

Intitulé du Sujet de Thèse : Conception théorique de catalyseurs moléculaires pour la production d'hydrogène

Laboratoire : Institut des Sciences Moléculaires de Marseille

Equipe : BiosCiences

Directeur de thèse : Maylis ORIO

Courriel : maylis.orio@univ.amu.fr, Téléphone : 04 13 94 56 13

- Descriptif du projet

Le développement de sources d'énergie renouvelable est d'une importance cruciale face au défi énergétique du 21^{ème} siècle. L'**hydrogène** étant considéré comme un vecteur d'énergie dans la recherche de carburants du futur, la conception de catalyseurs pour la production d'hydrogène est fondamentale pour développer des sources d'énergie renouvelable abondantes, peu coûteuses et respectueuses de l'environnement. Dans ce contexte, nous avons associé le ligand non-innocent thiosemicarbazone avec des ions de métaux de transition abondants sur Terre pour préparer une série de **complexes bio-inspirés** actifs en réduction des protons par **électrocatalyse**. Nous avons montré que ces complexes présentent une activité électrocatalytique élevée pour la réduction des protons en hydrogène¹⁻³, ce qui rend ces systèmes compétitifs des catalyseurs les plus efficaces décrits dans la littérature et qui sont à base de cobalt et de nickel. Cependant, leur mécanisme de réaction ainsi que les éléments clés pour comprendre, rationaliser et améliorer leur réactivité demeurent inconnus⁴⁻⁶. Ce projet vise à résoudre ces problèmes en développant un protocole théorique pour prédire les performances catalytiques de complexes bio-inspirés pour la production d'hydrogène. Notre objectif est de comprendre les **mécanismes réactionnels** de nos électrocatalyseurs en identifiant les paramètres électroniques qui régissent leur réactivité et en déterminant les éléments structuraux essentiels à une production efficace d'hydrogène. Notre stratégie conduira à la détermination de diagrammes potentiel-pH qui fournissent des informations clés sur les espèces rédox-actives et permettront l'étude d'autres électrocatalyseurs pour une comparaison directe avec les systèmes les plus efficaces décrits dans la littérature. Ces **études théoriques** vont donc permettre de prédire la faisabilité de la réaction de conversion des protons en hydrogène et permettra la **conception rationnelle** de catalyseurs moléculaires plus efficaces. Ce projet sera développé dans le cadre d'un contrat ANR (CODEC, 2020-2024).

- Profil

Nous recherchons un candidat avec une solide formation en chimie théorique, ayant un intérêt pour la chimie bio-inorganique. De bonnes connaissances en électrochimie et en spectroscopie seront également appréciées.

- Procédure

Curriculum vitae et lettre de motivation à transmettre par voie électronique avant le **01/05/2022**

- Références bibliographiques

1) Chem. Cat. Chem., 2017, 9, 2262-2268 ; 2) Chem. Eur. J., 2018, 24, 8779-8786; 3) Dalton Trans., 2020, 49, 5064-5073; 4) Chem. Sus. Chem., 2019, 12, 4905-4915; 5) RSC Adv., 2021, 11, 5232-5238; 6) Chem. Commun., 2021, 57, 3952.