

Intitulé du Sujet de Thèse : Complexes de métaux dans des milieux contraints

Laboratoire : iSm2, UMR-CNRS-7313

Equipe : CTOM

Directrice de thèse : Dr. Paola Nava

Co-directeur : Prof. Stéphane Humbel

email : paola.nava@univ-amu.fr

Candidature auprès de Dr. Nava :

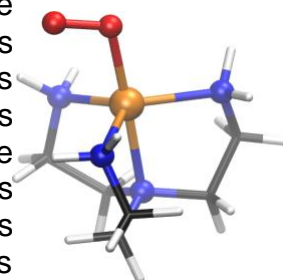
- Avant le 26 avril 2024
- Moyenne exigée au 1^{er} semestre de M2 ≥ 12
- Fournir
 - Lettre de motivation
 - Lettre de recommandation
 - CV

Contexte de l'étude

Le développement de la chimie des métaux de la 4^{ème} période est une des stratégies pour réduire l'utilisation en catalyse de métaux de la 5^{ème} ou 6^{ème} période, moins disponibles, plus polluants et plus chers. Les chimistes peuvent s'inspirer de la nature pour concevoir des systèmes moléculaires synthétiques qui ont des propriétés de réactivité spécifiques, comme dans les enzymes. L'inclusion de métaux de transition dans des structures moléculaires complexes, comme des cages moléculaires, est un moyen pour contrôler l'environnement du métal et permettre une activité catalytique spécifique. Les complexes ainsi obtenus sont souvent caractérisés par de la spectroscopie UV-vis, mais l'assignation des bandes est souvent empirique.

Descriptif du projet

Dans ce projet nous proposons d'étudier des complexes de métaux de la 4^{ème} période dans des milieux contraints du point de vue de la chimie computationnelle : en faisant varier la nature des ligands, nous pouvons comprendre l'influence de l'environnement sur les propriétés des systèmes. Des calculs ab-initio seront effectués pour valider les méthodes TD-DFT utilisées et pour obtenir une meilleure compréhension des spectres d'absorption de certains complexes avec des propriétés non usuelles, comme des azotures et des superoxyde de cuivre. Selon les avancements, la réactivité de ces complexes pourra être étudié : leur capacité d'oxyder de petites molécules ou l'environnement moléculaire pourra être exploré de manière théorique. Les effets de cage (déformation ou effets électroniques) pourront être décomposés par diverses approches connues.



Ce projet se situe dans le cadre d'études récents de notre équipe sur l'analyse des propriétés et de la réactivité de complexes métalliques, en interaction avec les expérimentateurs de notre laboratoire. Il permettra au candidat d'utiliser et maîtriser un panel large de méthodes et de manipuler plusieurs programmes de calculs (Gaussian, TURBOMOLE, Molpro, Orca, OpenMolcas, etc.).

Références Bibliographiques

1. L. Chaussy, D. Hagebaum-Reignier, S. Humbel, and P. Nava, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **24**, 21841-21852, 2022. DOI: 10.1039/D2CP03291K
2. G. Qiu, D. Diao, L. Chaussy, S. Michaud-Chevallier, A. J. Simaan, P. Nava, A. Martinez, C. Colombari, *Dalton Trans.*, **51**, 10702-10706, 2022. DOI: 10.1039/D2DT00607C
3. L. Chaussy, M. Delorme, A. Punter, Y. Carissan, J.-L. Parrain, M. Amatore*, P. Nava*, L. Commeiras*, *Dalton Trans.*, **52**, 14123-14131, 2023. DOI: 10.1039/d3dt02291a.
4. F. Robert-Peillard, E. M. El Mouchtari, D. Bonne, S. Humbel, J.-L. Boudenne, B. Coulomb, *Spectrochim. Acta. A. Mol. Biomol. Spectrosc.*, **275**, 121170, 2022 DOI:10.1016/j.saa.2022.121170.