



Sujet de thèse

Synthèse de catalyseurs à base de dérivés d'heptazine pour des réductions multiélectroniques

Dans la quête de **nouveaux ligands non-innocents qui peuvent être utilisés comme réservoirs d'électrons pour des réductions multiélectroniques** comme la formation d' H_2 (HER), ou la réduction du CO_2 (CO₂RR), les dérivés d'heptazine (briques élémentaires des nitrures de carbone graphitique) possèdent de nombreux avantages. Ils sont capables (i) de stocker des charges dans leur système π conjugué à des potentiels adaptés à l'HER ou la CO₂RR, (ii) de stabiliser les bas degrés d'oxydation des métaux et (iii) d'être versatiles en fonctionnalisant sélectivement les trois positions substituables pour ajuster les propriétés électroniques du catalyseur. Paradoxalement, la **chimie des heptazines est très peu documentée dans la littérature**. Ceci principalement en raison d'une réactivité de ces dérivés difficile à maîtriser. **Le laboratoire CAMPE s'est spécialisé dans la chimie de ces dérivés** et a mis au point des méthodes originales pour les fonctionnaliser. Le but du projet consiste donc à **développer des ligands heptazine et à les complexer à des métaux de transition afin d'étudier leur propriétés électrocatalytiques notamment pour l'HER**.

Cette thèse comportera une partie importante sur la **synthèse organique de nouveaux ligands heptazines**, et une autre sur la **complexation monométallique avec des métaux 3d** et leur **caractérisation physico-chimique**. Cette thèse se fera en étroite collaboration avec les équipes CEMCA (Brest), DCM (Grenoble) et BtBs (Milan), impliquées dans le projet, qui étudieront respectivement la complexation bimétallique, les propriétés électrocatalytiques et la rationalisation par étude DFT des systèmes synthétisés.

La thèse se déroulera au sein du CAMPE sur le site du CEA Grenoble. Le CAMPE est un laboratoire de recherche fondamentale associant des chimistes de synthèses, des théoriciens en modélisation moléculaire, des spectroscopistes ainsi que des spécialistes en instrumentation. Le laboratoire mène des recherches en chimie et physico-chimie moléculaire axées sur les grands programmes du CEA : NTE (nouvelles technologies pour l'énergie), nanosciences, chimie pour la santé et l'environnement. **Des missions chez nos collaborateurs pourront être organisées pour partager les résultats et se former/découvrir leur spécialisation**.

Profil recherché : Le/La candidat/e doit avoir un diplôme de master (ou d'école d'ingénieur) en chimie. Il/Elle doit avoir une expérience théorique et pratique en chimie organique et/ou chimie de coordination incluant les moyens de purification et de caractérisation classiques (chromatographie, NMR, GC, Masse...). Un intérêt ou une expérience en catalyse ou électrochimie serait un plus. Un bon niveau d'anglais est souhaitable.

Merci d'envoyer CV, lettre de motivation et notes à julie.andrez@cea.fr