

**Criblage et identification de nouveaux descripteurs de réactivité de la biomasse lignocellulosique par fractionnement (LCxLC) bio-guidé combiné à la spectrométrie de masse haute résolution (HRMS) et la spectroscopie de résonance magnétique nucléaire (RMN)**

**Mots clés** : Spectrométrie de masse haute résolution, chromatographie en phase liquide bidimensionnelle, chromatographie en phase liquide semi-préparative, spectroscopie de résonance magnétique nucléaire, biomasse lignocellulosique.

**Contexte et objectifs** :

Pour répondre aux défis du domaine de l'énergie, IFPEN travaille à la transformation de la biomasse lignocellulosique en biocarburants et en molécules plateformes biosourcées. La caractérisation de certains composés encore non identifiés à ce jour permettrait d'améliorer les performances des procédés mis en jeu. Cependant, la complexité chimique de ces matrices (nombre de composés, gammes de polarité, masses moléculaires) en limite leur caractérisation moléculaire détaillée. Au cours de ces dernières années, des travaux importants ont été mis en oeuvre à IFPEN pour proposer des approches analytiques innovantes permettant d'obtenir une déformulation complète des échantillons issus de la conversion de la biomasse. Des cartographies multi dimensionnelles (LCxLC-UV/HRMS) décrivant la composition des échantillons sont ainsi accessibles, faisant apparaître la présence de plusieurs centaines de composés. Il est maintenant nécessaire de proposer une méthodologie qui permette de pointer les composés d'intérêts parmi ces centaines de composés, de les identifier au niveau structural puis de les quantifier. Le sujet proposé consiste donc à utiliser des tests de réactivité biologique pour cribler les composés dans les fractions issues de la première dimension de séparation (LC). Les fractions contenant les produits cibles seront ensuite utilisées spécifiquement à une échelle d'analyse semipréparative qu'il faudra développer, dans le but d'isoler ces composés. Enfin, une approche combinant notamment la HRMS et la spectroscopie de résonance magnétique nucléaire (RMN) permettra d'accéder à leur identification structurale. Pour mener à bien ces travaux de recherche originaux, des outils scientifiques de pointe seront mis à disposition pour aboutir à une analyse multi techniques et un retraitement de données complexes avancé. La méthodologie complète mise au point sera alors appliquée à un panel riche et représentatif d'échantillons d'intérêt pour les projets Biomasse de IFPEN. L'apport attendu pour ces projets est important puisque des informations inédites sur la réactivité des matrices ou la découverte de nouvelles molécules seront désormais accessibles, donnant alors accès à des avancées clefs pour la production de molécules bio-sourcées.

**Compétences recherchées** : Docteur en chimie analytique, expérience accrue dans l'interprétation des spectres RMN et HRMS, expérience pratique des techniques séparatives par chromatographie en phase liquide. Goût pour l'expérimentation, le travail en équipe, fort intérêt pour l'exploitation de spectres, traitement de données. Bonne maîtrise de l'anglais (écrit, oral).

**Structure d'accueil** : IFPEN, Rond-point de l'échangeur de Solaize, 69360 Solaize

**Date de prise de fonction souhaitée** : fin 2019-début 2020

**Contact** : Dr Agnès Le Masle, [agnes.le-masle@ifpen.fr](mailto:agnes.le-masle@ifpen.fr), 04.37.70.23.91

**Candidature** : avant le 30 août 2019, envoi CV détaillé, lettre de motivation, lettres de recommandation.