

LABORATOIRE DE CHIMIE DE COORDINATION (LCC)

205 route de Narbonne, 31077 Toulouse cedex 4, France • <http://www.lcc-toulouse.fr/>

Equipe Catalyse et Chimie Fine - <https://www.lcc-toulouse.fr/article111.html>

Offre de thèse en chimie organique et organométallique (2021–2024)

Carbènes aromatiques polycycliques hautement réactifs pour la catalyse

L'étude fondamentale et l'ingénierie de matériaux carbonés présentant des défauts (DCM pour Defective Carbon Materials) pourraient permettre des avancées majeures dans divers domaines tels que le stockage de l'information, la nanoélectronique et la catalyse. L'idée innovante du projet est basée sur une découverte récente faite au laboratoire basée sur un procédé thermochimique de préparation de DCM qui permet l'introduction de quantités contrôlées de défauts. La nature exacte des états électroniques localisés créés par ce procédé thermochimique n'est pas encore connue et mérite définitivement plus d'attention. Les défauts associés aux lacunes et aux bords améliorent la réactivité chimique et ne sont pas des spéculations purement théoriques. Alors que les carbènes sont connus pour être instables, la stabilité des sites triplet (zigzag-edge) augmente avec la taille de la feuille de graphène, en raison de la stabilisation par résonance.

Dans ce contexte, le sujet de thèse vise à étudier la réactivité chimique de ces DCM à travers la préparation de modèles moléculaires contenant des défauts de type zigzag-edge bien définis (modèles moléculaires de type carbène, CMM) c'est-à-dire des hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP, espèces mono-carbéniques zigzag-edge à insaturation H unique). La réactivité chimique des CMM et CMM-métal sera étudiée en particulier leur capacité à favoriser des réactions catalytiques.

Le travail de thèse s'intègre dans un projet ANR collaboratif impliquant un autre doctorant (chimie des matériaux) et deux post-doctorants (modélisation moléculaire et physique), tous localisés à Toulouse (LCC et LPCNO).

Le candidat présentant une solide formation en chimie organique travaillera sur la synthèse, la caractérisation des CMM, la complexation et la catalyse organo(métallique).

Contact : Dr. M. Gouygou, maryse.gouygou@lcc-toulouse.fr; Dr. J. Volkman, jerome.volkman@ensiacet.fr

LABORATOIRE DE CHIMIE DE COORDINATION (LCC)

205 route de Narbonne, 31077 Toulouse cedex 4, France • <http://www.lcc-toulouse.fr/>

Catalysis and Fine Chemicals Team - <https://www.lcc-toulouse.fr/article111.html>

PhD proposal in organic and organometallic chemistry (2021–2024)

Highly reactive polycyclic aromatic carbenes for catalysis

The fundamental study and engineering of defective carbon materials (DCM) could allow major advances in various fields such as information storage, nanoelectronics and catalysis. The innovative idea of this project is based on a recent discovery made in the laboratory based on a thermochemical process for preparing DCM, which allows the introduction of controlled quantities of defects. The exact nature of the localized electronic states created by this thermochemical process is not yet known and definitely deserves more attention. Defects associated with vacancies and edges enhance the chemical reactivity, and are not purely theoretical speculations. While carbene organic molecules are known to be unstable, the stability of zigzag-triplet-edge sites increases with the size of the graphene sheet, as a result of resonance stabilization.

In this context, the thesis subject aims to investigate the chemical reactivity of these DMC through the preparation of molecular models containing well-defined zigzag-edge-like defects (carbene molecular models, *CMM*) that is to say polycyclic-aromatic hydrocarbons (PAH)-based mono-carbenic species as singly H-unsaturated zigzag-edge models. The chemical reactivity of metal-free *CMM* and metal-*CMM* will be studied in particular their capacity to promote catalytic reactions.

This thesis work is part of a collaborative ANR project involving one other doctoral student (material chemistry) and two post-doctoral students (molecular modelling and physics), all located in Toulouse (LCC and LPCNO).

The PhD candidate with a strong background in organic chemistry will work on *CMM* synthesis/characterization, complexation and organo(metallic) catalysis.

Contact : Dr. M. Gouygou, maryse.gouygou@lcc-toulouse.fr; Dr. J. Volkman, jerome.volkman@ensiacet.fr