

Recherche

Travaux réalisés par l'équipe Biocatalyse (Grenoble) dirigée par M. Fontecave

L'équipe, intitulée Biocatalyse, animée par Marc Fontecave, fait partie du Laboratoire de Chimie et Biologie des Métaux (UMR Université Joseph Fourier-CEA-CNRS n° 5249, Directeur Stéphane Ménage) localisé sur le Centre du CEA à Grenoble. Elle est constituée actuellement de 9 chercheurs et enseignant-chercheurs permanents (chercheurs CEA : V. Artero, M. Atta; 2 enseignant-chercheurs : M. Fontecave, C. Gerez ; chercheurs CNRS : E. Mulliez, S. Ollagnier-de-Choudens, F. Pierrel, M. Chavarot-Kerlidou, J. Willison) et 2 personnels ITA (N. Atta, J. Fize).

Etudiants en these: M.H. Chehade, A. Chan, T. Molle

Post-Doc : T. Simmons, G. Berggren, B. Blanc, D. Bouvier, M. Bacchi

On peut résumer l'ensemble des activités de l'équipe au cours de l'année 2012-2013 selon les 2 axes de recherche suivants :

A. Protéines fer-soufre: fonctions et maturation (M. Fontecave, E. Mulliez, M. Atta, S. Ollagnier-de-Choudens, C. Gerez, G. Berggren, B. Blanc, D. Bouvier).

A.1 Enzymologie structurale et mécanistique des enzymes fer soufre. Nous nous intéressons aux enzymes fer-soufre impliquées dans des modifications complexes et sélectives de macromolécules biologiques. La caractérisation de ces systèmes est à la fois structurale et fonctionnelle et permet de mettre à jour des mécanismes enzymatiques originaux. Il s'agit par exemple de la methylothioferase RimO, qui catalyse la thiométhylation d'une protéine ribosomale, la protéine S12, et la méthylthioferase MiaB, qui catalyse une thiométhylation d'un ARN de transfert¹. Il s'agit aussi de l'enzyme TTcA, qui catalyse une réaction de sulfuration d'ARNs de transfert².

Une autre protéine fer soufre à l'étude est HydF qui participe à la maturation des hydrogénases. Ce travail a conduit à des caractérisations spectroscopiques originales de la coordination de ligands azotés, comme l'histidine, au centre fer-soufre³.

A.2 Assemblage des centres fer-soufre. On sait depuis peu que les cellules disposent de machineries protéiques complexes pour la biosynthèse et l'assemblage des centres

¹ F. Forouhar, S. Arragain, M. Atta, S. Gambarelli, J.-M. Muesca, M. Hussain, R. Xiao, S. Kieffer-Jaquinod, J. Seetharaman, T. B. Acton, G. T. Montelione, E. Mulliez, J. F. Hunt, M. Fontecave. *Nature Chemical Biology* 2013, **9**, 333-338

² D. Bouvier, N. Labessan, M. Clemancey, J.-M. Latour, J.-L. Ravanat, M. Fontecave, M. Atta
Nucleic Acid Res. 2014, **42**, 7960-70

³ G. Berggren, R. Garcia, X. Brazzolotto, M. Clemancey, S. Gambarelli, M. Atta, J.-M. Latour, H. L. Hernández, S. Subramanian, M. K. Johnson, M. Fontecave
J. Biol. Inorg. Chem. 2014, **19**, 75-84

métalliques au sein de sites actifs d'enzymes. Certaines pathologies sont liées à des déficiences dans ces systèmes essentiels. L'étude de ces complexes protéiques et de leurs mécanismes d'action constituent un sujet prioritaire de l'équipe depuis plusieurs années.

Nous nous intéressons en particulier aux machineries protéiques complexes de biosynthèse des clusters fer-soufre, en particulier chez *E. coli*, qui comporte un système général d'assemblage des clusters, appelé ISC, ainsi qu'un système, appelé SUF, fonctionnel dans des conditions de stress (stress oxydant, carence en fer,...). Nous étudions en particulier comment ces différents systèmes sont finement régulés, à travers la mise en œuvre de facteurs protéiques de transcription, comme les protéines IscR et NsrR, qui sont elles-mêmes des protéines fer-soufre⁴.

B. Nouveaux (photo)électrocatalyseurs pour la production et l'oxydation de l'hydrogène (V Artero, M. Chavarot-Kerlidou, M. Fontecave, J. Fize, T. Simmons, M. Bacchi)

Le développement de « l'économie à hydrogène » nécessite en particulier la mise au point de nouveaux catalyseurs pour la production d'hydrogène par réduction de l'eau (électrolyse) et pour l'oxydation de l'hydrogène en eau (pile à combustible). En effet le platine actuellement utilisé est coûteux et peu abondant. Les organismes vivants qui mettent en œuvre cette chimie utilisent des métalloenzymes remarquablement efficaces, les hydrogénases, des métallo-enzymes à base de fer et de nickel. Le projet de recherche que nous développons depuis de nombreuses années consiste à inventer de nouveaux catalyseurs en nous inspirant des sites actifs de ces enzymes, à en évaluer les propriétés catalytiques pour l'électro-réduction des protons et à les utiliser dans des dispositifs pour des applications pratiques (nouvelles électrodes modifiées, nouvelles piles). La logique de cette approche bioinspirée a été récemment expliquée dans une série d'articles de revue⁵.

L'ensemble du projet est animé par V. Artero, à grenoble. Les catalyseurs les plus étudiés actuellement au laboratoire sont les complexes dinucléaires de nickel et ruthénium⁶, ainsi que des complexes mononucléaires de cobalt (cobaloximes, diimine-dioxime de cobalt) (Figure 1)⁷. Ces catalyseurs moléculaires sont exploités comme électrocatalyseurs, en solution ou greffés sur des nanotubes de carbone, ces derniers leur conférant une plus grande stabilité et améliorant leurs propriétés catalytiques (faibles surtensions par exemple)⁸.

⁴ D. Vinella, L. Loiseau, S. Ollagnier de Choudens, M. Fontecave and F. Barras *Mol. Microbiol.* 2013, **87**, 493-508

⁵ V. Artero, M. Fontecave *Chem. Soc. Rev.* 2013, **42**, 2338-2356; T. R. Simmons, G. Berggren, M. Bacchi, M. Fontecave, V. Artero *Coord. Chem. Rev.* 2014, **270-271**, 127-150

⁶ S. Canaguier, V. Fourmond, C. Perotto, J. Fize, J. Pécaut, M. Fontecave, M. J. Field, V. Artero *Chem. Commun.* 2013, **49**, 5004-5006

⁷ A. Bhattacharjee, E. S. Andréiadis, M. Chavarot-Kerlidou, M. Fontecave, M. J. Field, V. Artero *Chem. Eur. J.* 2013, **19**, 15166-15174

⁸ E. S. Andreiadis, P.-A. Jacques, P.D. Tran, A. Leyris, M. Chavarot-Kerlidou, B. Jusselme, M. Matheron, J. Pécaut, S. Palacin, M. Fontecave, V. Artero *Nature Chemistry* 2013, **5**, 48-53

Ces nanomatériaux catalytiques fournissent des matériaux d'électrodes très intéressants pour le développement d'électrolyseurs.

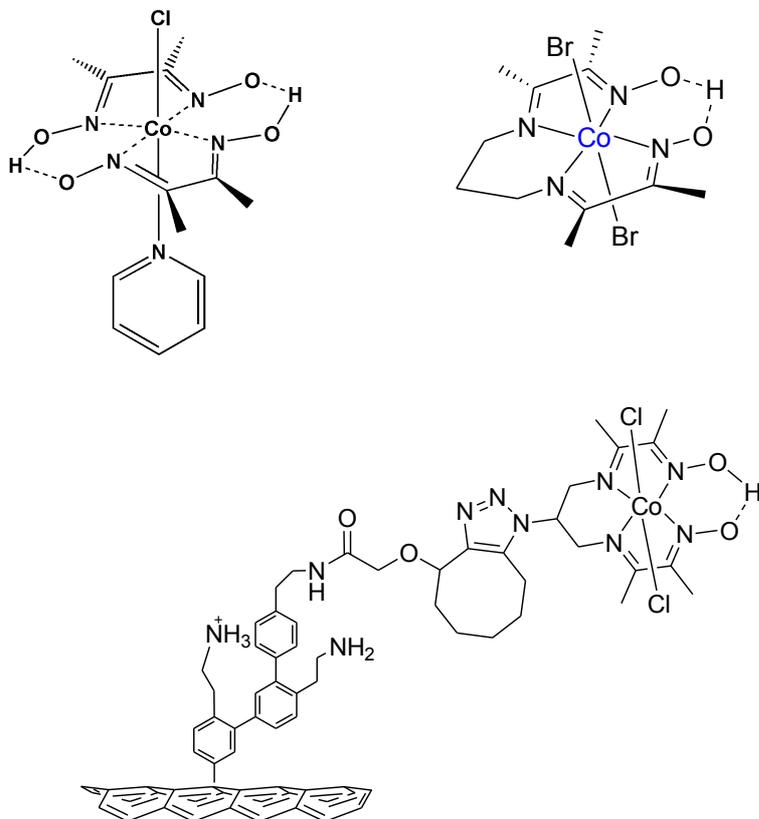


Figure 1 : catalyseurs de réduction de l'eau en hydrogène à base de cobalt. La di-imine di-oxime de cobalt peut être greffée sur des nanotubes de carbone (en bas).

Plus récemment, nous avons démarré un projet consistant à mettre au point des hydrogénases artificielles. Il s'agit ici de créer un système hybride qui est constitué d'une protéine et d'un catalyseur biomimétique de synthèse. Une première réalisation a consisté en la préparation d'un tel système en combinant la myoglobine et une cobaloxime, la cobaloxime prenant la place de l'hème dans le site actif. Cet hybride est capable de catalyser la réduction et la photoréduction des protons en hydrogène, se comportant ainsi comme une hydrogénase⁹.

Enfin, nous avons également construit d'autres systèmes protéiques hybrides en utilisant des complexes biomimétiques des hydrogénases à fer, c'est-à-dire des complexes organométalliques binucléaires de fer. De tels complexes ont pu être insérés dans la cavité protéique de la protéine HydF (Figure 4). Ce qui est remarquable c'est que cet hybride a l'étonnante propriété de faciliter l'incorporation du complexe biomimétique dans une apo-

⁹ Marine Bacchi, G. Berggren, J. Niklas, E. Veinberg, M. W. Mara, M. L. Shelby, O. G. Poluektov, L. X. Chen, D. M. Tiede, C. Cavazza, M. J. Field, M. Fontecave, Vincent Artero *Inorg. Chem.* 2014 (sous presse)

hydrogénase (apoHydA). Avec l'un des complexes (le complexe **3** de la Figure 2), l'hydrogénase reconstituée possède des activités enzymatiques comparables à l'enzyme naturelle. Jusqu'à présent ces hydrogénases ne pouvaient être maturées qu'*in cellulo*, grâce à l'intervention d'une machinerie protéique cellulaire complexe de maturation spécifique, encore incomplètement connue. Les applications de ce travail sont nombreuses : étude de la maturation et caractérisation du site actif des hydrogénases, « invention » d'hydrogénases non naturelles, criblage simplifié d'hydrogénases issues de la biodiversité, mise au point d'hydrogénases artificielles. Ce travail a fait l'objet de deux articles à *Nature* et *Nature Chemical Biology* en 2013¹⁰.

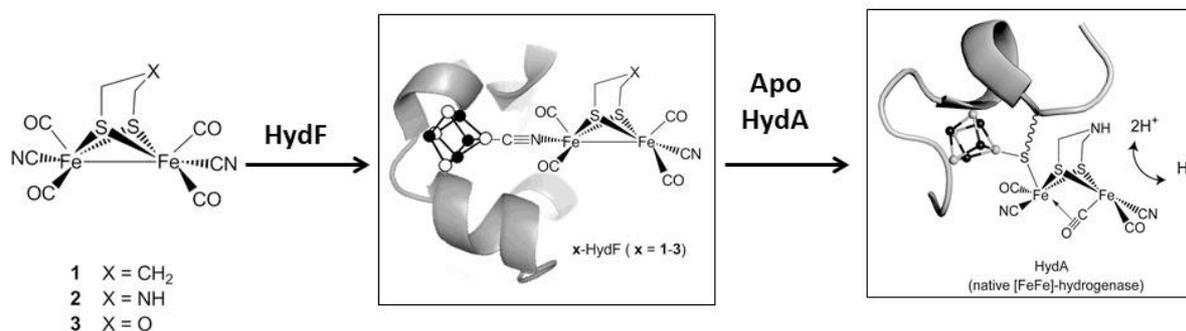


Figure 2 : Une métalloprotéine hybride (structure centrale) peut être construite à partir de la protéine HydF et d'un complexe biomimétique de synthèse (1-3) et être utilisée pour incorporer le complexe de synthèse (structure à gauche) dans une apo-hydrogénase (HydA) pour donner une hydrogénase active (à droite), dans le cas où x= NH.

¹⁰ G. Berggren, A. Adamska, C. Lambertz, T. Simmons, J. Esselborn, M. Atta, S. Gambarelli, J-M. Mouesca, E. Reijerse, W. Lubitz, T. Happe, V.Artero, M. Fontecave *Nature*, 2013, **499**, 66-70; J. Esselborn, C. Lambertz, A. Adamska, T. Simmons, G. Berggren, J. Noth, J. Siebel, A. Hemschemeier, V. Artero, E. Reijerse, M. Fontecave, W. Lubitz, T. Happe *Nature Chemical Biology* 2013, **9**, 607-609

Travaux réalisés par le laboratoire de chimie des processus biologiques (Collège de France) dirigé par M. Fontecave

Le laboratoire, est devenu à partir du 1^{er} janvier 2014 l'UMR 8229, sous les tutelles conjointes du Collège de France, du CNRS et de l'Université P et M Curie. Il est constitué actuellement de 10 chercheurs et enseignant-chercheurs permanents (1 enseignant-chercheur : M. Fontecave; 4 chercheurs CNRS : C. Mellot-Drazniek , B. Golinelli, M. Lombard, D. Hamdane ; 2 Ingénieurs de recherche CNRS : Y. Xu-Li, P. Simon ; 1 Ingénieur de recherches Collège de France : L. Pecqueur, 1 Ingénieur d'Etudes Collège de France : M. Smadja ; 1 technicien administratif : B. Lehoux).

Etudiants en these: N. Elgrishi, JP Porcher, A. Ismail, L. Gonzales, G . Caserta, P. Hardouin
Post-Docs : M. Chambers, M. Gomes-Mingot

On peut résumer l'ensemble des activités de l'équipe au cours des années 2013-2014 selon les 3 axes de recherche suivants :

A. Etude des enzymes de modification des ARNs (D. Hamdane, B. Golinelli, M. Fontecave, L. Pecqueur)

Il s'agit de comprendre, à travers des études mécanistiques et la détermination de structures tridimensionnelles enzyme-substrat(ARNt), comment ces enzymes procèdent pour des transformations chimiques parfois fascinantes et accèdent à une très grande sélectivité. Par ailleurs, certaines de ces modifications jouent des rôles physiologiques importants et ces projets ont des implications dans le domaine de la santé. Pour ce faire, nous avons mis en place une place au Collège de France une plate-forme de cristallisation de protéines. Par exemple, nous étudions une nouvelle classe d'enzymes de méthylation d'ARNt utilisant le méthylène-tétrahydrofolate comme donneur de méthylène et la flavine (FAD) comme agent réducteur. Des études mécanistiques très récentes du laboratoire sur l'enzyme TrmFO ont démontré une utilisation très originale, jamais observée auparavant, de la flavine dans le transfert de méthyle. En effet l'enzyme stabilise un adduit protéine-FAD dans lequel un méthylène est lié d'un côté au N5 de la flavine et de l'autre côté au soufre d'une cystéine du site actif (Figure 3). Nous avons pu montrer que cet adduit était activé par une réaction de protonation du soufre de la cystéine conduisant à la méthylation de l'ARNt substrat¹¹.

¹¹ D. Hamdane, E. Bruch, S. Un, M. Field, M. Fontecave *Biochemistry* 2013, 52, 8949-8956

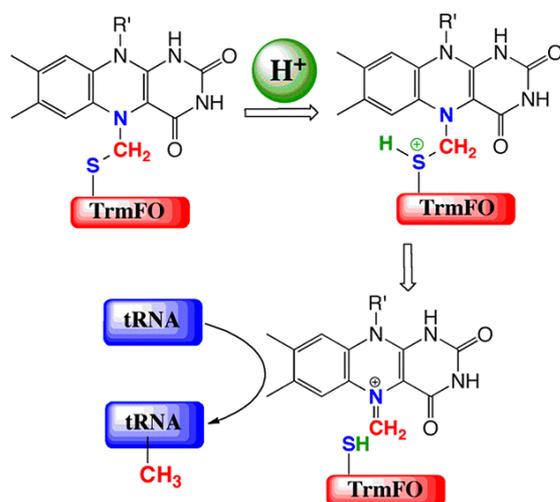


Figure 3 : Réaction catalysée par TrmFO. L'adduit TrmFO-CH₂-FAD est activé par protonation eest responsable de la méthylation de l'uridine.

B. Etude des enzymes de la biosynthèse de l'ubiquinone (M. Lombard, B. Golinelli, C. Mellot-Drazniek, M. Smadja, A. Ismael, L. Gonzales, L. Pecqueur)

Un nouveau projet développé au Collège de France concerne *l'enzymologie de la biosynthèse de l'ubiquinone ou Coenzyme Q* en utilisant le modèle bactérien *Escherichia coli* ainsi qu'un modèle eucaryote, la levure. Ce projet s'appuie sur une collaboration avec F. Barras (CNRS Marseille), microbiologiste, spécialiste de la génétique d'*E. coli*, et F. Pierrel, CR CNRS à Grenoble, qui développe des approches génétiques sur le modèle levure. Ceci est pertinent car il y a une très grande conservation de la biosynthèse du coenzyme Q (notamment entre la levure et l'homme, et en partie avec *E. coli*). De façon étonnante, on sait encore très peu de choses sur cette voie de biosynthèse, aussi bien chez les bactéries que chez les eucaryotes, notamment en ce qui concerne les enzymes impliquées dans les différentes étapes de la biosynthèse : réactions d'hydroxylation aromatique, de méthylation, de décarboxylation et de désamination sur le même noyau aromatique du 4-hydroxybenzoate (4-HB) ou du 4-aminobenzoate, les précurseurs. Un article de revue récent fait le point sur cette voie biosynthétique¹².

Les premiers résultats concernent :

- La découverte et l'étude d'un nouveau gène essentiel (VisC appelé Ubil) pour la biosynthèse de l'ubiquinone chez *E. coli*. La protéine correspondante a été identifiée comme une monooxygénase, de la famille des monooxygénases à flavine,

¹² F. Barras, L. Aussel, F. Pierrel, L. Loiseau, M. Lombard, M. Fontecave *Biochim. Biophys. Acta, Bioenergetics* 2014, **1837**, 1004-1011

responsable de l'hydroxylation du noyau aromatique en C5. La protéine a pu être cristallisée¹³. VisC/Ubil est la première protéine dont la structure tridimensionnelle a été obtenue sur la plate-forme de cristallographie du Collège de France (Figure 7). L'étude du site actif par les techniques de modélisation moléculaire ont permis de déterminer la structure du site flavinique (FAD) (Figure 4).

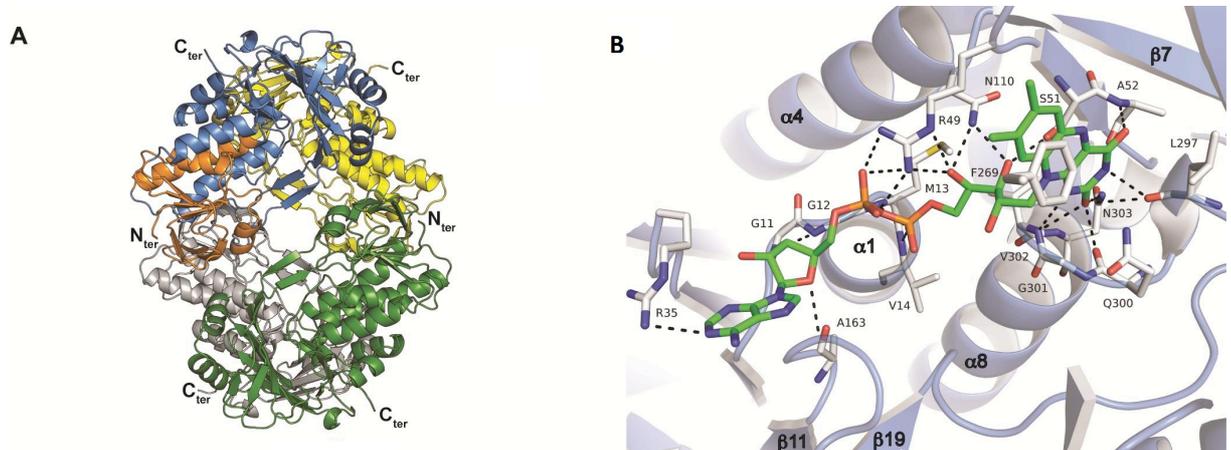


Figure 4 : Structure cristallographique de VisC/Ubil (A : structure du tétramère, B : site de fixation potentiel du FAD dans la protéine).

- La découverte d'un autre gène, de fonction encore inconnue, important pour la biosynthèse de l'ubiquinone et que nous avons appelé UbiJ. L'originalité de ce résultat réside dans la découverte que des bactéries pathogènes, de type *Salmonella* par exemple, étaient rendues inoffensives par inactivation du gène *ubiJ* et la démonstration, pour la première fois, d'un lien entre pathogénicité bactérienne et biosynthèse de l'ubiquinone¹⁴. Ceci ouvre des perspectives nouvelles dans le domaine de la recherche de nouveaux antibiotiques puisque, par exemple, UbiJ, une cible potentielle, est absent chez l'homme.

C. Photosynthèse artificielle : étude de catalyseurs moléculaires et matériaux catalytiques pour la décomposition de l'eau et la réduction du CO₂. (Y. Xu-Li, P. Simon, N. Elgrishi, JP Porcher, M. Chambers).

L'autre grand projet concerne la mise au point de systèmes de stockage des énergies renouvelables (solaire en particulier)¹⁵. Cela passe par la mise au point de catalyseurs moléculaires ou solides pour la réduction de l'eau ou du CO₂.

¹³ M. Hajj Chéhade, L. Loiseau, M. Lombard, L. Pecqueur, A. Ismail, M. Smadja, B. Golinelli-Pimpaneau, C. Mellot-Drazniéks, O. Hamelin, L. Aussel, S. Kieffer-Jaquinod, N. Labessan, F. Barras, M. Fontecave, F. Pierrel. *J. Biol. Chem.* 2013, **288**, 20085-20092

¹⁴ L. Aussel, L. Loiseau, M.H. Chéhade, B. Pocachard, M. Fontecave, F. Pierrel, F. Barras *J. Bacteriol.* 2014, **196**, 70-79

¹⁵ T. Faunce S. Styring, M.R. Wasielewski, G.W. Brudvig, A. W. Rutherford, J. Messinger, A.F. Lee, C.L. Hill, H. deGroot, M. Fontecave, D.R. MacFarlane, B. Hankamer, D.G. Nocera, D.M. Tiede, H. Dau, W. Hillier, L. Wang *En. Env. Sci.* 2013, **6**, 1074-1076

- En collaboration avec l'équipe de C. Sanchez au Collège de France, nous élaborons des surfaces conductrices d'électrodes nanostructurées sur lesquelles nous pouvons greffer des photosensibilisateurs pour réaliser des photoélectrodes¹⁶.
- Toujours en collaboration avec l'équipe de C. Sanchez, nous essayons également d'utiliser la multifonctionnalité des polymères de coordination (ou MOF : Metal Organic Frameworks) pour créer des matériaux photocatalytiques originaux. Le premier résultat remarquable réside dans la découverte de la possibilité de contrôler la valeur du band gap de MOFs à base de titane, de type MIL-125, donc de les utiliser comme semi-conducteurs absorbant la lumière visible¹⁷. Ce résultat a pu être obtenu grâce à une approche originale combinant conception in silico/synthèse ciblée.
- Enfin nous étudions toute une série de complexes moléculaires bioinspirés pour l'électroréduction et la photoréduction du CO₂. Il s'agit en particulier de synthétiser des complexes dithiolènes du molybdène et du tungstène, qui miment le site actif des formiate-déshydrogénases¹⁸. Nous étudions également des complexes du cobalt et du nickel, plus simples, utilisant des ligands polypyridiniques. Dans le cas du ligand terpyridine, on obtient des complexes de cobalt et de nickel qui possèdent des activités catalytiques intéressantes pour l'électroréduction du CO₂ (Figure 5). Le complexe de nickel est très sélectif pour la production de CO, tandis que celui de cobalt permet de contrôler le rapport CO:H₂, par le potentiel appliqué pendant l'électrolyse¹⁹.

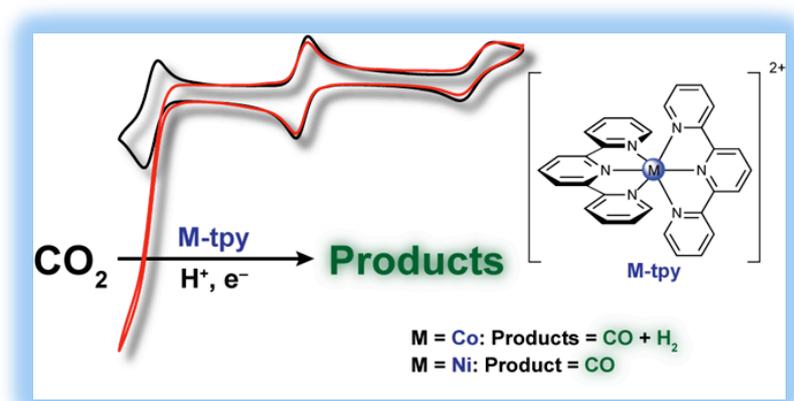


Figure 5 : Complexes M-terpyridine (M= Ni, Co) pour l'électroréduction du CO₂ en CO

¹⁶ W. Hamd, M. Chavarot-Kerlidou, J. Fize, G. Muller, A. Leyris, M. Matheron, E. Courtin, M. Fontecave, C. Sanchez, V. Artero, C. Laberty-Robert *J. Mater. Chem. A* 2013, **1**, 8217-8225

¹⁷ C. H. Hendon, D. Tiana, M. Fontecave, C. Sanchez, L. D'arras, C. Sassoie, L. Rozes, C. Mellot-Draznieks, A. Walsh *J. Am. Chem. Soc.* 2013, **135**, 10942-10945

¹⁸ N. Elgrishi, V. Artero, M. Fontecave *L'Actualité Chimique* 2013, **371-372**, 95-100

¹⁹ N. Elgrishi, M.B. Chambers, V. Artero, M. Fontecave *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014, **16**, 13635-44

Annexe : activités propres de collaborateurs.

B. Golinelli et D. Hamdane

Un pont disulfure intramoléculaire régule l'affinité de la neuroglobine humaine pour l'oxygène.

La neuroglobine est une petite protéine de la famille des globines découverte en 2000, qui est présente dans le cerveau des vertébrés. Bien que ses fonctions au sein de l'organisme soient encore mal connues, elle est surexprimée en conditions d'hypoxie (oxygénation insuffisante), assurant ainsi la protection des cellules. Contrairement aux autres globines où le sixième site de coordination du fer de l'hème est accessible et permet de lier l'oxygène, l'histidine dite "distale" en position 64 est ligand du fer de la neuroglobine aussi bien dans l'état oxydé que dans l'état réduit. Il a été proposé que cette hexacoordination constitue un nouveau mécanisme de régulation car, dans ce cas, l'étape limitante pour la liaison d'un ligand exogène est la rupture de la liaison entre le fer hémique et l'histidine distale.

L'hypothèse avait été émise que dans la neuroglobine humaine, la formation d'un pont disulfure entre les cystéines 46 et 55 (présentes dans la boucle CD liant les hélices C et D) diminuerait l'affinité de l'histidine distale pour le fer hémique, augmentant ainsi l'affinité pour l'oxygène. Cependant, jusqu'à présent, il n'y avait aucune donnée structurale permettant de visualiser ce pont disulfure et d'expliquer sa fonction de régulation.

Les équipes de Michael Marden (INSERM) et Béatrice Golinelli-Pimpaneau (Collège de France, CNRS, Paris) ont déterminé, grâce à des expériences de diffraction aux rayons X sur la ligne Proxima1, la structure de la neuroglobine humaine. Le cristal contient deux structures de la protéine dans lesquelles le pont disulfure est formé mais adopte des conformations différentes, révélant ainsi sa grande flexibilité. L'analyse de la structure révèle la formation d'une nouvelle cavité interne dans la région de la boucle CD lors de la formation du pont disulfure. Cette cavité pourrait permettre la mobilité conformationnelle de l'histidine distale de la neuroglobine humaine, et réguler ainsi la dynamique de l'équilibre entre les formes hexa et pentacoordinées, ou encore déplacer le chemin de migration du ligand. Ce nouveau mécanisme de régulation de l'affinité pour l'oxygène de la neuroglobine, impliquant la formation d'un pont disulfure intramoléculaire, serait spécifique des mammifères en dehors des rongeurs.

Reference:

The crystal structure of wild-type human brain neuroglobin reveals flexibility of the disulfide bond that regulates oxygen affinity.

Guimarães BG, Hamdane D, Lechauve C, Marden MC, Golinelli-Pimpaneau B. *Acta Crystallogr D Biol Crystallogr*. 2014, 70,1005-14.

C. Mellot-Drazniek

Les structures à charpente hybride organique-inorganique, également appelées MOFs (metal organic frameworks) constituent une classe importante de solides, poreux ou non, qui suscitent d'intenses recherches en raison de leur grande versatilité chimique et structurale – fonctionnalisation du linker organique, modification post-synthèse - leur conférant des propriétés très recherchées en capture/séparation de gaz ou encore catalyse. Parmi eux, les ZIFs, Zeolitic Imidazolate Frameworks, possèdent, outre une excellente stabilité thermique et chimique, une exceptionnelle variété structurale, résultant de l'assemblage de cations en coordinance tétraédrique (Zn^{2+} , mais aussi, Li^+ , B^{3+} , Mn^{2+} , Fe^{2+} ...) avec des imidazolates, imitant ainsi l'architecture des zéolithes, leurs analogues inorganiques. Il est connu de façon empirique que le choix du linker organique, notamment des substituants de l'imidazole, a un rôle crucial lors de la synthèse des ZIFs, affectant la nature de la structure finale et sa stabilité, sans pour autant qu'un lien rationnel ait été établi. La modélisation constitue ici un outil de choix pour explorer *in silico* le paysage énergétique particulièrement complexe des

ZIFs, qu'il s'agisse de structures hypothétiques ou déjà découvertes. Nous utilisons ainsi depuis plusieurs années des calculs basés sur la théorie de fonctionnelle de la densité (DFT) avec correction de la dispersion pour explorer les ZIFs et leurs stabilité relative. Nous nous sommes intéressés récemment à l'impact de groupements fonctionnels, -NH₂, -CH₃, -OH en tant que substituants de l'imidazolate, sur les propriétés et la stabilité des architectures résultantes, dans le but de prédire la nature des topologies effectivement favorisées par un linker organique donné. En explorant l'impact de la position et du nombre de substituants, nous avons montré et quantifié la contribution déterminante des interactions dites latérales de type linker-linker, se traduisant pour un même linker par des interactions non liées attractives ou répulsives entre linkers selon la structure envisagée. Outre leur caractère prédictif (prédiction des structures observées, les plus stables), ces calculs donnent une estimation du coût énergétique lié à la formation de structures d'intérêt, notamment très poreuses.

References:

Exploring the interplay between ligand and topology in zeolitic imidazolate frameworks with computational chemistry.

Mellot-Draznieks C., Kerkeni, B.

Molecular Simulation 2014, 40, 25-32.

Impact of functionalized linkers on the energy landscape of ZIFs.

Galvelis R.; Slater B., Chaudret R., Creton B., Nieto-Draghi C., Mellot-Draznieks C.

Cryst. Eng. Comm. 2013, 15, 9603-9612.

High-resolution structural Characterization of two layered aluminophosphates by Synchrotron powder diffraction and NMR crystallographies.

Bouchevreau B., Martineau C., Mellot-Draznieks C., Tuel A., Suchomel M. R., Trébosc J., Lafon O. , Amoureux J.-P., Taulelle F.

Chem. Mater. 2013, 25, 2237-2242.