

## Prix et distinctions

### Médaille de cristal du CNRS 2023

La médaille de cristal distingue des femmes et des hommes, personnels d'appui à la recherche, qui par leur créativité, leur maîtrise technique et leur sens de l'innovation, contribuent aux côtés des chercheurs et des chercheuses à l'avancée des savoirs et à l'excellence de la recherche française. Chimie, génie des procédés et matériaux sont ainsi mis en lumière :



© Ruben Checa.

#### • Chantal Lorentz

Entrée au CNRS en 1994 comme technicienne, Chantal Lorentz exerce désormais comme ingénieure de recherche à l'Ircelyon (CNRS/Université Claude Bernard Lyon 1).

Après l'obtention de son diplôme d'ingénieure du CNAM en 2011, elle a gravi de nombreuses marches, tant administratives que techniques et scientifiques jusqu'à devenir responsable de la plateforme de caractérisation des matériaux catalytiques Ircatech. Co-auteurice d'une soixantaine d'articles scientifiques, elle a également contribué à des développements technologiques d'envergure. Elle a adapté différentes techniques analytiques pour la caractérisation de catalyseurs par résonance magnétique nucléaire permettant de comprendre et d'optimiser des procédés chimiques. Elle a également contribué au développement d'une technique séparative innovante permettant d'étudier des milieux chimiques complexes constitués de plusieurs centaines de molécules. En tant que membre du comité de direction de son laboratoire, Chantal Lorentz assure le suivi de l'ensemble des personnels de support à la recherche.



© Institut Jean Lamour.

#### • Jonathan Martens

Technicien en instrumentation, expérimentation et mesure, membre de l'équipe Procédé, d'élaboration, Jonathan Martens a rejoint en 2019 la chaire industrielle Métal liquide de l'Institut Jean Lamour (CNRS/Université de

Lorraine). Son activité porte sur le développement d'un four de fusion original dédié à l'étude des alliages métalliques à très hautes températures, comme par exemple les aciers ou les superalliages. L'objectif : maintenir une faible quantité de métal en lévitation grâce à l'émission d'ondes acoustiques, tout en assurant la chauffe et la fusion de l'échantillon par un laser. Dans ce cadre, Jonathan Martens a pris en charge le développement du système de lévitation, une activité sur laquelle aucun résultat n'avait été identifié dans la littérature auparavant. Ses nombreux développements ont permis au four de faire léviter des échantillons de tous types de métal et d'atteindre des températures supérieures à 1 500 °C. Cette première mondiale, concernant ce type de dispositif, a donné lieu à deux dépôts de brevet depuis fin 2022.



© Laurent Fleuchot.

#### • Gautier Schrodj

Entré en CNRS en 2001 en tant qu'assistant ingénieur, Gautier Schrodj est devenu en 2008 responsable de la plateforme Analyses mécaniques thermomécaniques et rhéologiques

de l'Institut de science des matériaux de Mulhouse (IS2M, CNRS/Université de Haute-Alsace). Il soutient alors de nombreux projets académiques et industriels. En vingt ans de carrière, il a acquis une expertise technique et scientifique unique de haut niveau en caractérisation des matériaux. Son savoir-faire en analyses mécanique, dynamique et thermique, en particulier, est largement reconnu à l'échelle nationale. En 2009, il met en place une démarche qualité pour les onze plateformes techniques de son laboratoire, une initiative alors rare pour un établissement de recherche qui s'est depuis généralisée et pour laquelle l'IS2M est souvent cité comme exemple. Jusqu'à ce jour, Gautier Schrodj mène d'une main de maître le fonctionnement et l'organisation des plateformes de son laboratoire et maintient leur haut niveau de technicité tout en s'appuyant sur l'expertise de ses collaborateurs.

## Recherche et développement

### Douze lauréats EMERGENCE@CNRSChimie2024

Pour la septième année consécutive, CNRS Chimie a renouvelé son soutien en faveur des jeunes chimistes en relançant l'appel à projet Emergence@CNRSChimie2024. L'objectif de cet appel consiste à mieux accompagner les chargé(e)s de recherche ou maîtres et maîtresses de conférences en finançant une bourse postdoctorale pour un projet novateur par rapport à l'état de l'art et en encourageant la prise de risque.

Les douze lauréats 2024 sont :

- **Édouard Badarau**, enseignant chercheur au laboratoire Chimie et biologie des membranes et des nanoobjets (CNRS/Université de Bordeaux/Bordeaux INP) pour le projet « Grob fragmentation as a tool for the design of new photo-immolative nano-materials (PhotoCHOP) » ;
- **Læticia Chausset-Boissarie**, chercheuse au laboratoire Chimie organique et bioorganique : réactivité et analyse (CNRS/Université Rouen Normandie/INSA Rouen Normandie) pour « Electrophotocatalytic trifluoromethylation with trifluoroacetic acid (TFA@EPC) » ;
- **Benoit Couturaud**, enseignant chercheur à l'Institut de chimie et des matériaux Paris-Est (CNRS/Université Paris-Est Créteil Val-de-Marne) pour « Auto-assemblage induit par polycondensation utilisant des réactions multicomposants (McPISA) » ;
- **Émilie Delahaye**, chercheuse au Laboratoire de chimie de coordination (CNRS/Université Toulouse 3), pour le projet « Étude d'aimants moléculaires multiferroïques (AIMMOI) » ;
- **Marc Devillard**, chercheur à l'Institut des sciences chimiques de Rennes (ENSC de Rennes/Université de Rennes) pour « The missing link for olefin synthesis: 2-silyl-vinylaluminum (SILVA) » ;
- **Adrien Normand**, chercheur à l'Institut de chimie moléculaire de l'Université de Bourgogne (CNRS/COMUE UBFC) pour « Earth-abundant catalytic systems for the dehalogenation of polymers (DEHALOPOLY) » ;
- **Gauthier Rydzek**, enseignant chercheur à l'Institut Charles Gerhardt Montpellier (CNRS/ENSC Montpellier/Université de Montpellier) pour « Electrodeposited hybrid mesoporous films (E-HYPOF) » ;

- **Johannes Schachenmayer**, chercheur à l'Institut de science et d'ingénierie supramoléculaires (CNRS/Université de Strasbourg) pour « Disorder-induced non-classical states in polaronic chemistry (DINOPARC) » ;

- **Lydia Sosa Vargas**, chercheuse à l'Institut parisien de chimie moléculaire (CNRS/Sorbonne Université), pour le projet « Supramolecular thermally-activated delayed fluorescence polymers for greener LED materials (SupraLED) » ;

- **Antoine Tissot**, chercheur à l'Institut des matériaux poreux de Paris (CNRS/ENS – PSL/ESPCI Paris – PSL) pour le projet « Solides poreux flexibles et commutables pour la détection de chocs (SPOCC) » ;

- **Laura Trapiella Alfonso**, enseignante chercheuse à l'Institute of chemistry for life and health sciences (CNRS/Chimie ParisTech – PSL) pour l'« Étude approfondie des propriétés structurales et physicochimiques des carbon dots dopés avec du fer en milieux physiologiques pour le diagnostic (App-CDFe) » ;

- **Domenico Truzzolillo**, chercheur au Laboratoire Charles Coulomb (CNRS/Université de Montpellier) pour le projet intitulé « Gelation and elastocapillarity in spinning beads (ELAS-TOSPIN) ».

• Source : CNRS Chimie, 22/12/2023.

## La recherche académique française en chimie par temps de crise

Qu'il s'agisse de concevoir, synthétiser et caractériser des molécules ou matériaux nouveaux ou bien de nouveaux procédés, pour des applications d'aujourd'hui et de demain, la chimie se trouve au carrefour de plusieurs des dix-sept objectifs de développement durable (ODD) définis par l'ONU. Ces ODD visent à ce que les sociétés de l'ensemble des pays du monde atteignent un stade de développement durable à la fois sur les plans environnemental et sociétal. La chimie développe des interfaces avec la physique, la biologie, la santé, le génie des procédés et, aujourd'hui, aussi avec la « science des données » en plein essor. Les objets d'étude de la chimie couvrent toutes les échelles entre les molécules et les matériaux, les plus avancés étant souvent inspirés de la nature et pouvant présenter une structuration hiérarchique multi-échelles. Les rapports dits « de prospective » de chaque Conseil scientifique d'institut (CSI) du CNRS sont demandés en fin de mandature et se présentent sous forme d'une publication d'une vingtaine de pages, constituant un rapport pour une période de trois ans<sup>(1)</sup>. Pour 2019-2023, Olivier Sandre, président du CSI de l'Institut de chimie (INC, dorénavant CNRS Chimie), a proposé à *L'Actualité Chimique* un article résumant son rapport de mandature et intitulé « La recherche académique française en chimie par temps de crise ». Le rapport de prospective de la mandature 2019-2023 du CSI-INC est consultable en ligne<sup>(2)</sup> et sa version résumée accessible sur le site de *L'Actualité Chimique*<sup>(3)</sup>. Ce rapport de prospective résulte des discussions menées lors des séances du CSI de l'Institut de chimie du CNRS qui se sont déroulées de janvier 2019 à septembre 2023. Les premières parties du rapport visent à dépeindre le paysage de la recherche française en chimie et ses sous-disciplines, depuis la chimie moléculaire à la science des matériaux et la physico-chimie analytique. Cependant, comme toute représentation, elle sera forcément partielle et résultant du point de vue de ses auteurs, qui ne revendiquent pas d'embrasser l'entièreté des sujets de recherche actuels, mais simplement de donner une vision de la discipline à travers le prisme des connaissances,

de l'expertise et des orientations de recherches des membres du CSI. Les propos exposés dans la suite du rapport résultent des débats et des réflexions des membres du CSI au sujet de grandes questions sociétales auxquelles les chimistes peuvent apporter des réponses par leurs travaux en lien avec l'énergie, les ressources durables, la santé, etc., et grâce à la chimie en flux et aux nouveaux outils de l'intelligence artificielle. Ils ont été suscités, d'une part, par la présentation régulière devant le CSI des actualités de l'INC par sa direction, d'autre part, par des exposés de personnalités invitées pour leur expertise (et sur suggestion du Bureau) sur des questions précises sur lesquelles la direction de l'Institut a demandé au CSI de réfléchir, soit desquelles le CSI s'est auto-saisi, en fonction de l'actualité, pouvant concerner les membres des laboratoires rattachés à l'INC. Le rapport aborde ensuite les questions de l'emploi des docteurs en chimie, de la science ouverte, des questions d'intégrité et des financements de la recherche – notamment ceux des programmes et équipements prioritaires de recherche (PEPR) – et se conclut par une série de recommandations élaborées de manière collégiale et votées en séance.

<sup>(1)</sup><https://rapports-du-comite-national.cnrs.fr/rapports-de-prospective>

<sup>(2)</sup><https://hal.science/hal-04307872v1>

<sup>(3)</sup>[www.lactualitechimique.org](http://www.lactualitechimique.org) (page liée au sommaire de ce numéro).

## RMN et IRM : un duo magnétique pour comprendre les cancers du cerveau

Les gliomes représentent 50 % des cancers du cerveau et constituent les tumeurs cérébrales les plus fréquentes. Les altérations moléculaires impliquées dans ces cancers affectent principalement les récepteurs membranaires à activité tyrosine kinase, qui agissent comme des « interrupteurs » d'activation ou d'inhibition de nombreuses fonctions comme la division ou la migration cellulaire. En particulier, on observe une amplification et/ou des mutations du récepteur du facteur de croissance épidermique (EGFR) et des voies de signalisation qui lui sont associées. Ceci induit une division cellulaire incontrôlée et, à terme, l'apparition de tumeurs. Plusieurs thérapies ciblées ont été développées, mais les traitements actuels restent inefficaces contre les glioblastomes, les formes les plus graves de ces cancers du cerveau. Il est donc primordial d'identifier de nouvelles cibles thérapeutiques pour traiter ces cancers.

Des scientifiques du CNRS, au Centre de biophysique moléculaire et au laboratoire Conditions extrêmes et matériaux haute température et irradiation, ont étudié un modèle de ces cancers du cerveau chez la drosophile pour mieux comprendre les perturbations métaboliques qui lui sont associées. La surexpression des récepteurs de l'EGF et d'une enzyme (la phosphoinositide 3-kinase, PI3K) dans les cellules gliales, ces cellules du système nerveux central qui soutiennent et protègent les neurones, induit une hypertrophie du cerveau nettement visible par IRM et l'apparition d'une cachexie (fonte du tissu adipeux et des muscles). Ils ont ensuite exploré l'altération du métabolisme cellulaire en utilisant la RMN à angle magique haute résolution (HR-MAS) et la RMN liquide 2D. Ils ont ainsi pu mettre en évidence des modifications des voies métaboliques dans le gliome, en particulier des modifications caractéristiques de la cachexie.

Si l'intérêt de cibler le récepteur 5-HT7 de la sérotonine pour le traitement de maladies neurologiques et psychiatriques est bien décrit, son rôle dans le contrôle de la prolifération tumorale reste peu exploré. Pour tenter de répondre à cette question, les scientifiques ont génétiquement modifié les

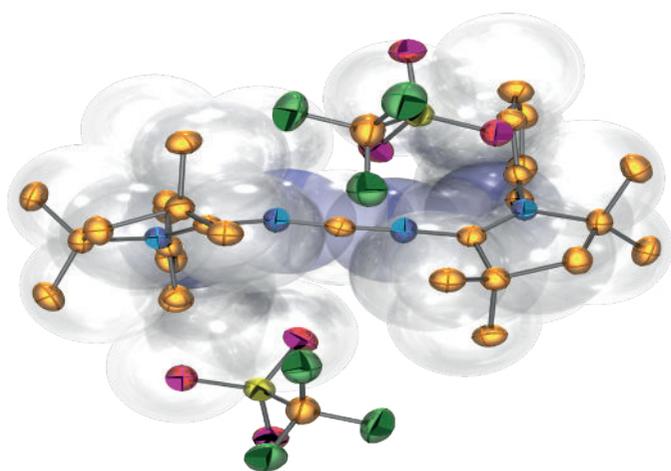
drosophiles porteuses du gliome pour qu'elles expriment à la surface des cellules gliales le récepteur R5-HT7 humain. Ils ont ainsi pu montrer que l'expression de ce récepteur de la sérotonine atténue plusieurs effets qui sont associés au développement du gliome, comme l'hypertrophie du cerveau, observable par IRM, et la cachexie.

La combinaison des techniques d'analyses RMN utilisées ici se révèle être un outil efficace pour mieux comprendre les mécanismes biochimiques de certains cancers du cerveau, étape cruciale pour développer de nouvelles thérapies ciblées.

• Source : CNRS Chimie, 09/01/2024.

Réf. : M. Bertrand, F. Szeremeta, N. Hervouet-Coste, V. Sarou-Kanian, C. Landon, S. Morisset-Lopez, M. Decoville, An adult *Drosophila* glioma model to highlight metabolic dysfunctions and evaluate the role of the serotonin 5-HT7 receptor as a potential therapeutic target, *The FASEB Journal*, 2023, DOI: 10.1096/fj.202300783RR.

## Un atome de carbone avec seulement quatre électrons de valence...



© Mohand Melaimi.

Les carbènes sont des espèces chimiques organiques dont un atome de carbone possède seulement six électrons de valence au lieu des huit dans sa forme stable prédite par la célèbre règle de l'octet\*. Ce défaut d'électrons rend les carbènes très instables et donc ultra réactifs. Pour cette raison, ils ont longtemps été considérés comme des intermédiaires réactionnels fugaces, curiosités de laboratoires faisant uniquement l'objet d'études très fondamentales. Depuis que les équipes de Guy Bertrand et Anthony Arduengo ont isolé les premiers carbènes stables, ces espèces ont connu des développements considérables. Elles sont en particulier devenues incontournables en chimie de synthèse, précisément en raison de leur réactivité singulière. Les carbènes se comportent aussi comme des catalyseurs organiques à part entière, aussi bien en synthèse moléculaire qu'en chimie des polymères.

Les chimistes de l'équipe de Guy Bertrand au laboratoire international du CNRS « Joint Research Laboratory » (Department of Chemistry and Biochemistry, University of California - San Diego) viennent de franchir un nouveau pas en isolant le tout premier composé stable dans lequel on ne compte plus que quatre électrons de valence sur le carbone. Pour réussir cette première, les chimistes ont introduit des substituants volumineux en périphérie du carbène afin de stabiliser électriquement cette espèce autrement instable. Cette stratégie a également rendu possible sa caractérisation par cristallographie des rayons X, apportant la preuve de cet état de valence atypique.

En étudiant sa réactivité, ils ont également pu mettre à jour sa forte acidité de Lewis attribuable à la double oxydation du carbone carbénique. Cette espèce est suffisamment réactive pour former des anions tels que le méthoxyde ( $\text{CH}_3\text{O}^-$ ), le chlorure ( $\text{C}^-$ ) et même le cyanure ( $\text{CN}^-$ ). Une découverte publiée dans la revue *Nature*, qui, si elle met à mal un des fondements de la chimie organique, devrait ouvrir des nouvelles perspectives en termes de catalyse.

• Source : CNRS Chimie, 04/12/2023.

Réf. : Y. Kai Loh, M. Melaimi, M. Gembicky, D. Munz, G. Bertrand, A crystalline doubly oxidized carbene, *Nature*, 2023, [www.nature.com/articles/s41586-023-06539-x](https://www.nature.com/articles/s41586-023-06539-x).

\* Formulée par Gilbert Lewis en 1916, la règle de l'octet est une règle chimique simple qui énonce que les atomes avec un numéro atomique  $Z \geq 4$  comme le carbone tendent à se combiner de façon à avoir huit électrons dans leur couche de valence, ce qui leur donne la même structure électronique qu'un gaz noble.

## Du nouveau dans la réaction de Diels-Alder grâce aux organocatalyseurs

Depuis le prix Nobel décerné à Benjamin List et David MacMillan en 2021 pour leurs travaux en organocatalyse, la réputation de ce domaine de recherche n'est plus à faire. Petites molécules carbonées, les organocatalyseurs ont séduit de nombreux chimistes organiciens en mal d'alternatives efficaces aux métaux largement utilisés, mais souvent connus pour leur toxicité et leur coût élevé. Ils permettent non seulement d'accélérer certaines réactions mais aussi et surtout de contrôler la géométrie des molécules synthétisées. Parmi le large champ d'applications de l'organocatalyse, la réaction de Diels-Alder est un cas d'école. Transformation iconique en chimie organique, elle permet la synthèse de molécules cycliques en transformant, en une seule étape, deux doubles liaisons  $\text{C}=\text{C}$  en simples liaisons  $\text{C}-\text{C}$ . Au cours de cette réaction dite de cycloaddition, plusieurs isomères peuvent souvent se former, molécules de même formule chimique mais dont l'arrangement des atomes dans l'espace diffère. On appelle stéréosélectivité l'art de contrôler cette géométrie et l'utilisation d'un organocatalyseur chiral est un puissant levier pour atteindre ce contrôle.

Une équipe de chimistes de l'Institut des substances naturelles (CNRS/Université Paris Saclay) a étudié une famille de tels organocatalyseurs chiraux à base d'acide phosphorique. Avec ces catalyseurs, ils ont pu réaliser des réactions de Diels-Alder asymétriques qui permettent d'introduire dans le cycle une liaison  $\text{N}-\text{O}$ . Les molécules ainsi obtenues, appelées oxazines, sont des hétérocycles à six atomes dont quatre de carbone, un atome d'azote et un atome d'oxygène. Ces molécules, que l'on retrouve dans de nombreux produits naturels comme le preisomide aux propriétés antimicrobiennes, présentent un grand intérêt, notamment en chimie thérapeutique. Comme il est aisé de jouer sur la liaison  $\text{N}-\text{O}$ , elles sont des briques de choix pour la préparation rapide de produits plus complexes.

D'habitude, les cycloadditions de Diels-Alder utilisent comme réactifs de départ des molécules qui possèdent deux doubles liaisons consécutives, appelés diènes. Des chimistes de l'ICSN se sont penchés sur une question simple mais pourtant jamais étudiée jusqu'ici : qu'advient-il si ces réactifs possèdent non pas deux mais trois doubles liaisons (triènes) ? Sur quel couple de liaisons se fait la cycloaddition ? L'organocatalyseur parvient-il à différencier ces trois doubles liaisons tout en conservant la stéréosélectivité de la réaction ? Leur étude montre que le catalyseur fonctionne toujours et conserve le contrôle sur la géométrie de la molécule produite. Plus

puissant encore, cette sélectivité est modulable en jouant sur les paramètres de la synthèse pour choisir quelle géométrie de cycle se forme. Ainsi, parmi les huit isomères possibles en partant d'un triène, six oxazines différentes ont pu être synthétisées de façon très sélective. Les scientifiques ont illustré l'utilité de ces oxazines en proposant un éventail varié de produits issus de ces intermédiaires. Amino-alcools, tricycles originaux, oxazines fonctionnalisées sont venus soutenir ce travail publié dans le *Journal of American Chemical Society*.

• Source : CNRS Chimie, 09/01/2024.

Réf. : E. Naulin, M. Lombard, V. Gandon, P. Retailleau, E. Van Elslande, L. Neuville, G. Masson, Enantioselective and regiodivergent synthesis of dihydro-1,2-oxazines from triene-carbamates via chiral phosphoric acid-catalysis, *J. Am. Chem. Soc.*, 2023, <https://doi.org/10.1021/jacs.3c12015>.

## Alzheimer : élucider la formation des agrégats dans le cerveau

L'agrégation de la protéine Tau dans le cerveau est un marqueur de plusieurs maladies neurodégénératives dont la maladie d'Alzheimer. Des études récentes montrent que la formation de ces agrégats de Tau, aussi appelés fibres amyloïdes, coïncide avec la présence d'autres biomolécules, dont la nature et l'organisation ne sont pas encore élucidées. Identifier *in vivo* quelles molécules induisent l'agrégation de la protéine Tau et forment les enchevêtrements neurofibrillaires délétères serait une avancée majeure pour la compréhension de la maladie d'Alzheimer et d'autres pathologies associées à la protéine Tau (tauopathies).

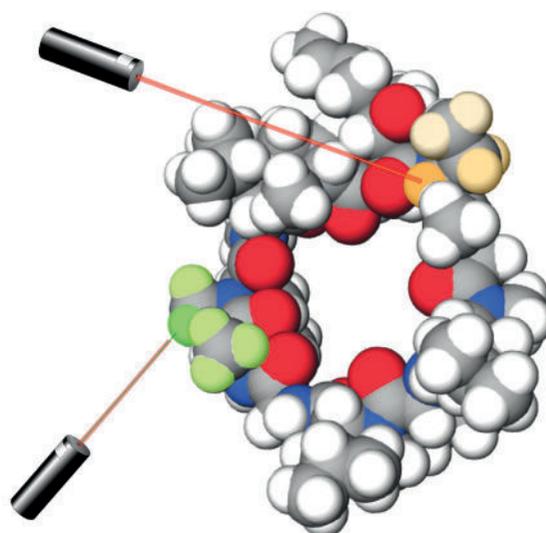
*In vitro*, de nombreuses études ont établi que des molécules chargées négativement, comme des sucres, des lipides ou encore des acides nucléiques (ARN), pouvaient induire l'agrégation de Tau. Mais observer directement pour comprendre quels cofacteurs s'assemblent avec Tau pour former des agrégats pathologiques est une tâche difficile à cause de la taille nanométrique des fibres amyloïdes. Ce défi technologique impose le développement de nouveaux outils de caractérisation.

Des équipes bordelaises du laboratoire Chimie et biologie des membranes et des nanoobjets (CBMN, CNRS/Bordeaux INP/Université de Bordeaux) et de l'Institut des sciences moléculaires (ISM, CNRS/Bordeaux INP/Université de Bordeaux) ont démontré que l'agrégation de la protéine Tau peut être induite par l'ARN modèle PolyA, chaîne de nucléotides adénine. Pour ce faire, ils ont eu recours à un montage de spectroscopie Raman TERS (« tip-enhanced Raman spectroscopy ») développé à l'ISM et qui permet simultanément de visualiser et caractériser chimiquement des agrégats de quelques nanomètres de diamètre. Cette technique leur a permis d'analyser des fibres amyloïdes individuelles et de révéler l'insertion du PolyA dans la fibre. L'intégration des signatures vibrationnelles spécifiques de la protéine Tau et de l'adénine permet de caractériser simultanément la partie protéique et la partie ARN de la fibre. Cette étude a mis en évidence que l'ARN polyA interagit avec plusieurs régions de la protéine Tau, à la fois celles organisées en feuillet et ses régions plus désordonnées. De plus, une forte colocalisation est observée entre l'ARN et les résidus chargés positivement de la protéine. Ces résultats, publiés avec le label « hot topic », permettent de mieux comprendre la formation de ces agrégats pour espérer agir plus en amont sur la pathologie.

• Source : CNRS Chimie, 19/12/2023.

Réf. : G. S. Cooney, D. Talaga, V. Ury-Thieri, Y. Fichou, Y. Huang, S. Lecomte, S. Bonhommeau, Chemical imaging of RNA-Tau amyloid fibrils at the nanoscale using tip-enhanced Raman spectroscopy, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, <https://doi.org/10.1002/anie.202314369>.

## Une RMN plus performante pour analyser les mélanges complexes



© Margherita Bazzoni.

La spectroscopie RMN est une méthode de référence pour identifier et quantifier des molécules dans un mélange. Utilisée en routine, la méthode souffre cependant d'une sensibilité limitée, surtout pour des mélanges complexes où certaines espèces sont présentes en petite quantité. À ceci s'ajoute la complexité des spectres, somme des signaux provenant de chaque espèce constituant le mélange. Ces signaux peuvent se recouvrir et se masquer mutuellement. Les nouvelles méthodes d'acquisition des spectres RMN proposées par les scientifiques du laboratoire CEISAM (CNRS/Université de Nantes) permettent de contourner cet obstacle.

Issue des travaux de l'entreprise allemande NVision et de l'Institut Paul Scherrer (PSI) en Suisse, la méthode dite « d'hyperpolarisation », appelée HYPNOESYS, permet d'améliorer la sensibilité de la spectroscopie RMN d'un facteur 10, voire plus. En l'adaptant aux expériences RMN bidimensionnelles (2D) menées couramment pour identifier les molécules, les scientifiques sont parvenus à mettre en évidence des liens, appelés corrélations, qui existent entre les signaux recueillis dans les spectres RMN 2D. Simplifiant ainsi l'analyse, ces corrélations permettent d'attribuer sans ambiguïté les signaux aux différentes espèces présentes dans le mélange, concentrées ou non. Cette méthode d'enregistrement des données présente également l'avantage que les mesures peuvent être réalisées en un temps très court.

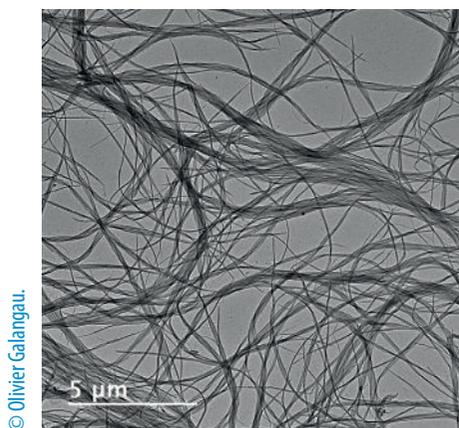
En parallèle, les chimistes de CEISAM ont également développé une méthode permettant d'isoler et d'extraire du spectre RMN les signatures de composés présents dans le mélange, mêmes lorsqu'ils sont masqués par les signatures d'autres signaux, avec une augmentation d'un facteur 10 de la sensibilité de la mesure.

Prochaine étape : réaliser ces mesures avec un appareil dit « de paillasse » qui présente l'avantage d'être compact, et donc facilement transportable vers les milieux réactionnels que l'on veut caractériser.

• Source : CNRS Chimie, 20/12/2023.

Réf. : A.J. Parker, A. Dey, M.U. Qureshi, J.M. Steiner, J.W. Blanchard, J. Scheuer, N. Tomek, S. Knecht, F. Josten, C. Müller, P. Hautle, I. Schwartz, P. Giraudeau, T.R. Eichhorn, J.-N. Dumez, Solution-state 2D NMR spectroscopy of mixtures hyperpolarized using optically polarized crystals, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/anie.202312302> ; M. Bazzoni, R. Mishra, J.-N. Dumez, Single-scan ultrasensitive NMR experiments with preserved sensitivity, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.202314598>.

## Polymères supramoléculaires : qui a dit que les forces dispersives ne faisaient pas le poids ?



Les polymères supramoléculaires, analogues non covalents des « plastiques » que nous utilisons quotidiennement, font l'objet de recherches accrues en vue de leur utilisation dans des domaines variés comme le biomédical ou l'électronique. À l'instar des biopolymères comme l'ADN, ces objets macromoléculaires sont formés de petites molécules liées entre elles par des interactions non covalentes, comme les liaisons hydrogène et les interactions de Van der Waals. Les premières, de forte intensité, impliquent un partage d'électrons entre un atome d'hydrogène d'une molécule et un atome d'oxygène d'une molécule voisine. Les secondes, aussi appelées forces dispersives, correspondent à une faible interaction électrique à courte distance entre atomes et/ou molécules voisines. L'avantage de ces polymères est que les liaisons qui constituent la chaîne ne sont pas permanentes et permettent, en fonction de la température, de passer d'un liquide constitué de petites molécules à un solide élastique ou rigide. Ces polymères sont également autoréparables puisqu'une élévation locale de la température permet de « colmater » par fusion locale des fissures dans le matériau.

Longtemps, la communauté scientifique a considéré que la croissance des polymères supramoléculaires était fixée par la thermodynamique. Dans certains cas, des assemblages plutôt contrôlés par la cinétique peuvent aussi être obtenus, ouvrant la porte à des tailles et formes d'objets supramoléculaires plus variées. Ces processus cinétiques reposent exclusivement sur le fait de retarder pour un temps la polymérisation spontanée (thermodynamique) en bloquant la formation des liaisons hydrogène intermoléculaires, responsables de la construction des assemblages.

Des chimistes du CNRS à l'Institut des sciences chimiques de Rennes (ISCR, CNRS/Université de Rennes/ENSCR/INSA Rennes) ont récemment mis au point une nouvelle approche qui permet également de retarder les polymérisations spontanées, non plus en bloquant la formation de liaisons hydrogène mais en boostant le rôle des forces dispersives. Le principe est le suivant : en fonctionnalisant judicieusement une molécule organique avec, d'une part, des fonctions amides responsables des liaisons hydrogène et, d'autre part, des motifs cycliques (aromatiques) à six atomes de carbone ainsi que des chaînes carbonées linéaires favorisant les forces dispersives, ces dernières deviennent force motrice de l'assemblage. En outre, cet assemblage ne permet pas la croissance des architectures thermodynamiques via les liaisons hydrogène. Cette approche, qui repose sur la coopérativité de très nombreuses interactions faibles, ouvre de nouvelles opportunités pour la fabrication de polymères supramoléculaires.

• Source : CNRS Chimie, 19/12/2023.

Réf. : W.T. Gallonde, C. Poidevin, F. Houard, E. Caytan, V. Dorcet, A. Fihey, K. Bernot, S. Rigaut, O. Galangau, Kinetic delay in cooperative supramolecular polymerization by redefining the trade-off relationship between H-bonds and Van der Waals/ $\pi$ - $\pi$  stacking interactions, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, <https://doi.org/10.1002/anie.202313696>.

## Comment se structure un liquide ionique au contact d'une paroi ?

Les liquides ioniques sont des sels liquides à température ambiante composés uniquement d'ions. Ils sont souvent utilisés comme solvants non volatils, électrolytes pour les batteries ou lubrifiants dans diverses applications. Leur faible volatilité et leur stabilité thermique en font des alternatives intéressantes aux solvants organiques traditionnels.

La structuration à l'échelle moléculaire de ces liquides ioniques sur une paroi solide est un sujet de recherche très dynamique. En effet, des interactions intermoléculaires complexes entre la surface solide et le liquide conduisent à une ré-organisation moléculaire spécifique en surface. Cette structuration peut avoir un impact significatif sur les propriétés physiques et chimiques du liquide ionique à l'interface. Elle agit par exemple sur l'efficacité et la sélectivité de réactions catalytiques, gouverne l'efficacité anti-usure de lubrifiants, influence la durée de vie et la densité énergétique des dispositifs de stockages d'énergie... Hélas, cette structure interfaciale reste encore très mal comprise.

Prenons le cas des liquides ioniques amphiphiles<sup>(1)</sup> à longue chaîne carbonée<sup>(2)</sup> que l'on trouve par exemple dans les supercondensateurs, les capteurs électrochimiques ou les lubrifiants. Leur caractère amphiphile conduit à une nanostructuration du liquide en domaines polaires et apolaires. Des équipes du Laboratoire de physique et du Laboratoire de chimie à l'ENS de Lyon, du CEA Leti et du CEA Liten à Grenoble, se sont demandé ce que devenait cette nanostructuration au voisinage de différentes parois solides : deux substrats hydrophiles, le mica et la silice, et deux substrats hydrophobes, le silicium et le disulfure de molybdène ( $\text{MoS}_2$ ). Les trois premiers sont des substrats de référence, tandis que le dernier a été choisi pour l'importance de ses applications en électronique en combinaison avec des liquides ioniques<sup>(3)</sup>.

Pour cela, ils ont combiné des expériences de microscopie à force atomique (AFM) à des simulations de dynamique moléculaire. Les expériences d'AFM ont révélé qu'il pouvait exister trois types de structures interfaciales pour le même liquide ionique, qui dépendent de la nature du substrat et de la teneur en eau du système. Les simulations de dynamique moléculaire ont également permis de distinguer l'effet de l'eau de celui de la nature du substrat, et de mieux comprendre ainsi les comportements des liquides ioniques observés en surface de paroi. Ce travail devrait permettre, à terme, de proposer un cadre général capable de décrire, mais aussi de prédire, l'organisation interfaciale d'un liquide ionique amphiphile en fonction de la nature du substrat, et donc ses propriétés.

• Source : CNRS Chimie, 19/12/2023.

Réf. : L.B. Tannous, M. Simoes Santos, Z. Gong, P.-H. Haumesser, A. Benayad, A. A.H. Padua, A. Steinberger, Effect of surface chemistry on the electrical double layer in a long-chain ionic liquid, *Langmuir*, 2023, <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.langmuir.3c02123>.

<sup>(1)</sup>Une espèce chimique est amphiphile lorsqu'elle possède à la fois un groupe hydrophile et un groupe hydrophobe.

<sup>(2)</sup>À base d'imidazolium à longue chaîne (1-octyl-3-méthylimidazolium dicyanamide).

<sup>(3)</sup>Le  $\text{MoS}_2$  est un semiconducteur à 2D. Lorsqu'il est en contact avec un liquide ionique, sa conductivité varie très fortement en fonction de la structure interfaciale du liquide ionique, qui peut être modifiée à l'aide d'un potentiel externe. Cet effet est exploité dans une nouvelle classe de transistors à effet de champ à grille électrolytique, qui peuvent permettre de lever des verrous technologiques à la miniaturisation des transistors.

## La recherche académique française en chimie « par temps de crises »

Qu'il s'agisse de concevoir, synthétiser et caractériser des molécules, des matériaux nouveaux ou bien de nouveaux procédés, pour des applications d'aujourd'hui ou de demain, la chimie se trouve au carrefour de plusieurs des dix-sept objectifs de développement durable (ODD) définis par l'ONU. Ces ODD visent à ce que les sociétés de l'ensemble des pays du monde atteignent un stade de développement durable à la fois sur les plans environnemental et social. La chimie développe des interfaces avec la physique, la biologie, la santé, le génie des procédés et, aujourd'hui, la « science des données » en plein essor. Les objets d'étude de la chimie couvrent toutes les échelles entre les molécules et les matériaux, les plus avancés étant souvent inspirés de la Nature et pouvant présenter une structuration hiérarchique multi-échelles.

### Synthèse de « briques élémentaires »

Centrale de la discipline, la chimie de synthèse permet l'ajustement précis des structures et propriétés électroniques de systèmes moléculaires discrets ou étendus. L'élaboration et l'étude des molécules isolées ou de leur assemblage sont ainsi au cœur de la biologie moléculaire, des matériaux moléculaires, de l'électronique moléculaire et des polymères. Ses applications sont nombreuses et couvrent des domaines aussi vastes que l'environnement, l'énergie, la santé et la chimie industrielle. L'ingénierie des molécules et leur assemblage supramoléculaire nécessitent une approche combinant la physicochimie analytique pour les caractériser, et la chimie théorique, elle-même en pleine évolution et fortement sollicitée pour interpréter les relations structure-propriétés. Cela est rendu possible grâce aux outils de modélisation classiques et quantiques, mais aussi par l'émergence d'approches d'intelligence artificielle, comme l'apprentissage machine encouragé par la massification des données.

Dans le domaine de la chimie macromoléculaire, les évolutions récentes concernent l'accroissement du contrôle des architectures des polymères et l'introduction d'unités stimulables via l'extension des réactions de polymérisation contrôlée, radicalaire, ionique ou par ouverture de cycle, ou la post-modification, à des monomères dits « difficiles », et grâce à l'introduction d'approches bio-inspirées pour obtenir des polymères dits « de précision ». Les matériaux polymères de types élastomères thermoplastiques, réseaux adaptatifs covalents et vitrimères constituent aujourd'hui un domaine intense de recherche porteur d'innovations.

La chimie de coordination et la chimie organométallique jouent également un rôle crucial dans le développement de nouvelles réactions chimiques, la conception de catalyseurs efficaces, sélectifs, « écologiquement et économiquement responsables », ainsi que la compréhension des mécanismes réactionnels, comme par exemple, l'activation de liaisons C-H, C-C et l'activation de petites molécules (CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, etc.).

Associant des molécules par des interactions faibles ou fortes, les matériaux moléculaires covalents ou de coordination – covalent organic framework ou metal-organic framework

(COF ou MOF) – sont décrits par l'approche bottom-up et par la chimie supramoléculaire. Il est ainsi possible d'élaborer des objets multifonctionnels qui peuvent être commutables, ou mettre en œuvre au moins deux propriétés tels que les systèmes magnéto-optiques ou ceux de la mécano-chimie. Le défi actuel réside dans la transition vers une chimie plus verte, moins coûteuse, moins toxique et biosourcée.

### Des applications de la chimie toujours plus variées dans l'énergie, le transport et la santé

L'avancée des connaissances en chimie des matériaux vise à synthétiser de nouveaux matériaux structuraux ou avancés en direction d'une économie circulaire qui, par l'amélioration du recyclage en boucle fermée et l'écoconception, respecte mieux les ressources et l'environnement, jouant ainsi un rôle majeur dans l'atteinte des ODD cités précédemment.

Bien que les concepts de la chimie verte soient bien établis, la complexité des problèmes et des technologies industrielles rend les besoins en matériaux avancés et dits « de fonction » de plus en plus prégnants. Les besoins en santé, les nécessités énergétiques et la protection de l'environnement obligent aujourd'hui à l'innovation afin d'améliorer les procédés de production des biens, le stockage de l'énergie, mais aussi le développement de matériaux biosourcés, tout en s'assurant de l'innocuité des produits sur le marché, ce qui nécessite de concevoir des matériaux *safe by design* et n'entraînant pas non plus de pollution du milieu naturel, forçant à réfléchir aux usages, mais aussi à tout le cycle de vie.

### Analyse et caractérisation des « transformations de la matière »

Par l'étude théorique et expérimentale des mécanismes mis en jeu par les molécules et les matériaux, la chimie physique couvre aussi bien la thermodynamique que la cinétique, la chimie quantique, la spectroscopie, la photochimie, l'électrochimie, la radiochimie et les sciences analytiques, ces dernières visant à repousser les limites de l'insondable. Des solutions innovantes sont proposées, dans lesquelles les principes physiques de détection sont poussés aux limites. Ainsi en est-il de l'utilisation de nanomatériaux dans des biocapteurs électrochimiques ou d'agents de polarisation en RMN, avec pour objectif d'exalter significativement le signal. De même, le couplage, en ligne ou séquentiel, de plusieurs techniques (telles que la chromatographie bidimensionnelle, la mobilité ionique et la spectrométrie de masse) permet d'augmenter la résolution de l'analyse. Des approches ciblées ou non ciblées s'appuient sur des balayages à très haute résolution ou sur des approches multidimensionnelles, multi-techniques ou multi-omiques, générant un grand volume de données. Se posent alors les questions de leur stockage et de leur partage. Les acteurs de la recherche en chimie analytique sont en attente d'un format de fichier de données universel,

simplifiant la comparaison inter-laboratoires, et généralisant les approches multimodales, combinant plusieurs techniques analytiques. Parmi les pistes explorées, la miniaturisation des systèmes analytiques, la microfluidique et la chimie en flux ouvrent la voie vers l'analyse de faibles volumes d'échantillons, une faible perturbation des procédés lors des analyses en ligne, ainsi qu'une faible consommation de réactifs chers, polluants ou dangereux.

## Répondre aux enjeux sociaux

Souvent perçue à tort par le grand public comme un danger et une source de pollution, la chimie offre des solutions aux grands enjeux sur la transition écologique et les crises (climatique, sanitaire, etc.) auxquelles la société est confrontée. La nécessité absolue de sortir de l'ère des ressources fossiles pose des questions sur le futur même de la pétrochimie. L'utilisation du CO<sub>2</sub> comme brique élémentaire de molécules pourrait être une solution, comme pour la synthèse d'actifs pharmaceutiques ou de matériaux. Dans cette optique, les chimistes des laboratoires travaillent déjà depuis des années à trouver des ressources alternatives pour synthétiser les molécules et matériaux nécessaires à la vie courante et la santé des populations, mais aussi pour faire baisser les émissions des bâtiments et des transports, grâce aux matériaux composites alliant la légèreté et les performances, auxquelles s'ajoute aujourd'hui l'allègement des émissions de CO<sub>2</sub> telles qu'évaluées par les analyses de cycles de vie.

En matière d'énergie, la chimie fournit de nouveaux vecteurs (hydrogène, biocarburants) mais aussi des améliorations de la production et du stockage de l'électricité : batteries et piles à combustible, électrolyse ou photocatalyse pour l'hydrogène, etc. Des chimistes sont impliqués dans les énergies alternatives : photovoltaïque, mais aussi nouvelles voies comme les piles basées sur un gradient de concentrations ioniques. D'autres travaillent sur des produits de substitution aux substances qui posent des problèmes environnementaux comme les per- et poly-fluoroalcanes (PFAS) ou les polyuréthanes qu'ils cherchent à produire sans les toxiques isocyanates (NIPU).

## Chimie à l'interface avec la biologie et la santé

La chimie joue un rôle essentiel dans de nombreux aspects de la recherche en biologie et santé. Ainsi, la chimie théorique, la biochimie structurale et la chémobiologie – qui vise à « concevoir et élaborer des outils moléculaires afin de sonder ou moduler un processus biologique [1] » – jouent des rôles essentiels dans la compréhension des interactions moléculaires et des mécanismes impliqués dans les systèmes biologiques. Dans le développement des médicaments, la chimie pharmaceutique contribue à la découverte de nouveaux principes actifs grâce à la conception assistée par ordinateur de ligands de cibles biologiques, la chimie combinatoire et d'autres approches thérapeutiques innovantes.

Si la chimie hétérocyclique n'a plus une place prépondérante dans ce domaine, c'est au profit d'une chimie de molécules plus grosses et plus complexes, en particulier celle des peptides, protéines et acides nucléiques. Comprendre la relation structure-fonctions de ces biomacromolécules et étudier leurs interactions au sein des organismes vivants est essentiel pour le développement de thérapies ciblées.

Une autre stratégie vise à augmenter la biodisponibilité des molécules actives en les encapsulant dans des nano-vecteurs à bases lipidiques ou polymères, décorés par des entités chimiques ou biologiques pour un ciblage cellulaire et le suivi par imagerie médicale. Ainsi la chimie continue-t-elle de jouer un rôle crucial dans l'amélioration de la santé humaine, en contribuant à la compréhension des mécanismes biologiques des maladies, à la découverte de nouveaux principes actifs et au développement de technologies innovantes de diagnostic et de thérapie en vue de traitements personnalisés.

## Chimie en flux à haut débit, données et intelligence artificielle

Au cœur des transitions et des tensions sur les ressources, les enjeux de durabilité, d'allègement et de recyclabilité lors de la synthèse de nouveaux matériaux ou molécules poussent à accélérer la découverte de systèmes performants, tout en diminuant l'apport de constituants toxiques ou critiques. Face à ces défis, l'IA offre une approche efficace

et des outils visant à explorer les combinaisons infinies de synthons durables, circulaires et à faible impact environnemental pour aboutir à la génération de matériaux multifonctionnels optimisés. Amenées à être accélérées grâce aux outils de l'IA, ces études permettent d'imaginer les molécules et matériaux répondant aux grandes transitions sociétales, qui soient *safe by design*, aux propriétés modulables et « sur mesure ». Afin de prédire par le calcul de tels nouveaux matériaux et molécules, l'un des enjeux cruciaux est de déployer des bases de données spécifiques aux matériaux architecturés, multi-échelles et aux assemblages supramoléculaires, ainsi que les outils basés sur l'IA requis pour leur exploitation. S'il est nécessaire pour atteindre ces objectifs de créer les bases de données ouvertes construites par les chercheurs académiques, les données deviennent un enjeu et il est essentiel qu'une réflexion soit menée au niveau du CNRS sur leur accessibilité afin qu'elles ne soient pas accaparées par des intérêts privés, mais qu'elles servent à partager des connaissances au service de la société.

## Chimie des matériaux en conditions extrêmes

Le besoin de repousser leurs limites de fonctionnement fait de l'étude du comportement des matériaux en conditions extrêmes, au-delà des limites conventionnelles, un passage obligé pour leur développement futur. Ainsi, l'étude de ces matériaux à des pressions ou températures extrêmes, sous irradiation ou des réactifs hautement corrosifs ou oxydants, du comportement sous sollicitations thermiques, chimiques, mécaniques, électriques, etc. de plus en plus souvent couplées, est un enjeu majeur pour les industries de la chimie, de l'énergie, des transports, du nucléaire, de l'espace, de la transformation des matériaux ou de la valorisation des déchets qui combinent des métaux, alliages, ciments, verres, céramiques, carbonés, composites pour donner une valeur ajoutée à leurs produits.

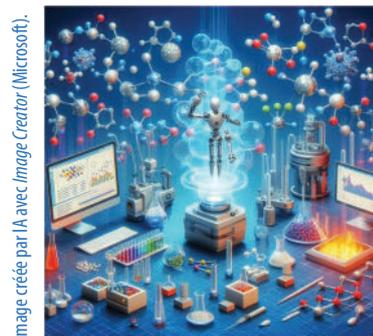


Image créée par IA avec Image Creator (Microsoft).

## Science ouverte et évolution des pratiques de publication

Le conseil scientifique d'institut (CSI) constate que les chimistes se sont bien appropriés les nouvelles formes de publications scientifiques, notamment le dépôt des versions d'auteurs (ou preprints) des productions scientifiques sur des archives ouvertes comme ChemRxiv et HAL-CNRS. La direction des données ouvertes de la recherche (DDOR) du CNRS a observé depuis 2018 une augmentation globale des frais de publication (ou *article processing charges*) au CNRS et, en particulier, + 58 % en chimie. C'est pourquoi, depuis 2022, le CNRS encourage ses scientifiques à ne plus payer pour être publiés. En 2020, 73,5 % des publications en chimie sont en accès ouvert et 26,2 % dans une revue sous abonnement. Le CNRS – mais aussi le CSI dans sa recommandation du 21 mai 2019 [2] – mettent en garde contre les revues hybrides induisant un double paiement. La mise en place d'une chargée de mission sur le thème a notamment abouti à l'élaboration – en collaboration avec le CSI – d'une fiche synthétique intitulée « Publier un article en chimie dans un monde de science ouverte » donnant des recommandations aux chercheurs : choisir sa revue au regard d'indicateurs de qualité, favoriser la biblio-diversité, éviter les revues prédatrices et rester vigilant vis-à-vis des « méga-revues », c'est-à-dire celles qui n'ont pas de discipline définie [3].

## Formation des nouvelles générations de chimistes

La thèse est une étape clé dans la formation des futurs chercheurs et le devenir de l'innovation industrielle du pays. Il a paru important au CSI d'étudier cette question à travers deux sessions plénières et la création d'un groupe de travail dédié afin d'analyser la formation des docteurs en chimie et leur devenir, d'évaluer l'impact de la pandémie et estimer l'insertion professionnelle des docteurs chimistes. Comme très peu d'études nationales ne considèrent que les docteurs en chimie, le groupe de travail s'est basé sur des rapports de la situation au début 2020 des docteurs diplômés en 2019, 2017 et 2015 de Toulouse et, fin 2019, des docteurs 2016 de Lyon [4,5]. Différentes statistiques ont été réunies : 46,1 % des docteurs diplômés en chimie sont des femmes, et 30 % de nationalité étrangère. L'âge moyen des docteurs à leur soutenance s'élève à 30,8 ans. La durée médiane de la thèse en chimie est de 3,1 ans et la moyenne de 3,2 ans. 10,1 % des répondants ont réalisé leur thèse en cotutelle et 30 % ont réalisé une mobilité internationale durant leur doctorat. 57 % des docteurs sont en emploi un an après leur diplôme, 81 % après trois ans et 92 % après cinq ans. Plus d'un docteur chimiste sur deux en emploi travaille dans le secteur public un an après leur diplôme. Ce pourcentage chute à 46 % trois ans après la thèse, et à 40,5 % cinq ans après. L'autre partie est employée par le secteur privé. Une petite partie des répondants (4 %) ont créé leur entreprise. Les docteurs en chimie travaillent principalement dans le domaine de l'enseignement et de la recherche. Le salaire médian des docteurs en emploi est de 2 126 € après un an, 2 333 € après trois ans et 2 459 € cinq ans après la thèse. Par rapport aux autres disciplines, on observe en chimie une excellente parité et des situations d'emploi relativement similaires entre les hommes et les femmes. 80 % des femmes ayant un diplôme de doctorat ont un emploi à trois ans. Si le doctorat constitue un rempart contre le chômage, l'accès à l'emploi stable peut être long

et le niveau de rémunération modéré. Ce constat est certainement à relier au manque de postes dans la recherche publique pour les jeunes docteurs qui envisagent une carrière académique et doivent enchaîner des contrats postdoctoraux. Bien que les textes relatifs à la formation doctorale aient été révisés afin de garantir aux doctorants une formation de très haut niveau allée à une reconnaissance internationale de leur diplôme, le doctorat n'est encore pas toujours synonyme d'accès facilité à l'emploi [6].

## La chimie face aux crises internationales

Durant la pandémie de 2020, les laboratoires de l'Institut de chimie du CNRS (INC) n'ont absolument pas démerité, avec plusieurs unités fortement engagées dans la recherche de solutions rapides et efficaces à des questions pratiques cruciales : lavage et recyclage des masques FFP2 mais aussi développement de peptides antiviraux pour application sous forme de spray nasal, participation au développement du vaccin cubain, etc. Plusieurs équipes de chimistes ont obtenu des financements de l'appel « Flash COVID-19 » de l'Agence nationale de la recherche (ANR) et se sont également regroupées au sein du consortium Gavo, financé par le ministère de l'Enseignement supérieur, de la Recherche et de l'Innovation, pour stimuler le développement de molécules susceptibles de bloquer la réplication des virus à ARN. Néanmoins, la crise sanitaire a montré les insuffisances du système industriel français, en particulier dans la production de principes actifs de médicaments de base, et la nécessité de relocaliser cette production en France ou en Europe, mais aussi d'encourager les partenariats de recherche entre l'industrie pharmaceutique et les laboratoires académiques.

Les récents changements géostratégiques mondiaux placent la recherche en chimie en première ligne pour faire face aux défis de sourcing de matières premières ou de molécules produites ailleurs, voire à des relocalisations nécessaires de productions dans des domaines comme la défense, le spatial, le pharmaceutique, etc. Pour les deux premiers, qui relèvent de domaines régaliens, les partenariats existant avec l'Agence de l'innovation de défense et le Centre national d'études spatiales pourraient être renforcés. Face au contexte géopolitique actuel, un questionnement sur la place de la recherche en chimie et les interactions avec l'ensemble du monde semble nécessaire. La remise en cause de l'ordre mondial, les guerres ou le terrorisme sont autant d'éléments qui doivent conduire à repenser le positionnement des activités de recherche et les collaborations. Comme d'autres instituts du CNRS, l'INC a accueilli de nombreux chercheurs réfugiés dans le cadre du programme PAUSE mis en place par le Collège de France, avec des moyens du ministère de l'Enseignement supérieur, de la Recherche et de l'Innovation.

## Intégrité : quelles particularités en chimie ?

Dans le contexte des bouleversements en cours qui changent les conditions d'exercer le métier de chimiste académique, les questions d'intégrité scientifique sont devenues prégnantes dans la recherche et des cas récents ont concerné aussi des laboratoires de chimie, incluant des manipulations de données. Une « zone grise » de mauvaises pratiques recouvre l'embellissement des résultats, la signature d'une publication sans justification réelle [7], les références d'un travail absentes

ou erronées, la dissimulation des conflits d'intérêt dans l'évaluation de travaux scientifiques ou le non-respect de la propriété intellectuelle. Dans le cadre de la procédure mise en place en 2018 au CNRS [8], lorsqu'une fraude est suspectée, tout membre d'un laboratoire peut faire un signalement. S'en suit généralement une enquête qui peut conduire à une procédure disciplinaire envers les protagonistes incriminés. Le nombre croissant de signalements est possiblement lié à l'évolution des conditions d'exercice de la recherche. Le poids des indicateurs bibliométriques, la compétition exacerbée entre équipes concurrentes pour publier ou obtenir des financements avant les autres, la mise en avant systématique de l'excellence... sont autant de moteurs pouvant pousser des chercheurs à la fraude. Une sensibilité de la communauté des chimistes à l'intégrité scientifique est donc indispensable.

### **Horizon à court et moyen termes de l'institut : de l'INC à CNRS Chimie**

Malgré son statut d'organisme national de recherche, le CNRS ne dispose que de crédits limités pour financer la recherche. Ses instituts, et en particulier l'INC, ont décidé de consacrer une partie de la dotation d'état sous forme d'appels à projet (AAP). Dans ce domaine, l'INC a été particulièrement proactif en introduisant dès 2018 l'AAP Emergence@INC et son volet Emergence@International visant à permettre à des chimistes de faire une tournée internationale. Ces deux AAP s'adressent aux chercheurs et enseignants-chercheurs – cinq à dix ans après leur recrutement sur leur poste – qui souhaitent développer un projet novateur par rapport à l'état de l'art et visent à encourager la prise de risque en finançant un contrat de chercheur postdoctoral. Dans la même veine, l'opération Ambassadeurs@INC finance l'accueil de chercheurs étrangers pendant un court séjour dans plusieurs laboratoires de l'INC. Enfin, pour promouvoir l'interdisciplinarité, l'INC et la Mission pour les initiatives transverses et interdisciplinaires du CNRS ont lancé en 2023 un AAP Itinérance@INC qui vise à accueillir durablement des chercheurs d'autres instituts dans ses laboratoires et y développer des projets interdisciplinaires. Même s'ils témoignent du volontarisme de l'institut à exercer avec ses moyens propres une politique scientifique, ces AAP restent de portée modérée, en comparaison notamment à de nouveaux AAP parus récemment, et dans lesquels le CNRS s'est fortement engagé, et risquent d'induire d'importants changements à court terme de l'organisation de la recherche au sein des laboratoires de l'INC.

### **Les programmes et équipements prioritaires de recherche**

Nouvellement introduits, les PEPR sont des financements basés sur emprunts d'État (dans le cas du plan de relance France 2030), qui ont introduit de nouveaux modes de pilotage de la recherche. À la différence des « laboratoires d'excellence » créés en 2009 et qui se sont terminés en 2023, les PEPR sont des programmes nationaux pilotés par les organismes nationaux de recherche comme le CNRS, et dont les financements sont gérés par l'ANR. Ils sont de deux natures : les PEPR des stratégies nationales et les PEPR exploratoires. La première catégorie de PEPR est présentée comme une stratégie d'investissement dirigée en vue d'accélérer des filières critiques.

Ainsi, dix PEPR des stratégies nationales ont été lancés en septembre 2021 pour un total de 702 M€, deux de ces PEPR relevant de l'INC :

#### **PEPR Hydrogène décarboné co-piloté par le CNRS et le CEA**

Travaux destinés à accompagner le déploiement de systèmes hydrogène à travers des analyses de cycle de vie, des études technico-socio-économiques et des aspects de sécurité.

#### **PEPR Recyclabilité, recyclage et réincorporation des matériaux recyclés piloté par le CNRS**

Centré sur cinq matériaux du quotidien – les plastiques, les matériaux composites, les textiles, les métaux stratégiques et les papiers et cartons – il vise à relever les défis écologiques, économiques et technologiques nécessaires à la transition vers une économie circulaire, compétitive et vertueuse.

Les PEPR exploratoires visent quant à eux des secteurs encore émergents avec des travaux de recherche dont les domaines d'application relèvent encore d'hypothèses de travail. À la différence des PEPR des stratégies nationales issus d'une décision gouvernementale, les PEPR exploratoires alimentent des AAP gérés par l'ANR et orientés sur des priorités. Quatre premiers PEPR exploratoires ont été retenus en septembre 2021, dont un pour l'INC comme institut principal.

#### **Dispositifs intégrés pour l'accélération du déploiement de matériaux émergents (DIADEM)**

Copiloté par le CNRS et le CEA, DIADEM vise à accélérer la conception et l'arrivée sur le marché de matériaux plus performants et plus durables, notamment grâce à l'intelligence artificielle.

Lors de la vague 2 en 2022, treize autres PEPR ont été lauréats, dont le programme « Lumière et matière », copiloté par le CNRS et le CEA, qui vise à étudier, comprendre et développer la lumière comme moyen d'explorer et de contrôler des systèmes physico-chimiques et biologiques et de favoriser l'émergence de technologies vertes. Il existe également des PEPR de stratégie d'accélération de la recherche et l'innovation sur des sujets prioritaires pour la France, en termes d'emploi, d'activité ou de souveraineté.

Parmi ceux-ci, deux autres PEPR concernent les chimistes. Le PEPR SPLEEN, copiloté par le CNRS et l'Institut français du pétrole et énergies nouvelles (IFPEN), vise à mettre en œuvre des actions de recherche permettant de rendre les procédés industriels moins émetteurs de gaz à effet de serre via des vecteurs énergétiques décarbonés, de favoriser les procédés de stockage, de séparation et de conversion du CO<sub>2</sub> en molécules d'intérêt. Le PEPR TASE, copiloté par le CNRS et le CEA, a quant à lui pour objectif de lever les verrous technologiques pour développer des réseaux d'énergie flexibles et résilients, ainsi que des cellules photovoltaïques à haut rendement et à impact environnemental minimisé.

Si les PEPR s'avèrent être des éléments importants dans le paysage de la recherche académique française en chimie, le CSI s'est néanmoins interrogé sur l'effet déstabilisant que pourrait présenter ce nouveau mode de financement des recherches par des projets toujours plus déterminés par les applications en aval, ce pourquoi il a réaffirmé dans son rapport de prospective et dans plusieurs de ses recommandations la nécessité de poursuivre un financement pérenne des unités de recherche du CNRS, ainsi qu'une structuration

de la science chimique par ses sous-disciplines décrites par les sections de chimie du Comité national de la recherche et par les divisions de la Société chimique de France, plutôt que par les enjeux ou domaines d'applications de la chimie [9].

[1] [www.gdr.chemobiologie.cnrs.fr](http://www.gdr.chemobiologie.cnrs.fr)

[2] Recommandations du CSI de l'INC CNRS : [www.cnrs.fr/comitenational/csi/reco/inc.htm](http://www.cnrs.fr/comitenational/csi/reco/inc.htm)

[3] [www.cbm.cnrs-orleans.fr/wp-content/uploads/2023/04/Fiche\\_Science\\_Ouverte\\_INC\\_2023\\_VF-1.pdf](http://www.cbm.cnrs-orleans.fr/wp-content/uploads/2023/04/Fiche_Science_Ouverte_INC_2023_VF-1.pdf)

[4] M. Jaoul-Grammare, S. Macaire, Étudier le devenir professionnel des docteurs. Groupe de travail sur l'enseignement supérieur, *Céreq Échanges*, 2016, 2. [www.cereq.fr/etudier-le-devenir-professionnel-des-docteurs-groupe-de-travail-sur-lenseignement-superieur](http://www.cereq.fr/etudier-le-devenir-professionnel-des-docteurs-groupe-de-travail-sur-lenseignement-superieur)

[5] O. Wolber, P. Zedam, Devenir des docteurs trois ans après : les indicateurs par discipline, *Note d'information du SIES*, 2017, 10. [www.enseignementsup-recherche.gouv.fr/sites/default/files/imported\\_files/documents/NI\\_IPDoc\\_experimentale\\_num\\_17.10\\_860923.pdf](http://www.enseignementsup-recherche.gouv.fr/sites/default/files/imported_files/documents/NI_IPDoc_experimentale_num_17.10_860923.pdf)

[6] S. Pommier *et al.*, Le doctorat en France. Regards croisés sur la formation doctorale, *Rapport de recherche RNCD*, 2022. <https://hal.science/hal-03494721>

[7] <https://coop-ist.cirad.fr/etre-auteur/definir-les-auteurs/1-qui-est-auteur-d-une-publication-les-quatre-conditions>

[8] [www.cnrs.fr/fr/le-cnrs/responsabilites/responsabilite-de-recherche](http://www.cnrs.fr/fr/le-cnrs/responsabilites/responsabilite-de-recherche)

[9] <https://rapports-du-comite-national.cnrs.fr/rapports-de-prospective/>

### Le Conseil scientifique de l'Institut de chimie, CNRS

Mandature 2019-2023 : Olivier SANDRE\* (président), Christophe INNOCENT (secrétaire scientifique) et ses membres (les trois premiers appartenant au bureau) : Lavinia BALAN, Dominique HARAKAT, Philippe LESOT, Marylène BERTRAND-URBANIAK, Roberta BONGIOVANNI, Catherine DEBIEMME-CHOUVY, Marie-Hélène DELVILLE, Anne DOLBECQ-BASTIN, Sylvie FOUCAUD, Marion GIROD, Ali ABOU-HASSAN, Emmanuel LACOTE, Éric LEROY, François MAUREL, Claude NIEBEL, Jean-Pierre PEREIRA RAMOS, Claude PIGUET, Alain RIVES, Jean-Yves SALPIN, Vincent SCHANEN, Lorenzo STIEVANO et Patricia VICENDO.

\*Contact : [olivier.sandre@enscbp.fr](mailto:olivier.sandre@enscbp.fr)