

Projet de thèse conjoint Laboratoire de Bioénergétique et Ingénierie des Protéines/Institut Universitaire des Systèmes Thermiques Industriels

La mise en œuvre des procédés biotechnologiques appliqués au domaine de la chimie verte est une des voies prometteuse de production de combustible énergétique. La compréhension des mécanismes et l'optimisation des étapes de transformation sont des enjeux majeurs pour une application à l'échelle industrielle.

Dans ce cadre, la réduction de CO₂ en CO par la CO déshydrogénase (CODH) qui est une enzyme à Nickel [1] constitue la première étape pour la synthèse de carburants carbonés à partir de CO₂ atmosphérique. La CODH permet une catalyse très rapide et efficace sur le plan énergétique, cependant une connaissance approfondie de son mécanisme catalytique (qui est pour l'instant mal connu) permettrait de nourrir les recherches des chimistes dans le domaine de la conception de catalyseurs pour la réduction de CO₂. Par ailleurs, une meilleure connaissance de cette enzyme permettrait son utilisation directe dans des dispositifs biotechnologiques.

L'étude de la CODH a commencé [2] dans l'équipe Dynamique des enzymes rédox multicentres au laboratoire de Bioénergétique et Ingénierie des Protéines (BIP), en utilisant l'électrochimie directe des protéines, une technique que cette équipe est la seule à maîtriser en France [3]. Cette technique consiste à immobiliser une enzyme sur une électrode, la mettre en présence de son substrat (ici du CO₂ ou du CO) et enregistrer le courant catalytique qu'elle produit. L'équipe du BIP a montré qu'on peut obtenir des informations pertinentes sur le mécanisme enzymatique en analysant quantitativement la manière dont le courant stationnaire dépend des paramètres expérimentaux[4].

Ce projet propose de fédérer l'équipe du BIP et l'équipe TCM (Transferts de Chaleur et de Masse) de l'IUSTI afin de concevoir et de réaliser un nouveau dispositif permettant d'aller plus loin que qui est déjà réalisé dans l'équipe du BIP, puisqu'il s'agira d'étudier les transitoires de la réponse enzymatique à des changements brusques de concentration en réactifs au voisinage de l'électrode. Ce projet est ambitieux, tant sur le plan expérimental, puisqu'il sera nécessaire de faire varier les concentrations à l'électrode sur des échelles de temps inférieures à la milliseconde, que sur le plan théorique, puisque les méthodes d'analyse des courants qui résulteront de ces expériences restent encore à développer. La configuration géométrique et les paramètres de fonctionnement seront déterminés à l'aide des outils de simulation numérique de l'équipe TCM. Au laboratoire IUSTI, sous la direction de Jerome Vicente, le doctorant s'attèlera à concevoir les détails de la géométrie de la cellule, et à en caractériser les paramètres de fonctionnement, d'abord *in silico* en utilisant des outils de modélisation tridimensionnelle numériques de l'équipe, en élaborant un modèle et en concevant un prototype de cellule [5,6]. Au BIP, sous la direction de Vincent Fourmond, le doctorant utilisera la nouvelle cellule pour l'étude de la CODH et développera le cadre théorique nécessaire pour interpréter les données afin d'obtenir des informations sur le mécanisme de la CODH.

[1] Jeoung, J.-H. & Dobbek, H. *Science*, **2007**, *318*, 1461-1464

[2] Hadj-Saïd, J; Pandelia, ME; Léger, C; Fourmond, V & Dementin, S., *soumis*

[3] Léger C & Bertrand P, *Chem Rev*, **2008**, *108*, 2379-2438

[4] Fourmond, V.; *et al. J. Am. Chem. Soc.*, **2013**, *135*, 3926-3938

[5] Vicente, J.; Daurelle, J.-V.; Brossard, G.; Blom, A.; Douteur, A.; Delmotte, Y. & Brun, E. *Chemical Engineering Science*, **2012**, *72*, 172-178

[6] Cano, G.; Steinle, P.; Daurelle, J.; Wyart, Y.; Glucina, K.; Bourdiol, D. & Moulin, P. *Journal of Membrane Science*, **2013**, *431*, 221-232