



## OFFRE DE THESE (CIFRE)

### Caractérisation de la composition moléculaire de ressources naturelles - Développement d'une approche quantitative non ciblée par RMN

Lieu de travail : Reims, Marne, France

Mots clés : Substances naturelles; Ingrédients biosourcés; Profilage chimique; Déréplication; Quantification; Résonance Magnétique Nucléaire

#### Description du sujet

Les ingrédients biosourcés sont des mélanges moléculaires complexes issus principalement de biomasses végétales (ex : plantes aromatiques et médicinales, ressources brutes ou co-produits agricoles, sylvicoles, viticoles). La caractérisation moléculaire de ces ressources est une étape importante pour déterminer leur potentiel de valorisation, identifier les composés actifs, orienter les conditions d'extraction et s'assurer de la non-toxicité du produit fini.

C'est dans ce contexte que NatExplore développe des stratégies analytiques innovantes pour le profilage phytochimique d'ingrédients naturels. NatExplore utilise en particulier une technologie originale qui repose sur l'exploitation de données de Résonance Magnétique Nucléaire (RMN), permettant d'obtenir la composition moléculaire globale et détaillée d'extraits naturels. Aujourd'hui cette technologie est très robuste en terme de caractérisation, mais elle ne permet pas de préciser la concentration des molécules détectées, simultanément au processus d'identification. L'objectif de ce travail de thèse sera de faire évoluer la technologie en une approche quantitative. Ce travail nécessitera de combiner des développements méthodologiques conséquents en spectroscopie RMN, en sciences séparatives et en chimiométrie. Il s'agira pour le (la) doctorant(e) de contribuer activement à la mise en place d'outils quantitatifs de profilage chimique d'échantillons naturels par RMN, et de rendre ces outils utilisables en routine sur tous types d'extraits.

#### Structures d'accueil

La thèse sera réalisée entre l'équipe de Chimie des Substances Naturelles et de l'Environnement (CSNE) de l'Institut de Chimie moléculaire de Reims (ICMR, UMR CNRS 7312, Université de Reims Champagne-Ardenne) et la société NatExplore.

L'ICMR est un institut de recherche dans lequel divers aspects fondamentaux de la chimie moléculaire sont étudiés : méthodologie de synthèse, réactivité et ingénierie moléculaire, chimie verte, méthodes analytiques avancées, avec de nombreux projets en interface avec la chimie fine, la valorisation de la biomasse, les sciences de la vie, les sciences de l'environnement et des matériaux. L'étude de mélanges naturels complexes et les développements méthodologiques associés sont au centre des activités de l'équipe CSNE impliquées dans ce projet de thèse.

NatExplore est une Jeune Entreprise Innovante spécialisée en Recherche & Développement dans le domaine des Sciences Analytiques. Sa principale activité consiste à réaliser des études de profilage moléculaire de ressources naturelles pour des fabricants d'ingrédients naturels en connexion avec des secteurs tels que la pharmacie, les cosmétiques, la phytothérapie, les nutraceutiques ou le secteur des bio solutions pour l'agriculture.

Le ou la doctorant(e) sera encadré(e) équitablement par les deux structures d'accueil localisées sur le même campus.

#### **Profil du (de la) candidat(e)**

Issu(e) d'une formation supérieure scientifique de niveau Master 2 minimum, le ou la candidate devra disposer de bonnes connaissances en chimie moléculaire et chimie analytique (RMN et LC/MS haute résolution notamment) appliquées aux substances naturelles. Des compétences complémentaires en programmation et chimiométrie seront appréciées.

Nous recherchons un profil curieux, dynamique et rigoureux, et heureux de travailler en équipe.