

Dr. Antoine Simonneau
ORCID iD: 0000-0003-4612-284X
Researcher iD: A-7296-2016
Laboratoire de Chimie de Coordination,
205 route de Narbonne, 31077 Toulouse cedex 4, France.

Né le 6 mars 1985, de nationalité française
État civil : sous le régime du pacte civil de solidarité
2 enfants (nés en 2015 et 2017)

email : antoine.simonneau@lcc-toulouse.fr
Téléphone : +33 (0)5 61 33 31 44

SITUATION PROFESSIONNELLE ACTUELLE

Chargé de Recherche Classe Normale, Laboratoire de Chimie de Coordination (LCC), Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) et Université Paul Sabatier (UPS) - Toulouse III, depuis nov. 2015. Co-responsable de l'équipe SMAc du LCC depuis 2019.
Recherche : Activation de petites molécules (N_2 , H_2 , CO_2) et de liaisons fortes (C-F) par des méthodes coopératives impliquant des espèces moléculaires organométalliques et inorganiques réactives.

EXPÉRIENCE PROFESSIONNELLE

- Oct. 2012–Juil. 2015** **Chercheur postdoctoral** dans le groupe du Prof. M. Oestreich (Technische Universität, Berlin), en tant que boursier postdoctoral Alexander von Humboldt entre fév. 2014 et juil. 2015.
Projet : Développement de méthodologies d'hydrosilylation par transfert et réactivité d'électrophiles forts du groupe principal.
- Fév. 2012–Juin 2012** **Chercheur postdoctoral** dans le groupe du Dr C. AUBERT et Prof. L. FENSTERBANK (Institut Parisien de Chimie Moléculaire, Université Pierre et Marie Curie, Paris, France).
Projet : Ligands phosphates chiraux pour les cycloadditions atroposélectives [2 + 2 + 2] catalysées au rhodium.

PARCOURS ACADÉMIQUE

- 2020** **Habilitation à diriger des recherches (HDR), Université de Toulouse.** Mémoire : « Transformation du diazote : vers des solutions moléculaires basées sur des complexes zéro-valent du groupe 6 ».
- 2008–2011** **Doctorat en chimie organique, avec les félicitations du jury**, dans le groupe des Prs. M. MALACRIA et L. FENSTERBANK (Institut Parisien de Chimie Moléculaire, Sorbonne Université (anciennement Université Pierre et Marie Curie), Paris, France), **Prix de thèse Springer 2014.**
Thèse : Réactions de cycloisomérisation catalysées par l'or par activation d'alcyne : nouveaux développements et études mécanistes. Publiée par Springer International Publishing Switzerland.
Thèse soutenue le **9 décembre 2011**, délivrée le **11 janvier 2012**.
- 2008** **Master of Science en Chimie Organique et Bioorganique, avec mention** (Université Pierre et Marie Curie, Paris). Thèse de M. Sc. dans le groupe du Prof. G. JAOUEN et le Dr F. LEBIDEAU (École Nationale Supérieure de Chimie de Paris). Projet : Synthèse diastéréosélective de complexes carbonylés octaédriques de rhénium.
- 2008** **Diplôme d'Ingénieur** de l'École Nationale Supérieure de Chimie de Paris (dorénavant Chimie ParisTech).

DISTINCTIONS

- 2024** **Prix « Jeune Chercheur » de la Division Chimie de Coordination de la Société Chimique de France.**
- 2022** **Prix « Jeune Chercheur » de l'Institut de Chimie de Toulouse (ICT).** Bourse de voyage de 1,5 k€ récompensant des chimistes talentueux en début de carrière issus de laboratoires basés à Toulouse.
- 2017** **Bourse ERC Starting Grant.** Le Conseil européen de la recherche sélectionne et finance les meilleurs chercheurs créatifs, de toute nationalité et de tout âge, pour mener des projets basés en Europe. Les ERC Starting Grants sont attribués à des chercheurs de toute nationalité ayant de deux à sept ans d'expérience depuis l'obtention de leur doctorat et un parcours scientifique très prometteur.
- 2013** **Bourse de recherche Alexander von Humboldt.** Par le biais de la bourse de recherche Humboldt, la Fondation Alexander von Humboldt parraine des chercheurs du monde entier ayant des qualifications supérieures à la moyenne.
- 2014** **Prix de thèse Springer.** Les instituts de recherche les mieux classés au niveau international sélectionnent chaque année leurs meilleures thèses pour les publier dans cette série. Nominée et approuvée par deux spécialistes reconnus, chaque thèse est choisie pour son excellence scientifique et son impact sur la recherche.

RESPONSABILITÉS LOCALES

depuis 2023	Membre du groupe de travail « Développement Durable » du LCC.
2020–2022	Membre du groupe de travail « Site web » du LCC.
depuis Mars 2019	Co-responsable de l'équipe Activation des Petites Molécules (SMAc), Laboratoire de Chimie de Coordination. Animation partagée avec S. Bontemps. Membre du Conseil Scientifique.

ENCADREMENT ET ÉVALUATION DE LA FORMATION À LA RECHERCHE

Doctorants			
2017–2020	Anaïs Coffinet (Univ. Toulouse), encadrement à 100%.		
2018–2022	Amal Bouammali (Univ. Toulouse), encadrement à 100%.		
2019–2023	Quentin Le Dé (Univ. Toulouse), encadrement à 100%.		
2020–2024	Marie-Christine Boegli (Univ. Toulouse), encadrement à 100%.		
2020–2024	Sara Bonfante (Univ. Toulouse et Univ. of York), encadrement à 50% avec le Dr. John Slattery.		
2021–2025	Arno Estival (Univ. Toulouse), encadrement à 50% avec le Dr. Mary Grellier.		
2024	Luis Blancarte (Autonomous National University of Mexico), stage de 6 mois.		
2024–	Quentin Lepeintre (Univ. Toulouse), encadrement à 50% avec le Pr. M. Drover, Western University (Canada).		
Stagiaires post-doctoraux			
2018–2021	Dr. David Specklin.	2023–2025	Dr. Léon Escomel.
2020–2022	Dr. Nicolas Queyriaux	2025-2026	Dr. Michel Sigrist.
Jurys de thèse			
Déc. 2020	Lydia Merakeb (LEM, Univ. Paris-Cité), examinateur.		
Nov. 2023	Vincent Wowk (i-CLeHS, Chimie ParisTech), rapporteur.		
Jan. 2024	Mathieu Pascaretti (URCOM, Univ. Le Havre), rapporteur.		
Sep. 2024	Francesco Crisanti (LEM, Sorbonne Univ.), examinateur.		
Juin 2025	Adrien Combourrieu (LCM, Institut Polytechnique de Paris), rapporteur.		
Juil. 2025	Victor Monnot (CEMCA, Univ. Brest), rapporteur.		
Déc. 2025	Andrey Pichugov (CP2M, CPE Lyon), examinateur.		
depuis 2015	Encadrement de plus de 15 stagiaires de L2 à M2 (12 Université de Toulouse, 1 Université de Nantes, 1 ENSCM, 1 boursière MITACS de l'Université de Montreal).		

ACTIVITÉS PÉDAGOGIQUES

Juin 2022	2ème C@T Summer School, École des Mines D'Albi. 1,5 h d'enseignement sur la fixation homogène de l'azote.
Oct. 2020	Tronc commun CCIMC (LCC, Toulouse). 2 h d'enseignement sur la fixation homogène de l'azote pour les étudiants diplômés du programme européen MSCA Joint Doctorate CCIMC.
Fév. 2019	XXXIXe École d'été du Département de Chimie de l'Université Fédérale de São Carlos (UFSCar), Brésil sous le thème « La chimie et la qualité de vie ». 9 h d'enseignement sur l'activation de petites molécules (homogènes, photo- et électrocatalyses) liées à la transition énergétique et au changement climatique. Niveau master et doctorat. Titre du cours : Les petites molécules peuvent-elles jouer un rôle dans l'amélioration de la qualité de vie ? Réponses apportées par la chimie moléculaire actuelle.
depuis 2016	Encadrant et jury pour le projet de recherche en chimie des étudiants de 1ère et 3ème année de licence, Université Paul Sabatier, Toulouse, France.

ACTIVITÉS ÉDITORIALES ET D'ÉVALUATION PAR LES PAIRS

2024–2025	Membre de l'Early Career Advisory Board d'Inorg. Chem. Front. (RSC)		
2023–2024	Membre de l'Early Career Advisory Board de JACS Au (ACS)		
depuis 2016	45 expertises pour les revues suivantes (entre autres, veuillez-vous référer à mon profil ORCID)		
	Angew. Chem Int. Ed.	J. Am. Chem. Soc.	Chem. Sci.
	Nat. Commun.	JACS Au	Chem. Commun.
	Chem. Eur. J.	Chem. Asian J.	Science Advances
	Inorg. Chem.	Inorg. Chem. Front.	Dalton Trans.
	Eur. J. Inorg. Chem.	ChemCatChem	J. Org. Chem.

EXPERTISES POUR LES AGENCES DE FINANCEMENT

2024	Expertise pour le programme UP-Squared, Université de Poitiers
2022	2 expertises pour l'Agence Nationale de la Recherche
2021	Expertise pour l'Agence Nationale de la Recherche
2021	Expertise pour l'Agence néerlandaise NWO
2020	Expertise pour l'Agence Nationale de la Recherche

ORGANISATION D'ÉVÈNEMENTS SCIENTIFIQUES

2027–2028	Organisateur des 3 ^{èmes} Journées Franco-Italienne de Chimie de Coordination.
2025–2026	Membre du Comité d'Organisation des 2 ^{èmes} Journées Franco-Italienne de Chimie de Coordination.

2023–2024	Membre du Comité d'Organisation du colloque GECOM-CONCOORD — Logistics & Sponsors crew, 20-24 mai 2024, Ax-les-Thermes, France.
2020	Membre du comité d'organisation du colloque en ligne « Cutting-edge Homogeneous Catalyse » (CEHC-1), du 4 au 6 mai 2021, Toulouse, France.
2019–2020	Membre du comité d'organisation du Colloque « European Colloquium on Inorganic Reactions Mechanisms » (ECIRM), 12-15 juillet 2020, Toulouse, France (annulé).

ACTIVITÉS DE SENSIBILISATION

Nov. 2025	Accueil de stagiaires de 3 ^{ème} . Présentation vulgarisée des activités de l'équipe, accompagnement au laboratoire pour assister à des expériences.
Juin 2025	Accueil de stagiaires de 2 ^{nde} .
2018–2019	Accueil de lycéens du Lycée Toulouse-Lautrec pour un projet scientifique. Supervision d'expériences en boîtes à gants et préparation d'une présentation.

FINANCEMENTS

2026	Projet de recherche collaborative de l'Agence nationale de la recherche (ANR) « PICATA » • 320 k€. <u>Porteur</u> .
2025	EMERGENCE International, 3 k€ pour financer une tournée de conférences au Royaume-Uni.
2025–2026	EMERGENCE @CNRS Chimie « HydrA » : Catalyseurs Chiraux au Molybdène pour l'Hydrogénation Asymétrique. Couvre le salaire d'un postdoc sur 18 mois + 15 k€. <u>Porteur</u> .
2024–2027	Bourse doctorale du Fonds France-Canada pour la Recherche - Ministère de la Recherche et de l'Enseignement supérieur, couvrant le salaire d'un doctorant sur 3 ans. <u>Co-porteur</u> avec le Pr. Marcus Drover (Western University, Canada).
2024–2026	Fonds France-Canada pour la Recherche. 15 000 \$ CA couvrant les frais de mobilité.
2024	Projet INFRANALYTICS, couvrant 15 jours de mesure RMN à haut champ (800 et 1200 MHz). Analyse à l'état solide d'hydrures moléculaires de molybdène. <u>Porteur</u> .
2022–2027	Projet de recherche international (IRP) financé par le CNRS. Finance des échanges de chercheurs et d'étudiants dans le cadre d'un projet de recherche collaboratif entre le LCC et l'Université Nationale Autonome de Mexico (UNAM). Coordonné par P. Lacroix et V. César (LCC) et Norberto Farfán (UNAM). Financement d'un séjour à l'UNAM (du 7 au 12 juin 2022) et d'un séjour de recherche de 6 mois pour un étudiant mexicain (2024).
2022–2026	Projet de recherche collaborative de l'Agence nationale de la recherche (ANR) « PUNCH » : Combining «PUsh-push» and «push-pull» strategies to mimic Nitrogenase Chemistry. Coordonné par M. Gennari, DCM, Université Grenoble-Alpes • 154 k€. <u>Responsable scientifique partenaire</u> .
2021–2024	Financement de la Région Occitanie, programme H ₂ Vert. Financement public de la recherche sur l'hydrogène et ses applications. Projet « CatalOHC » : New Catalysts for Liquid Organic Hydrogen Carrier • 76 k€. <u>Porteur</u> .
2020–2024	Réseau International de Formation « CCIMC » : Coordination Chemistry Inspires Molecular Catalysis. Programme conjoint européen de doctorat financé par les actions Marie Skłodowska-Curie, coordonné par R. Poli et A.-M. Caminade (LCC). Financement d'une bourse de doctorat conjointe et des frais de recherche. Entité partenaire : Département de chimie de l'Université de York.
2018–2023	Bourse ERC Starting Grant « OrFuNCo » : Organic Functionalisation of N ₂ Using Metal-Main Group and Metal-Metal Cooperativity. Financement entre autres des salaires de 3 doctorants et 2 postdocs, d'équipement, des missions et des consommables • 1,5 M€. <u>Porteur</u> .
2017–2020	Bourse doctorale du Ministère de la Recherche et de l'Enseignement supérieur. Couverture du salaire d'un doctorant sur 3 ans.
2015–2017	Bourse « Nouveaux Entrants ». Fonds d'amorçage fourni par l'Université Fédérale Toulouse Midi-Pyrénées pour aider à l'installation de jeunes chercheurs • 14 k€. <u>Porteur</u> .
2014–2015	Bourse de recherche Alexander von Humboldt. Salaire et frais de recherche couverts pendant 18 mois.

PRODUCTIONS SCIENTIFIQUES

A = article, C = communication, R = revue, P = brevet, M = monographie

Revue à comité de lecture – Carrière indépendante

- R49. Polytopic Main-group Lewis Acids for the Coordination and Activation of Small Molecules (Review), L. Escomel* et A. Simonneau,* Coord. Chem. Rev. **2025**, 544, 216948.
- C48. Reductive Cleavage of Dioxygen Mediated by a Lewis Superacidic Bis(Borane), L. Escomel, L. Vendier, D. Gatineau, F. Molton, C. Duboc, M. Gennari* and A. Simonneau,* JACS Au **2025**, 7, 3032–3038.
- A47. Zirconium-Mediated Carbon-Fluorine Bond Functionalisation Through Cyclohexyne “Umpolung”, S. Bonfante, T. F. N. Tanner, C. Lorber,* J. M. Lynam,* A. Simonneau* et J. M. Slattery,* Chem. Sci. **2025**, 16, 3552–3559.
- A46. Synthesis and Characterization of Heptacoordinated Molybdenum(II) Complexes Supported with 2,6-Bis(pyrazol-3-yl)pyridine (bpp) Ligands, A. Estival, L. E. Blancarte, L. Pinto, R. Pointis, N. Galas, A. Sourmia-Saquet, L. Vendier, R. Santillan, N. Farfán, J.-B. Sortais, M. Grellier et A. Simonneau,* Dalton Trans. **2025**, 54, 2860–2870.
- A45. Bio-Inspired Thiolate-Fell-Hydrazine Adduct Towards Iron-Mediated C-N Bond Formation, I. Cassandrini, C. Philouze, A. Simonneau, C. Duboc et M. Gennari,* Eur. J. Inorg. Chem. **2025**, 28, e202400633.
- A44. Reactivity of Metal Hydrides with CO₂: Going Beyond Formate with a High-Valent Cationic Pentahydride Mo(VI) Complex, N. Queyriaux,* J. J. Cabrera-Trujillo, N. Durvin, L. Vendier, K. Miqueu* et A. Simonneau,* Chem. Sci. **2024**, 15, 20582–20589.
- C43. Low-valent Group 6 Metals/Al(C₆F₅)₃ Donor-Acceptor Systems for CO₂ Activation and Cleavage, L. Escomel, Q. Le Dé, M. Benonie, L. Vendier et A. Simonneau,* Chem. Commun., **2024**, 60, 13235–13238.
- A42. Coordination of Al(C₆F₅)₃ vs B(C₆F₅)₃ on Group 6 End-On Dinitrogen Complexes: Chemical and Structural Divergences, L. Escomel, F. Martins, L. Vendier, A. Coffinet, N. Queyriaux, V. Krewald* et A. Simonneau,* Chem. Sci. **2024**, 15, 11321–11336.
- A41. Seven-coordinate Group 6 Metal Hydrides Obtained by H₂ Activation at B(C₆F₅)₃ Adducts of N₂ Complexes: Frustrated Lewis Pair-type Reactivity of the B–N linkage, M.-C. Boegli, A. Coffinet, C. Bijani et A. Simonneau,* Chem. Asian J. **2024**, 19, e202400451.

- R40. **Nitrogen Fixation by Manganese Complexes – Waiting for the Rush? (Concept)** Q. Le Dé, D. A. Valyaev* et A. Simonneau,* *Chem. Eur. J.* **2024**, 30, e202400784.
- A39. **Metallomimetic C-F activation catalysis by simple phosphines**, S. Bonfante, C. Lorber,* J. M. Lynam,* A. Simonneau* et J. M. Slattery,* *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146, 2005–2014. **Article parmi les plus lus de janvier 2024, sélectionné par C&EN.**
- A38. **An orbitally adapted semi-metallic frustrated Lewis pair template for N₂ activation and reduction to diazene-diide**, D. Specklin, M.-C. Boegli, A. Coffinet, L. Escomel, L. Vendier, M. Grellier et A. Simonneau,* *Chem. Sci.* **2023**, 14, 14262–14270.
- A37. **Protonation Behavior of a Tetrahydrido Molybdenum(IV) Complex with Organic and Inorganic Acids**, N. Queyriaux,* N. Durvin, D. Leon, M.-C. Boegli, L. Vendier et A. Simonneau,* *Eur. J. Inorg. Chem.* **2023**, 26, e202300426.
- A36. **An Experimental and Computational Investigation Rules Out Direct Nucleophilic Addition on the N₂ Ligand in Manganese Dinitrogen Complex [Cp(CO)₂Mn(N₂)],** Q. Le Dé, A. Bouammali, C. Bijani, L. Vendier, I. del Rosal, D. A. Valyaev,* C. Dinoi* et A. Simonneau,* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, 62, e202305235 (**Very Important Paper**).
- A35. **CO₂ Hydroboration: Impact of the Boryl Moieties on the Reactivity of Four Bis(boryl)acetal Compounds toward 2,6-Diisopropylaniline**, S. Desmons, Y. Zhou, D. Zhang, C. Jarava-Barrera, A. Coffinet, A. Simonneau, L. Vendier, G. Luo* et S. Bontemps,* *Eur. J. Org. Chem.* **2023**, 26, e202300525.
- A34. **Biomimetic catalysis of nitrite reductase enzyme using copper complexes in chemical and electrochemical reduction of nitrite**, M. P. Ferreira, C. B. Castro, J. Honorato, S. He, W. G. G. Júnior, C. Esmieu, E. E. Castellano, A. F. de Moura, D. R. Truzzi, O. R. Nascimento, A. Simonneau et C. G. C. M. Netto,* *Dalton Trans.* **2023**, 52, 11254–11264.
- A33. **Assessing Combinations of Strong Lewis Acids and N₂-derived Molybdenum Nitrido Complexes for Heterolytic Bond Activations**, A. Coffinet, Q. Le Dé, D. Specklin, S. Benaamane, L. Muñoz, L. Vendier, N. Mézailles* et A. Simonneau,* *Chem. Eur. J.* **2023**, 29, e202203774.
- A32. **Syntheses of N₂-bridged heterobimetallic complexes, their structural and qualitative bonding analyses**, Q. Le Dé, F. Orbay, L. Vendier et A. Simonneau,* *J. Organomet. Chem.* **2023**, 986, 122604.
- A31. **Dinitrogen-derived (diarylboryl)diazenido Complexes with Differing Coordination to the Thallium Cation**, A. Bouammali, A. Coffinet, L. Vendier et A. Simonneau,* *Dalton Trans.* **2022**, 51, 10697–10701.
- R30. **Transition Metal-mediated Dinitrogen Functionalisation with Boron**, A. Simonneau,* *New J. Chem.* **2021**, 45, 9294–9301.
- A29. **Borane-catalysed Dinitrogen Borylation by 1,3-B-H Bond Addition**, A. Coffinet, D. Zhang, L. Vendier, S. Bontemps et A. Simonneau,* *Dalton Trans.* **2021**, 50, 5582–5589.
- A28. **Synthesis, Characterization, and Comparative Theoretical Investigation of Dinitrogen-Bridged Group 6-Gold Heterobimetallic Complexes**, D. Specklin, A. Coffinet, L. Vendier, I. del Rosal, C. Dinoi* et A. Simonneau,* *Inorg. Chem.* **2021**, 60, 5545–5562.
- A27. **Reaction of Methylolithium with Group 6 Phosphine Dinitrogen Complexes**, A. Bouammali, C. Bijani, L. Vendier, M. Etienne et A. Simonneau,* *Eur. J. Inorg. Chem.* **2020**, 1423–1427.
- A26. **Frustrated Lewis Pair Chemistry Enables N₂ Borylation by Formal 1,3-Addition of a B-H Bond in the Coordination Sphere of Tungsten**, A. Coffinet, D. Specklin, L. Vendier, M. Etienne et A. Simonneau,* *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 14300–14303.
- R25. **Enhanced Activation of Coordinated Dinitrogen with p-Block Lewis Acids (Concept)**, A. Simonneau* et M. Etienne, *Chem. Eur. J.* **2018**, 24, 12458–12463 (**Reviews Showcase**).
- C24. **Group 6 Transition Metal/Boron Frustrated Lewis Pair Templates Activate N₂ and Allow its Facile Borylation and Silylation**, A. Simonneau,* R. Turrel, L. Vendier et M. Etienne, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56, 12268–12272 (**Hot Paper**).
- Revue à comité de lecture – pré-CNRS**
- R23. **Review on Bioorganometallic Chemistry and New Outcomes in the Synthesis and Substitution of Tetracarbonyl(pyrrolylimine) Complexes of Rhenium with Organophosphorus Ligands**, A. Simonneau,* F. Le Bideau,* J.-H. Mirebeau, J. Marrot et G. Jaouen, *Curr. Top. Med. Chem.* **2017**, 17, 2807–2819.
- A22. **Assessing Ligand and Counterion Effects in the Noble Metal Catalyzed Cyclo-isomerization Reactions of 1,6-Allenynes: a Combined Experimental and Theoretical Approach**, F. Jaroschik, A. Simonneau, G. Lemièrre, K. Cariou, N. Agenet, H. Amouri, C. Aubert, J.-P. Goddard, D. Lesage, M. Malacria, Y. Gimbert,* V. Gandon* et L. Fensterbank,* *ACS Catal.* **2016**, 6, 5146–5160.
- C21. **An Air-stable Dimeric Ruthenium NHC Complex as Catalyst for Hydrosilylation and Dehydrogenative Coupling Reactions**, S. Bähr, A. Simonneau, E. Irran et M. Oestreich,* *Organometallics* **2016**, 35, 925–928.
- A20. **Formal SiH₄ Chemistry Using Stable and Easy-to-Handle Surrogates**, A. Simonneau et M. Oestreich,* *Nat. Chem.* **2015**, 7, 816–822. **Highlighted in Synfacts and Nachr. Chem.**
- C19. **The Cyclohexadienyl-Leaving-Group Approach Toward Donor-Stabilized Silylium Ions**, A. Simonneau,* T. Biberger et M. Oestreich,* *Organometallics* **2015**, 34, 3927–3929.
- R18. **Fascinating Hydrogen Atom Transfer Chemistry of Alkenes Inspired by Problems in Total Synthesis (Highlight)**, A. Simonneau et M. Oestreich,* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 3626–3628.
- A17. **Direct and Transfer Hydrosilylation Reactions Catalyzed by Fully or Partially Fluorinated Triarylboranes : A Systematic Study**, S. Keeß, A. Simonneau et M. Oestreich,* *Organometallics* **2015**, 34, 1237–1244.
- A16. **Salt-Free Preparation of Trimethylsilyl Ethers by B(C₆F₅)₃-Catalyzed Transfer Silylation Using a Me₃SiH Surrogate**, A. Simonneau, J. Friebe et M. Oestreich,* *Eur. J. Org. Chem.* **2014**, 2077–2083. **Highlighted in Organic Chemistry Highlights.**
- C15. **Two-fold Tandem Acyl-Group Shift/Cyclization via Gold Catalysis**, A. Simonneau, G. Maestri, L. Fensterbank* et M. Malacria,* *Arkivoc* **2014**, 287–296.
- C14. **3-Silylated Cyclohexa-1,4-dienes as Precursors for Gaseous Hydrosilanes: The B(C₆F₅)₃-Catalyzed Transfer Hydrosilylation of Alkenes**, A. Simonneau et M. Oestreich,* *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2013**, 52, 11905–11907. **Highlighted in Synfacts.**
- C13. **Atroposelective [2+2+2] Cycloadditions Catalyzed by a Rhodium/Chiral Phosphate System**, M. Augé, M. Barbazanges-Aubry, A.-T. Tran, A. Simonneau, P. Elley, H. Amouri, C. Aubert,* L. Fensterbank,* V. Gandon, M. Malacria et C. Ollivier,* *Chem. Commun.*, **2013**, 49, 7833–7835. **Sélectionné par Synfacts.**
- C12. **Ring Expansions Within Gold-catalyzed Cycloisomerization of O-tethered 1,6-enynes. Application to the Synthesis of Natural Product-like Macrocycles**, A. Simonneau, Y. Harrak, L. Jeanne-Julien, G. Lemièrre, V. Mouriès-Mansuy, J.-P. Goddard, M. Malacria et L. Fensterbank,* *ChemCatChem*, **2013**, 5, 1096–1099. **Quatrième de couverture du numéro.**
- A11. **Tracking Gold Acetylides in Gold(I)-Catalyzed Cycloisomerization Reactions of Enynes**, A. Simonneau, F. Jaroschik, D. Lesage, M. Karanik, R. Guillot, M. Malacria, J.-C. Tabet, J.-P. Goddard, L. Fensterbank,* V. Gandon* et Y. Gimbert,* *Chem. Sci.*, **2011**, 2, 2417–2422.
- A10. **Combination of Gold Catalysis and Selectfluor for the Synthesis of Fluorinated Nitrogen Heterocycles**, A. Simonneau, P. Garcia, J.-P. Goddard, V. Mouriès-Mansuy, M. Malacria* et L. Fensterbank,* *Beilstein J. Org. Chem.*, **2011**, 7, 1379–1386.

- C9. **Pentamethylcyclopentadienyl)Iridium Dichloride Dimer $\{[IrCp^*Cl_2]_2\}$: a Novel Efficient Catalyst for the Cycloisomerizations of Homopropargylic Diols and N-tethered Enynes**, E. Benedetti, A. Simonneau, A. Hours, H. Amouri, A. Penoni, G. Palmisano, M. Malacria,* J.-P. Goddard et L. Fensterbank,* *Adv. Synth. Catal.*, **2011**, 353, 1908–1912.
- C8. **Gold-catalyzed 1,3-Acyloxy Migration/5-exo-dig Cyclization/1,5-Acyl Migration of Diynyl Esters**, D. Leboeuf, A. Simonneau, C. Aubert, M. Malacria,* V. Gandon* et L. Fensterbank,* *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2011**, 50, 6868–6871.
- R7. **Transition Metal Catalyzed Cycloisomerizations of 1,n-Allenynes and -Allenes**, C. Aubert,* L. Fensterbank,* P. Garcia, M. Malacria,* et A. Simonneau, *Chem. Rev.*, **2011**, 111, 1954–1993.
- C6. **Gold(I)-Catalysed Cycloisomerisation of 1,6-Enynes into Functionalised Allenes**, Y. Harrak, A. Simonneau, M. Malacria,* V. Gandon* et L. Fensterbank,* *Chem. Commun.*, **2010**, 46, 865–867.

Chapitres de Livres et Monographies

- R5. **Push–Pull Activation of N_2 : Coordination of Lewis Acids to Dinitrogen Complexes**, A. Coffinet, A. Simonneau et D. Specklin, in *Encyclopedia of Inorganic and Bioinorganic Chemistry*, R.A. Scott (Ed.), John Wiley & Sons, Ltd, 2020, DOI: 10.1002/9781119951438.eibc2755.
- R4. **3-(Trimethylsilyl)-1,4-cyclohexadiene**, A. Simonneau et M. Oestreich, in *Electronic Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis*, D. Crich, P. L. Fuchs, A. B. Charette, T. Rovis (Eds.), Wiley: Chichester, Royaume-Uni, 2016, DOI: 10.1002/047084289X.rm01910.
- M3. **Gold-Catalyzed Cycloisomerization Reactions Through Activation of Alkynes**, A. Simonneau, Springer International Publishing Switzerland, 2014.
- R2. **Gold-Catalyzed Reactions of Propargylic Esters**, L. Fensterbank, J.-P. Goddard, M. Malacria et A. Simonneau in *Gold Catalysis: An Homogeneous Approach*, V. Michelet, F. D. Toste (Eds.), Imperial College Press : Londres, Royaume-Uni, 2014, pp 331–391.

Brevets

- P1. **Use of Cyclohexa-2,5-dien-1-yl-silanes as Precursors for Gaseous Hydrosilanes**, A. Simonneau et M. Oestreich, *PCT Int. Appl. WO* 2015/036309 A1.

COMMUNICATIONS ET CONFÉRENCES

IL = séminaire invité, IC = invitation à une conférence, OC = communication orale

- IC35. **Titre à déterminer**, symposium “Electron Transfer II”, Collège de France, Paris, France, **Mai 2026**.
- IC34. **Titre à déterminer**, Colloque Français de Chimie du Fluor, Sète, France, **Mai 2026**.
- IC33. **Interplay of electron-rich metal species and Lewis acids for the activation of small molecules**, *Main-group Elements Reactivity Conference*, Namur, Belgique, **Sep. 2025**.
- OC32. **Implementing Lewis SuperAcids (LSA) in Hybrid Main Group/Metal Donor-Acceptor Systems for Small Molecules Activation**, *European Conference on Organometallic Chemistry*, Bern, Suisse, **Juillet 2025**.
- IL27-31. **Interplay of Electron-rich Metal Species and Lewis Acids for the Activation of Small Molecules**, tour de conférences au Royaume-Uni dans le cadre d'un financement Emergence International délivré par CNRS Chimie à *University of York, University of Cambridge, Imperial College, University of Bath et University of Cardiff*, **Mai 2025**.
- IC26. **Molecular Donor-Acceptor Systems for Small Molecules Activation**, *Journées de Chimie de Coordination*, Saclay, France, **Jan. 2025**.
- IL25. **Molecular Donor-Acceptor Systems for Small Molecules Activation**, *Institut de Chimie Moléculaire de Bourgogne*, Dijon, France, **Nov. 2024**.
- OC24. **A Pentahydrido Molybdenum Complex for Small Molecule Activation and Hydrogenation Catalysis**, *XLII Reunión del GEQO*, Séville, Espagne, **Sep. 2024**.
- OC23. **Molecular Donor-Acceptor Systems for Small Molecules Activation**, *European Colloquium on Inorganic Reaction Mechanisms*, Toulouse, France, **Sep. 2024**.
- OC22. **Lewis Acid Adducts of Dinitrogen Complexes: Structure, Bonding and Reactivity**, *International Conference of Coordination Chemistry*, Fort Collins, États-Unis, **Juil. 2024**. **Prix de la meilleure communication**.
- OC21. **Metallomimetic C–F Activation Catalysis by Simple Phosphines**, *International Congress of Catalysis*, Lyon, France, **Juil. 2024**.
- IL20. **Molecular Donor-Acceptor Systems for Small Molecules Activation**, *Institut Charles Gerhardt*, Montpellier, France, **Mai 2024**.
- OC19. **Activation of the Carbon-Fluorine Bond: from Metal Mediation to Metal-Free Catalysis**, *Journées de Printemps de la Division de Chimie Organique*, Paris, France, **Avr. 2024**.
- OC18. **Metallomimetic C–F Activation Catalysis by Simple Phosphines**, *Journées de Chimie de Coordination*, Strasbourg, France, **Jan. 2024**.
- IL17. **Vintage Organometallic Chemistry — Tales of Surprises and Serendipity**, *URCOM*, Université du Havre, France, **Jan. 2024**.
- IL16. **Activation of Small Molecules and Strong Bonds with a Vintage Flavour**, *Chimie ParisTech*, Paris, France, **Oct. 2023**.
- IL15. **Mid Transition Metal Complexes for Small Molecule Activation**, *Département de Chimie Moléculaire, Université Grenoble Alpes*, Grenoble, France, **Juin 2023**.
- OC14. **Nucleophilic Addition on Coordinated N_2 : Fact or Fiction?**, *GECOM-CONCOORD*, Fournols, France, **Mai 2023**.
- OC13. **Revisiting N_2 Functionalization with Nucleophiles**, *Journées de Chimie Organique*, Palaiseau, France, **Nov. 2022**.
- OC12. **Revisiting N_2 Functionalization with Nucleophiles**, *ICOMC*, Prague, République Tchèque, **Juil. 2022**.
- IL11. **Electrophiles vs. Nucleophiles: What's the Best to Transform Dinitrogen?**, *Institut de Chimie de Toulouse*, **Juil. 2022**.
- IL10. **Metal-Boron Cooperation for Dinitrogen and Hydrogen Activation**, *Faculty of Chemistry of the National Autonomous University of Mexico*, **Juin 2022**.
- OC9. **Metal-Boron Cooperation: From Stoichiometric Activation of Small Molecules to Catalysis**, *CEHC-2*, Leipzig, Germany, **Mar. 2022**.
- IC8. **Frustrated Lewis Pair Chemistry Inspires Nitrogen Fixation**, *PACIFICHEM*, Honolulu, United States of America (HI), **December 2020** (cancelled).
- IC7. **Making Bonds between Dinitrogen and other Elements using Molecular Complexes**, *GECOM-CONCOORD*, Camaret-sur-mer, France, **May 2020** (cancelled).
- IL6. **Dinitrogen Activation with the Help of the Main Group**, *Department of Chemistry of the Federal University of São Carlos*, Brazil, **Fév. 2019**.
- IL5. **Functionalization of Dinitrogen Induced by p-Block and Metal Lewis acids**, *Université Claude Bernard Lyon 1*, France, **Sep. 2018**.
- OC4. **Dinitrogen Complexes and Lewis Acids: A Fruitful Collaboration**, *International Conference on Coordination Chemistry*, Sendai, Japan, **Juil. 2018**.

- OC3. **Group 6 Transition-Metal/Boron Frustrated Lewis Pair Templates for Dinitrogen Activation and its Functionalization**, *Journées de Chimie de Coordination*, Brest, France, **Fév. 2018**.
- OC2. **Transfer Hydrosilylation**, 6th EuCheMS Chemistry Congress, Séville, Espagne, **Sep. 2016**.
- IL1. **My Journey in Organometallic Catalysis: from Complex Cycloisomerization Reactions to Mechanisms, Ending up in Small Molecule Activation**, *LCC Welcome Lecture*, Toulouse, France, **Déc. 2015**.

COLLABORATIONS

■ Au niveau local

S. Bontemps (LCC)	Boranes pour la fonctionnalisation des petites molécules, 2 publications.
C. Dinioi, I. del Rosal (LPCNO)	Financé par l'ERC, calculs DFT, chimie des complexes N ₂ , 2 publications.
M. Grellier (LCC)	Financement Région Occitanie, stockage de l'hydrogène, 1 publication.
N. Mézailles (LHFA)	Financée par l'ERC, chimie des nitrures moléculaires de molybdène avec les acides de Lewis, 1 publication.
D. Valyaev (LCC)	Financée par l'ERC, complexes manganèse-diazote, 2 publications.
N. Queyriaux (LCC)	Financée par l'ERC et la Région Occitanie, chimie des hydrures moléculaires de molybdène, 2 publications.
J.-B. Sortais (LCC)	Catalyse d'hydrogénation homogène avec complexes de molybdène, 1 publication.

■ Au niveau national

M. Gennari, C. Duboc (DCM, Univ. Grenoble-Alpes)	Réduction homogène du diazote financée par l'ANR, 1 publication.
K. Miqueu (IPREM, Univ. Pau)	Calculs DFT, réactivité des hydrures de molybdène, 1 publication.
R. Gauvin, L. Delevoye (IRCP, Chimie ParisTech, and UCCS, Univ. Lille)	Financé par Infranalytics, RMN haut-champ à l'état solide d'hydrures de molybdène.

■ Au niveau international

C. Gruenwaldt (Univ. São Carlos, Brésil)	Complexes biomimétiques de cuivre et de molybdène, 1 publication.
J. Lynam, J. Slattery (Univ. York, Royaume-Uni)	Financé par les MSCA, activation de la liaison C-F, 2 publications.
N. Farfán, R. Santillan (UNAM, Mexico)	Ligands dipyrrométhène pour les métaux de transition précoces, financés par le CNRS, 1 publication.
V. Krewald (TU Darmstadt, Germany)	Calculs DFT, chimie des complexes N ₂ , 1 publication.
M. Drover (Western University, Canada)	Fonds France-Canada pour la Recherche et Ministère de la Recherche et de l'Enseignement supérieur — Systèmes coopératifs métaux de base / bore pour l'activation de petites molécules.

ACTIVITÉS NON PROFESSIONNELLES

depuis 2022	Secrétaire de l'association loi 1901 « L'Escapade Club » qui promeut l'escalade sportive à travers des stages et la pratique en plein air.
--------------------	--