

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 organométallique et de coordination (2021–2024)**

#### **Matériaux carbonés 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. Dans ce contexte, le sujet de thèse vise à développer une nouvelle génération de catalyseurs à base de DCM et d'évaluer leur réactivité chimique, car un comportement de type carbène est attendu. Les DCM seront produits à partir de différents nanomatériaux carbonés (nanotubes de carbone, graphène, nanofibres de carbone). Les matériaux ainsi produits seront évalués en catalyse hétérogène soit directement comme catalyseurs soit comme support de catalyseur de type single site.

Nous pensons que les résultats obtenus dans le cadre du projet permettront des avancées majeures pour la science de surface des matériaux carbonés, pour laquelle les visions physique (radicaux libres, états de bord) et chimique (type carbène) des bords de graphène doivent être réconciliées; mais également en catalyse hétérogène (nouveaux carbènes solides).

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

Contact : Pr. P. Serp, [philippe.serp@ensiacet.fr](mailto:philippe.serp@ensiacet.fr) ; Dr. J. Volkman, [jerome.volkman@ensiacet.fr](mailto: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>

### **Highly reactive carbon materials for catalysis (2021–2024)**

#### **PhD proposal in organometallic and coordination chemistry**

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. In this context, the thesis subject aims to develop a new generation of DCM-based catalysts and to evaluate their chemical reactivity, because a carbene-like behavior is expected. DCM will be produced from different carbon nanomaterials (carbon nanotubes, graphene, carbon nanofibers). The materials thus produced will be evaluated in heterogeneous catalysis either directly as catalysts or as single site type catalyst supports.

We believe that the results obtained within the framework of the project will allow major advances for the surface science of carbon materials, for which the physical (free radicals, edge states) and chemical (carbene type) visions of graphene edges must be reconciled; but also in heterogeneous catalysis (new solid carbenes).

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

Contact : Pr. P. Serp, [philippe.serp@ensiacet.fr](mailto:philippe.serp@ensiacet.fr) ; Dr. J. Volkman, [jerome.volkman@ensiacet.fr](mailto:jerome.volkman@ensiacet.fr)