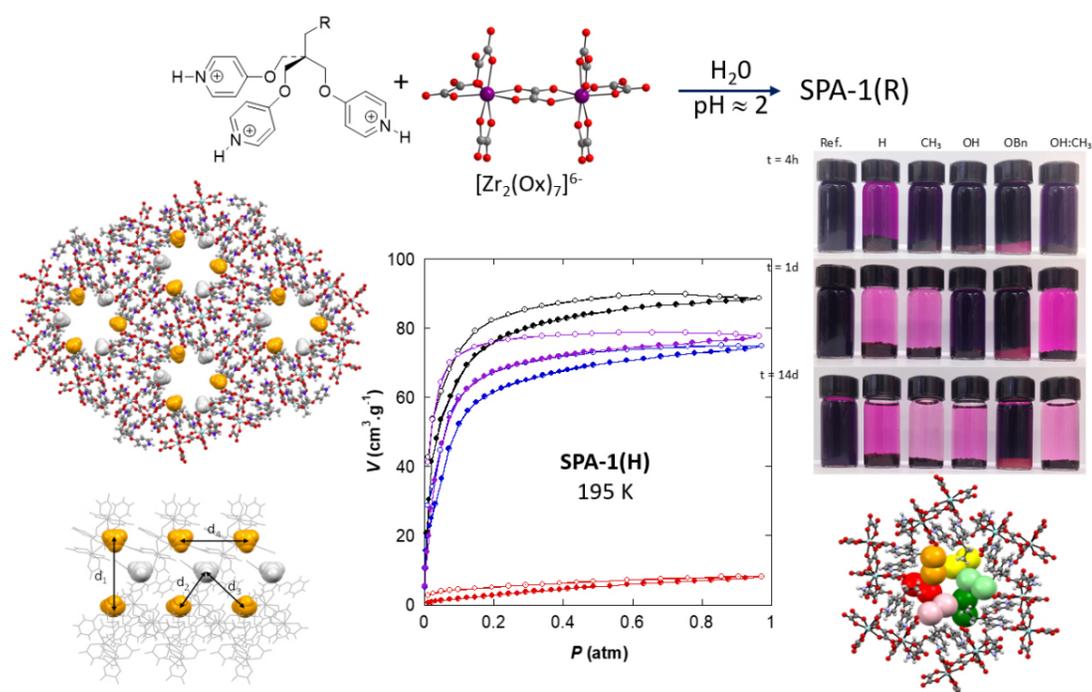


Figure. (haut) Donneur de liaisons-H porteur du groupe R (H, CH<sub>3</sub>, OH, ou OCH<sub>2</sub>Ph), et accepteur de liaisons-H impliqués dans la formation de SPA-1(R), avec la structure cristallographique de SPA-1(CH<sub>3</sub>); (bas) absorption d'I<sub>2</sub> (depuis des solutions de diiode dans l'hexane) par SPA-1(R) (solide) en fonction du groupe R (photos réalisées après 4h, 1 et 14 jours; le flacon le plus à gauche ne contient que la solution de diiode) et structure de SPA-1(CH<sub>3</sub>) après adsorption de I<sub>2</sub> (les molécules de I<sub>2</sub> sont représentées en couleurs différentes).  
©Sutter Jean-Pascal & Roques Nans/LCC Toulouse

### Référence

Modulation of the Sorption Characteristics for an H-bonded porous Architecture by Varying the Chemical Functionalization of the Channel Walls. Roques, N.; Tovar-Molle, A.; Duhayon, C.; Brandès, S.; Spieß, A.; Janiak, C.; Sutter, J.-P. *Chem. Eur. J.* **2022**, e202201935.  
<https://doi.org/10.1002/chem.202201935>

### Collaborations

- Dr. S. Brandès, Institut de Chimie Moléculaire de l'Université de Bourgogne (Dijon)  
- A. Spieß et Professeur Dr. C. Janiak, Institut für Nanoporöse und Nanoskalierte Materialien (Dusseldörf, Allemagne).

### Équipe

Matériaux moléculaires et supramoléculaires

## Etudes DRX sous pression : comment mieux comprendre les relations structure-propriété des matériaux ?

Mots-clés : Matériaux à transition de spin, haute pression, diffraction des rayons X

Tout comme la température, la pression est l'un des paramètres thermodynamiques qui influence de manière significative les propriétés des matériaux. Cependant, son effet sur les réactions chimiques, les propriétés des matériaux et leur structure électronique reste jusqu'à présent relativement mal compris, en raison du manque de données expérimentales. Ce manque d'informations sur les hautes pressions (HP), comparé à la grande quantité de données sur les basses et hautes températures, est dû aux exigences techniques HP. Les expériences sous haute pression pourraient être menées dans des cellules solides capables de résister à des conditions extrêmes, mais gênant l'accès à l'échantillon.

La conception des cellules à enclume de diamant (CED) a rendu possible le développement des HP comme outil puissant pour les études spectroscopiques et de diffraction des rayons X, et permettent de comprimer des matériaux à des pressions jusqu'à plusieurs centaines de GPa.

Grâce au projet Nanomat PRRI financé par la région, le LCC s'est récemment enrichi d'un nouveau diffractomètre monocristal doté d'une double micro-source Cu/Mo, d'un détecteur nouvelle génération à pixels hybrides, et équipé

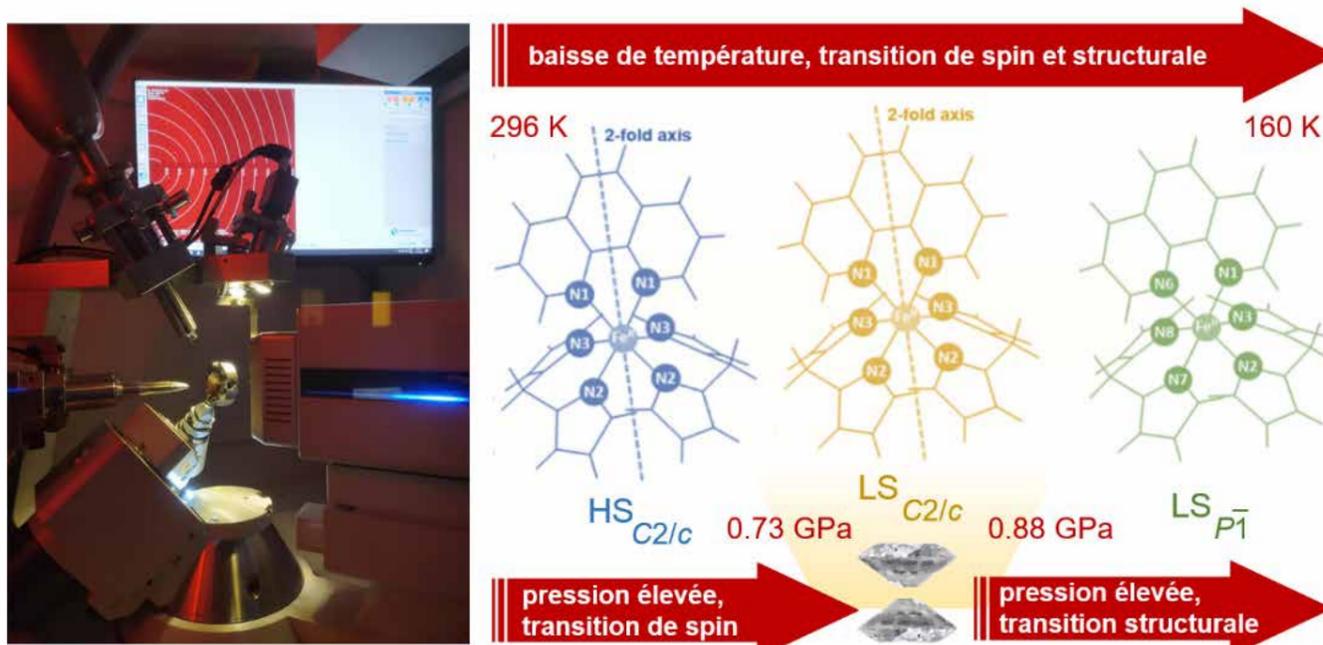
d'une CED à grande angle d'ouverture (120°) permettant la détermination de structures cristallines de basse symétrie, ce qui est extrêmement rare en laboratoire.

Les premières études structurales réalisées sous pression nous ont permis d'élucider le mécanisme de couplage entre la transition de spin et une transition structurale, s'accompagnant d'un changement de symétrie, dans le complexe moléculaire  $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{B}(\text{pz})_2)_2(\text{phen})]$ .

Notre analyse structurale a révélé que le couplage entre les deux phénomènes peut être contrôlé par le stimulus externe. Notamment sous pression, la transition de spin peut être séparée du phénomène de transition structurale, ce qui ne peut pas être détecté à basse température.

Cette étude structurale complète confirme que l'utilisation des hautes pressions favorise le développement de nouveaux matériaux et apporte une meilleure compréhension de leurs relations structure-propriété.

Les études sous pression en diffraction X sur monocristal sont ouvertes à l'ensemble du laboratoire, mais également aux chercheurs extérieurs et à ceux du secteur privé.



© Isabelle Malfant / LCC Toulouse

### Référence

Pressure Tuning of Coupled Structural and Spin State Transitions in the Molecular Complex  $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{B}(\text{pz})_2)_2(\text{phen})]$ , Paliwoda D., Vendier L., Nicolazzi W., Molnar G., Bousseksou A., *Inorg. Chem.* **2022**, 61, 40, 15991–16002.

### Financements

Projet PRRI NANOMAT, 'E-MOTION' ERC Advanced Grant

### Équipe

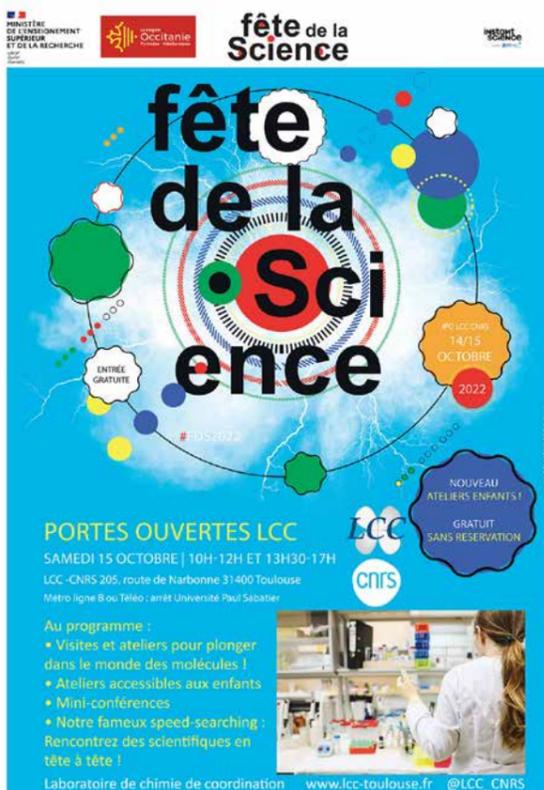
Service DRX / Equipe Matériaux Moléculaires Commutables

# La culture scientifique en action : les moments clés



## Portes ouvertes pour la fête de la science 2022

La Fête de la Science au LCC a été un véritable succès cette année. La distribution de nombreux flyers et affiches a permis de promouvoir l'événement, ce qui a attiré environ 250 visiteurs pour nos portes ouvertes les 14 et 15 octobre. Les participants ont été très satisfaits de leur expérience, passant en moyenne plus d'une heure et demie au laboratoire.



Il y avait une variété d'ateliers pour enfants, ainsi que des démonstrations et des conférences pour les personnes de tous âges. Les sujets abordés allaient de la découverte des propriétés de l'azote liquide ou de la compréhension de l'effet de serre à des présentations passionnantes sur les dernières recherches et découvertes dans des domaines aussi variés que la chimie verte ou des traitements de la maladie d'Alzheimer.

En somme, la Fête de la Science au LCC a été une belle réussite, offrant aux visiteurs de tous âges l'occasion de découvrir les sciences de manière ludique et interactive. Le comité d'organisation riche de 30 personnes est déjà en train de planifier l'événement de l'année prochaine et espère attirer encore plus de visiteurs !



## Nuit des chercheurs

La Nuit des Chercheurs a vu la participation enthousiaste des équipes du LCC. Les scientifiques ont partagé leur passion avec le public lors d'une soirée originale, en discutant avec eux lors de sessions de "speed-searching".

## Podcast : "La chimie se met au vert"

Un podcast intitulé "Les deux font la paire" a été enregistré à l'occasion de la Nuit des Chercheurs 2022 (coproduit par Exploreur et Campus FM). La série "Les deux font la paire" met en scène des associations inattendues, comme un scientifique et un objet courant. Dominique Agustin, enseignant-chercheur au LCC à l'antenne de l'Université Toulouse III - Paul Sabatier à Castres, a choisi un sablier contenant du sable vert pour illustrer comment les procédés chimiques peuvent être plus respectueux de l'environnement.



# Les événements du LCC

Nous vous invitons à découvrir quelques faits marquants à noter au sein du laboratoire, tels que l'obtention de distinctions, le démarrage de projets, ou la parution d'ouvrages de référence.



*Signature d'une convention d'échange entre le LCC, l'UPS et l'INSAT, Université de Carthage, Tunisie*

Le 30 juin 2022, Dr. A. BOUSSEKSOU, directeur du LCC, Prof. J-M Broto, président de l'université Toulouse III Paul Sabatier, Prof. S. HAMZA, directeur de l'institut national des sciences appliquées et de technologie (INSAT-Tunisie) et Prof. N. Mzoughi Aguir, présidente de l'université de Carthage, Tunisie ont signé à Toulouse un protocole d'accord. Cette convention vise en particulier à promouvoir l'accueil au LCC d'élèves ingénieurs de l'INSAT en projet de fin d'études (PFE) pour une poursuite éventuelle en doctorat.



*Christelle Hureau-Sabater reçoit le Prix Fédération Gay Lussac-Académie des sciences pour la chimie au coeur des enjeux de la société.*

Christelle Hureau-Sabater s'est illustrée en chimie bio-inorganique en lien avec des pathologies amyloïdes. Elle a notamment démontré l'importance des ions cuivre et zinc dans les processus de stress oxydant et d'auto-assemblage peptidique liés à Alzheimer. Elle partage avec enthousiasme la science au travers de nombreuses actions (conférences grand public, théâtre scientifique, expérimentations pour le jeune public)



*Parution de l'ouvrage "Chimique, vous osez dire chimique ?" de Bernard Meunier chez CNRS Editions*

La chimie est devenue l'objet de toutes les craintes. Au « chimique » on oppose le « naturel » vers lequel il faudrait revenir. Comment aborder ce sujet avec un peu de raison ? Avec cet ouvrage, Bernard Meunier, directeur de recherche CNRS émérite au LCC et membre de l'Académie des sciences, a pour ambition de remettre à sa juste place la fonction de la chimie dans notre vie quotidienne, en considérant ce qu'il faut garder, limiter ou éliminer.



*Anne-Marie Caminade reçoit le Grand Prix Achille le Bel de la Société chimique de France*

Anne-Marie Caminade est directrice de recherche classe exceptionnelle et directrice adjointe du LCC. Ce prix reconnaît son travail exceptionnel dans le domaine des dendrimères.

Anne-Marie Caminade est à l'origine des dendrimères phosphorés, sur lesquels elle a su développer dans un premier temps une recherche fondamentale très importante et de qualité pour ensuite montrer l'étendue très large des applications de ces espèces dans des domaines aussi variés que la catalyse (métallique ou organique), la science des matériaux et la biologie/nanomédecine. Elle entretient pour cela de nombreuses collaborations nationales et internationales.

Sa production scientifique est remarquable comme en atteste les nombreuses distinctions reçues par Anne-Marie Caminade au cours de l'année 2022. Citons par exemple le Prix Victor Grignard – Georg Wittig de la GDCh, son élection à l'Académie Européenne des Sciences ainsi que le Prix André Collet 2022 de chimie supramoléculaire. Félicitations !

# Lexique

---

## Dendrimère

Un dendrimère est une macromolécule constituée de monomères qui s'associent selon un processus arborescent autour d'un cœur central plurifonctionnel, via un procédé de synthèse itératif.

## DFT

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT, acronyme pour Density Functional Theory) est une méthode de modélisation de la mécanique quantique permettant l'étude de la structure électronique, en principe de manière exacte. La DFT est l'une des méthodes les plus populaires et les plus polyvalentes disponibles en physique de la matière condensée ainsi qu'en chimie quantique en raison de son application possible à des systèmes de tailles très variées, allant de quelques atomes à plusieurs centaines.

## G-quadruplex

Un G-quadruplex (G4) est une structure secondaire à quatre brins qui est une conformation inhabituelle des acides nucléiques (ADN ou ARN) adoptée par des séquences riches en guanines.

## Hétéroleptique (complexe)

Un composé chimique de métal de transition ou du groupe principal est dit hétéroleptique lorsqu'il contient plusieurs types de ligand. Dans le cas contraire, c'est-à-dire s'il ne contient qu'un seul type de ligand, on dit que le composé est homoleptique.

## Lawsonie

La lawsonie (2-hydroxy-1,4-naphtoquinone), également connue sous le nom d'acide hennotannique, est un colorant rouge-orange présent dans les feuilles de la plante de henné (*Lawsonia inermis*).

## Métalloporphyrine

Une métalloporphyrine est une grosse molécule dont la structure cyclique inclut un atome de métal. Son rôle, primordial dans les processus biologiques, dépend principalement de la nature du métal qu'elle contient.

## Naphtoquinone

La naphtoquinone, ou 1,4-naphtoquinone, est une quinone dérivant du naphtalène dont de nombreux dérivés sont pharmacologiquement actifs.

## PPM

L'acronyme « ppm » signifie « partie par million ». Il s'agit d'une unité de mesure communément utilisée en sciences, notamment en toxicologie, formulation, chimie, métallurgie, etc. La ppm correspond à la fraction valant  $10^{-6}$ , c'est-à-dire un millionième.

## Spillover

Activation de  $H_2$  sur des nanoparticules métalliques conduisant à la formation d'espèces H.

## Spin

Caractéristique quantique des particules liée à leurs propriétés de rotation ne pouvant prendre que des valeurs entières ou demi-entières.

## TON : Turnover number

Le TON ou « turnover number » représente le nombre d'échanges ou le nombre de rotations du catalyseur.

## Zwitterionique

Qui concerne les zwitterions, composés neutres possédant en nombre égal des charges électriques formelles d'une unité et de signes opposés. L'usage de ce terme est généralement restreint aux composés portant des charges sur des atomes qui ne sont pas adjacents.

*Étymologie : De l'allemand Zwitter, "hermaphrodite" ; l'expression "ion hermaphrodite" a d'ailleurs été anciennement utilisée pour désigner ce type de composé.*

## Highlights 2022

---

Laboratoire de chimie de coordination  
205 route de Narbonne, Toulouse  
<https://www.lcc-toulouse.fr/>  
@LCC\_CNRS

---

### Directeur de la publication

Azzedine Bousseksou

### Comité éditorial et rédaction

Stéphanie Bastin  
Emilie Delahaye  
Céline Deraeve  
Lucie Paloque  
Lucie Routaboul  
Martine Urrutigoity

### Conception graphique

Laure Vayssettes

### Coordination de la publication

Evelyne Prévots

### Remerciements

Merci à l'ensemble du personnel du laboratoire qui a contribué à la réalisation de cette brochure

---

### Photo de couverture

Filtration à l'air d'un mélange réactionnel sur plaque en verre fritté.

© Frédéric MALIGNE / LCC / CNRS Photothèque

### Photo de chimie et catalyse

Autoclave pour réaliser des réactions sous pression de gaz jusqu'à 100 bars.

© Frédéric MALIGNE / LCC / CNRS Photothèque

### Photo de chimie et santé

Pesée de précision d'un produit entrant dans la chimiothèque nationale du CNRS.

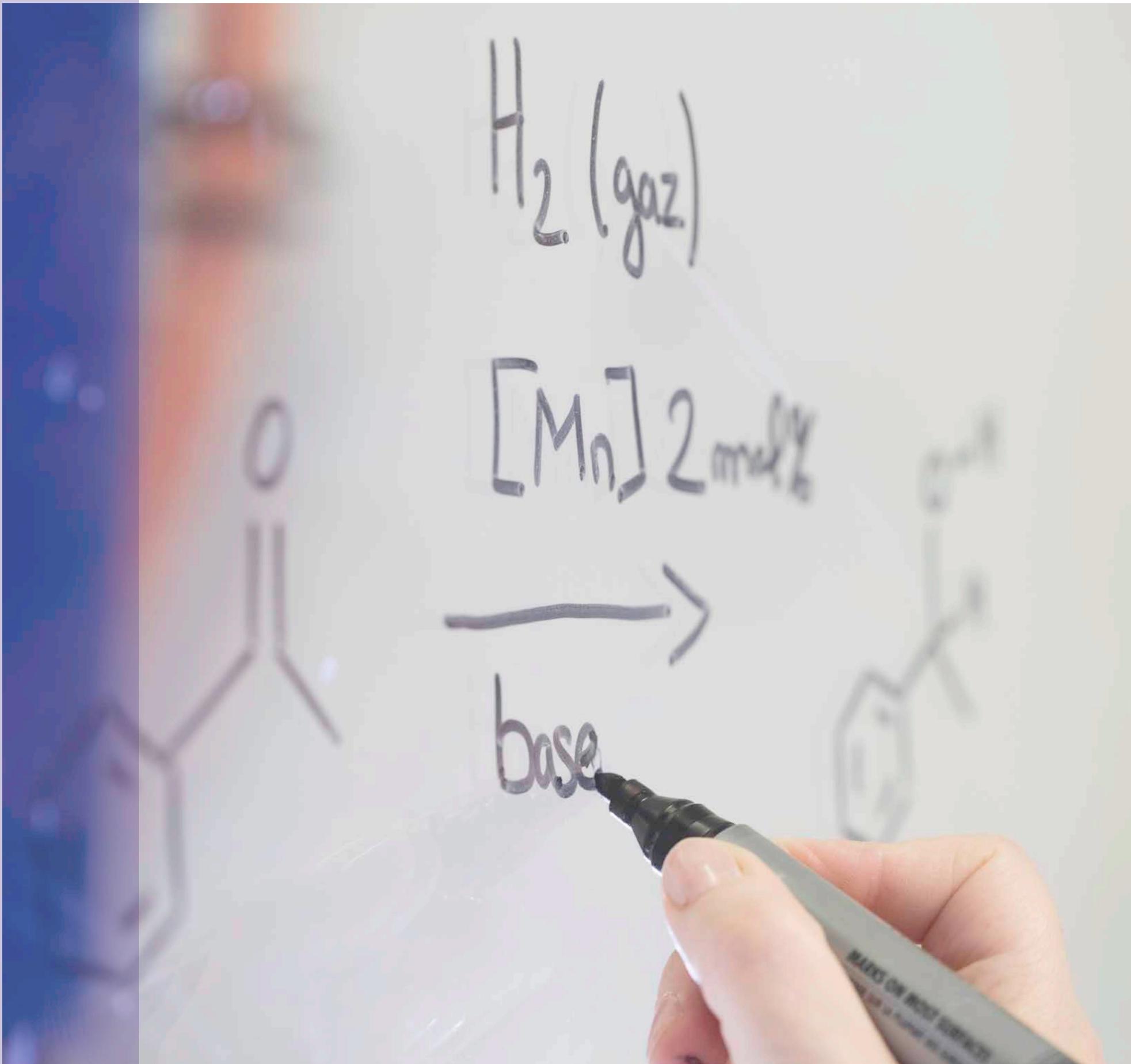
© Frédéric MALIGNE / LCC / CNRS Photothèque

### Photo de chimie et matériaux

Photographie de cristaux de matériaux moléculaires.

© Jean Pascal SUTTER / LCC Toulouse





## Highlights 2022

Laboratoire de chimie de coordination  
205 route de Narbonne  
31077 Toulouse cedex 4  
<https://www.lcc-toulouse.fr/>  
🐦 @LCC\_CNRS

