



## Offre de stage M1 ou M2

### Theoretical study of a series of CO<sub>2</sub> reduction catalysts

A l'ère de l'anthropocène, capturer et transformer le CO<sub>2</sub> en un synthon de plus haute valeur ajoutée est un défi clé pour les chimistes. Les porphyrines de fer, combinant un métal abondant et non toxique et un ligand hautement modulable, sont parmi les catalyseurs les plus utilisés et les plus efficaces pour la réduction électrochimique du CO<sub>2</sub> en CO. Pour les rendre technologiquement applicables, une réduction du coût énergétique de leur fonctionnement, c'est-à-dire du potentiel auquel se fait l'électrocatalyse est actuellement recherchée.

Nous avons développé au laboratoire une série de porphyrines de Fer décorées par divers substituants qui fonctionnent sur une large gamme de potentiels. Nous souhaitons, par une étude théorique basée sur la DFT, déchiffrer les paramètres qui gouvernent l'énergie d'activation du CO<sub>2</sub> par ces différents catalyseurs en fonction du ligand utilisé. Nous modéliserons pour cela différents intermédiaires réactionnels, dans le but de cartographier leur densité de charge et de spin. La rationalisation fine des tendances observées permettra ensuite d'orienter le design de catalyseurs plus performants.

Le ou la candidat(e) devra posséder de bonnes connaissances et une appétence pour la chimie de coordination et la modélisation moléculaire. Il ou elle devra en outre être très méthodique et débrouillard(e).

A noter que le stage se déroulera à l'Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux d'Orsay, mais si le contexte sanitaire l'exige, il pourra se dérouler entièrement ou partiellement à distance.

Durée du stage 4 mois minimum, début 1<sup>er</sup> semestre 2021.

Contact : [marie.sircoglou@universite-paris-saclay.fr](mailto:marie.sircoglou@universite-paris-saclay.fr)

#### Articles produits par notre équipe en lien avec le sujet du stage

**Atropisomeric Hydrogen Bonding Control for CO<sub>2</sub> Binding and Enhancement of Electrocatalytic Reduction at Iron Porphyrins.** P. Gotico, L. Roupnel, R. Guillot, M. Sircoglou, W. Leibl, Z. Halime, A. Aukauloo, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020** doi:10.1002/anie.202010859.

**Second-Sphere Biomimetic Multipoint Hydrogen-Bonding Patterns to Boost CO<sub>2</sub> Reduction of Iron Porphyrins.** P. Gotico, B. Boitrel, R. Guillot, M. Sircoglou, A. Quaranta, Z. Halime, W. Leibl, A. Aukauloo, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, **58**, 4504–4509.

**Recent advances in metalloporphyrin-based catalyst design towards carbon dioxide reduction: from bio-inspired second coordination sphere modifications to hierarchical architectures.** P. Gotico, Z. Halime, A. Aukauloo, *Dalton Trans.* **2020**, **49**, 2381–2396.

*Ces articles peuvent être fournis sur demande.*