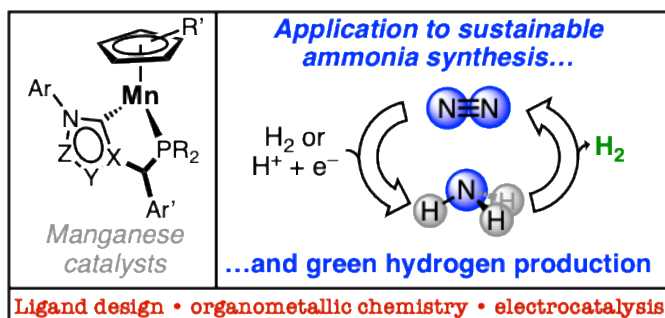


## Catalyseurs Homogènes Bifonctionnels pour la Transformation Durable Des Petites Molécules Azotées

**Contexte:** La planète souffre d'une crise énergétique qui peut être atténuée si des mesures appropriées sont prises pour réduire notre empreinte. Ce projet permettra de développer une compréhension approfondie de la manière dont différents ligands peuvent être utilisés pour obtenir de nouvelles réactivité et sélectivité dans le domaine de la transformation catalytique des petites molécules azotées, de diazote ( $N_2$ ) et d'ammoniac ( $NH_3$ ). La génération de  $NH_3$  à partir de  $N_2$  est l'une des transformations chimiques les plus importantes, assurant une croissance soutenue grâce à la production d'engrais. Néanmoins, en raison de hautes température et pression de fonctionnement, cette réaction « simple » représente plus de 1 à 2 % de notre consommation annuelle d'énergie, libérant des gigatonnes de  $CO_2$  chaque année. Au-delà de l'utilisation des engrais, le  $NH_3$  peut aussi être utilisé comme carburant non carboné ainsi que comme porteur d'hydrogène. Pour de futures centrales miniaturisées, délocalisées et approvisionnées par des énergies renouvelables et réduisant le  $N_2$  en  $NH_3$  ou extraient l'hydrogène du  $NH_3$ , les catalyseurs homogènes offrent modularité, facilité d'investigation et des cinétiques inégalable. Cependant, en raison de la complexité mécanistique de ces transformations, le développement de telles technologies pose un défi fondamental considérable pour les chimistes, allant de la catalyse moléculaire, de l'électrochimie et de la chimie théorique jusqu'au développement des procédés.



**Approche:** Le projet consistera en le développement de plateformes organométalliques basées sur un métal durable, non toxique et abondant, le manganèse (Mn). Sa capacité à stabiliser un grand nombre d'états d'oxydation sera déterminante pour étudier les processus multi-électrons et multi-protons tels que la réduction de  $N_2$  et son procédé inverse, l'oxydation du  $NH_3$ . Les candidats catalyseurs seront préparés en combinant des ligands modulaires et fortement donneurs incorporant phosphine et carbènes N-hétérocycliques (P-NHC) et des précurseurs de manganèse à géométrie tabouret de piano. Ces complexes seront examinés pour leur

capacité à coordonner  $N_2$  et  $NH_3$  et à promouvoir des transformations catalytiques dans la sphère de coordination de Mn (voir figure). Une partie importante de la thèse de doctorat sera consacrée à la compréhension des mécanismes de ces processus, actuellement sans précédents pour Mn. Cela se fera en collaboration avec des chimistes théoriciens et des spécialistes de l'électrocatalyse moléculaire, l'objectif ultime étant le développement d'un procédé électrifié.

**Profil recherché:** Master en chimie ou équivalent. Une solide connaissance de la chimie générale et moléculaire est essentielle. Une formation en chimie organométallique et de coordination, ainsi que des compétences expérimentales associées (boîte à gants, ligne à vide, techniques de Schlenk) est un atout. Le/la candidat(e) doit être capable de mener des recherches dans un cadre académique, par exemple en préparant, en mettant en place et en réalisant des expériences, tout en examinant soigneusement les résultats et en réalisant des veilles bibliographiques, selon les besoins. Le candidat devra organiser ses propres activités de recherche selon des délais et exigences convenus. D'excellentes compétences informatiques sont essentielles. Ils doivent posséder de solides compétences en communication écrite et orale en anglais afin de rapporter, présenter et communiquer efficacement sur l'avancement de leur recherche. Ils doivent travailler en équipe, mais aussi de manière indépendante. Au cours de son programme de 3 ans, le/la candidat(e) renforcera son autonomie en laboratoire et développera un esprit scientifique critique. Au-delà de cela, les compétences en synthèse, ainsi que dans la manipulation et la caractérisation des complexes sensibles, seront renforcées.

Le doctorat sera principalement effectué au Laboratoire de Chimie de Coordination (LCC, <http://www.lcc-toulouse.fr/>), l'un des principaux instituts de chimie français. Nous disposons de plateformes techniques et analytiques de pointe pour soutenir le projet (par exemple, RMN, RPE, diffraction RX, électrochimie...). Avec un environnement de travail stimulant réunissant plus de 70 chercheurs et 100 stagiaires, doctorants et postdoctorants de différentes nationalités, la recherche au LCC place la chimie de coordination comme un outil central pour relever les défis actuels liés au changement climatique, à la transition énergétique et aux sciences de la vie. Le projet se déroulera en collaboration avec les équipes de C. D'Ino (LPCNO, Toulouse) pour les aspects théoriques et mécanistiques, et celle de M. Robert (IPCM, Paris) pour le développement de catalyses électrifiées.

Le doctorat peut commencer en octobre 2026 et la rémunération sera de 2300 € bruts par mois.

Veillez soumettre au moins deux lettres de recommandation, les notes de Master, une lettre de motivation et le rapport de stage en laboratoire le plus récent.