

## Analyse exhaustive du marc de café en vue de sa valorisation en bioraffinerie

### *Comprehensive analysis of spent coffee grounds with a view to their valorization in biorefineries*

Directrice de thèse: Karine Faure [karine.faure@isa-lyon.fr](mailto:karine.faure@isa-lyon.fr)

*Mot-clés : extraction, chromatographie, spectrométrie de masse, statistiques*

*Keywords : extraction, chromatography, mass spectrometry, statistics*

*English version below*

## Analyse exhaustive du marc de café en vue de sa valorisation en bioraffinerie

Le café est une des boissons les plus consommées au monde. Ce faisant, le déchet solide de cette extraction, c'est-à-dire le marc de café, représente plus de 10.5 million de tonnes par an dans le monde. La loi française AGECE impose à partir de Janvier 2024 au producteur (dans notre cas les services de restauration collectives, les restaurants et distributeurs spécialisés type Starbucks) de développer une filière de valorisation. La voie envisagée actuellement (compost, combustible) est à très faible valeur ajoutée alors que 20% de la masse du marc peut encore être extraite (extraction solvant, extraction CO<sub>2</sub>) et contient des molécules aussi variées que des sucres, des protéines, des polyphénols, des lipides, des stérols. Les molécules extraites pourraient être valorisées via une bioraffinerie en molécules bioactives (anti-inflammatoire, antioxydant) ou en molécules plateformes (briques de base alternatives aux molécules pétro-sourcées). L'analyse exhaustive de ce déchet est donc de prime importance pour appréhender les différentes voies de valorisation. Les études précédentes étant souvent macroscopiques, l'Institut des Sciences Analytiques propose de combiner toutes les approches analytiques à sa disposition et notamment les dernières méthodologies développées en analyse non ciblée pour caractériser ce produit. Les outils de chromatographie liquide multidimensionnelle, et notamment la technique LCxSFC, une des rares techniques à permettre à la fois une grande capacité de pics et une résolution des isomères de position, seront mis en couplage avec des techniques de mS/MS permettant fragmenter et donc de visualiser les relations de similitude structurale entre molécules (réseau moléculaire), facilitant ainsi leur identification. Dans un deuxième temps, les méthodologies mises en place pourront être utilisées pour comparer des cohortes d'échantillons et par analyse statistique, répondre à des questionnements sur la variabilité de la ressource « déchets », et notamment sa qualité moléculaire au regard des conditions de stockage et du risque de croissance fongique.

Le/la doctorant.e rejoindra l'équipe Chromatographie et Techniques Couplées pour développer des méthodes en LCxSFC-HRMS et SFC-IM-HRMS. Il/elle interagira éventuellement avec les autres équipes de l'ISA pour des analyses en GC-HRMS, isotopie, etc... et aura l'occasion de collaborer avec d'autres laboratoires nationaux sur ce sujet. Une expérience en chromatographie liquide ou en spectrométrie de masse est essentielle. Une connaissance de la chromatographie multidimensionnelle n'est pas requise. Une appétence pour le traitement de données est requise. Les travaux ont vocation à être publiés, la maîtrise de l'anglais est donc indispensable.

## Comprehensive analysis of spent coffee grounds with a view to their valorization in biorefineries

Coffee is one of the most consumed drinks in the world. The solid waste from this extraction, that is to say spent coffee grounds, represents more than 10.5 million tonnes per year worldwide. The French AGEC law requires from January 2024 the producer (in our case collective catering services, restaurants and specialized distributors such as Starbucks) to develop a recovery sector. The currently envisaged route (compost, fuel) has very low added value while 20% of the mass of the spent coffee ground can still be extracted (solvent extraction, CO<sub>2</sub> extraction) and contains molecules as varied as sugars, proteins, polyphenols, lipids, sterols. The extracted molecules could be upgraded via a biorefinery into bioactive molecules (anti-inflammatory, antioxidant) or platform molecules (alternative building blocks to petro-sourced molecules). The exhaustive analysis of this waste is therefore of prime importance to understand the different recovery routes. As previous studies are often macroscopic, the Institute of Analytical Sciences proposes to combine all the analytical approaches at its disposal and in particular the latest methodologies developed in non-targeted analysis to characterize this product. Multidimensional liquid chromatography tools, and in particular the LCxSFC technique, one of the rare techniques to allow both a large peak capacity and a resolution of positional isomers, will be coupled with MS/MS techniques allowing fragmentation and therefore to visualize structural similarity relationships between molecules (molecular network), thus facilitating their identification. Secondly, the methodologies put in place can be used to compare cohorts of samples and, through statistical analysis, answer questions about the variability of the “waste” resource, and in particular its molecular quality with regard to storage conditions and fungal growth.

The PhD candidate will join the Chromatography and Coupled Techniques team to develop methods in LCxSFC-HRMS and SFC-IM-HRMS. He/she will interact with other ISA teams for analyses in GC-HRMS, isotopy, etc. and will have the opportunity to collaborate with other national laboratories on this subject.

Experience in liquid chromatography or mass spectrometry is necessary. Knowledge of multidimensional chromatography is not required. An appetite for data processing is required. The work is intended to be published, therefore a good level of English (written and talked) is compulsory.

Location: Institut des Sciences Analytiques, 5 rue de la Doua, 69100 Villeurbanne

Contact : CV + motivation letter + academic record of last 2 years to [karine.faure@isa-lyon.fr](mailto:karine.faure@isa-lyon.fr)

### References :

Spent coffee grounds: A sustainable approach toward novel perspectives of valorization

<https://doi.org/10.1111/jfbc.14190>

Two-dimensional chromatography for the analysis of valorisable biowaste

<https://doi.org/10.1016/j.aca.2023.341855>

A powerful two-dimensional chromatography method for the non-target analysis of depolymerised lignin

<https://doi.org/10.1016/j.aca.2023.342157>