



© CNRS Photothèque - Jean-François Dars.

CHIMIE

• DÉPARTEMENT DE CHIMIE MOLÉCULAIRE (DCM)
CNRS / UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER GRENOBLE 1
• LABORATOIRE DES CHAMPS MAGNÉTIQUES INTENSES (GHMFL-LCMI)
CNRS
GRENOBLE
<http://zurbaran.ujf-grenoble.fr/spip/index.html>
<http://ghmfl.grenoble.cnrs.fr/>

Elle court entre deux salles de manips, passe un coup de téléphone pour l'organisation d'une conférence, relance sur son ordinateur un nouveau calcul qui finira demain... Carole Duboc, 36 ans, est une fonceuse à qui tout semble réussir. Pourtant, sa carrière de chimiste naît d'un échec, celui qu'elle essuie au concours de médecine. Passée la déception, la jeune femme rebondit et se dirige vers une passion naissante, la biochimie.

Un stage de maîtrise au LEDSS¹ dans l'équipe de Marc Fontecave fait office de révélation. Séduite par les sujets à l'interface de la biologie et de la chimie, elle oriente son DEA puis sa thèse vers le domaine du biomimétisme. Il s'agit d'essayer de reproduire l'activité d'une métallo-enzyme en recréant la structure du site actif à l'aide de petits objets moléculaires. « Les outils développés doivent permettre de comprendre les mécanismes biologiques. Du côté de la chimie, on

peut aussi espérer développer de nouveaux catalyseurs à partir des systèmes bio-inspirés. » Après une thèse consacrée à la réactivité chimique de complexes de fer, ce sont des systèmes à base de cuivre qui occupent son année de post-doc, dans le laboratoire du professeur Tolman à Minneapolis. « Le rôle des métaux est un sujet très vaste qui me passionne. Ils sont essentiels dans le fonctionnement de nombreux systèmes biologiques. »

En 1999, le Laboratoire des champs magnétiques intenses de Grenoble a besoin d'une biochimiste. Le challenge n'est pas mince puisqu'il s'agit de mettre en contact la communauté des chimistes et des biologistes avec celle des physiciens qui utilisent une technique spectroscopique de pointe, la résonance paramagnétique électronique à haute fréquence (RPE-HF). Une fois de plus, c'est l'aspect pluridisciplinaire qui séduit la biochimiste, recrutée au CNRS l'année suivante. L'utilisation de champs magnétiques extrêmement élevés (jusqu'à 30 Tesla, soit plus de 600 000 fois le champ magnétique terrestre) lui permet d'établir des corrélations inédites entre la structure électronique locale des complexes de métaux de transition et leur structure cristallographique.

« LE RÔLE DES MÉTAUX EST UN SUJET TRÈS VASTE QUI ME PASSIONNE. ILS SONT ESSENTIELS DANS LE FONCTIONNEMENT DE NOMBREUX SYSTÈMES BIOLOGIQUES. »

Mais la chercheuse ne se satisfait pas de ces résultats :

« Il m'est apparu évident qu'il fallait associer mes mesures à des calculs théoriques. » Elle effectue donc plusieurs séjours dans un groupe réputé en Allemagne et se familiarise avec deux méthodes de calcul théorique (*ab initio* et DFT²) qui lui permettent de donner une interprétation microscopique de ses résultats expérimentaux. Résultat : « À partir d'un seul spectre RPE-HF, nous sommes désormais capables de proposer des informations précises sur la sphère de coordination d'un complexe du manganèse (III), par exemple. »

En 2007, Carole Duboc vient de rejoindre le département de chimie moléculaire (DCM) sur le campus grenoblois, pour revenir à ses anciennes amours, plus « chimiques » : le biomimétisme et la réactivité. Sans pour autant abandonner la RPE, ni les calculs théoriques qu'elle continue à investiguer.

¹ Laboratoire d'études dynamiques et structurales de la sélectivité.

² Théorie de la fonctionnelle de la densité.