



Ecole Doctorale - 104

Sciences de la Matière, du Rayonnement
et de l'Environnement

ETABLISSEMENT : Université de Lille

Laboratoire(s) de Rattachement : Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS)

Domaine scientifique, Spécialité :

DS4 | Chimie des matériaux

Direction de thèse : DELEVOYE Laurent, DR CNRS, laurent.delevoye@univ-lille.fr

Co-direction : --

Titre de la thèse : Caractérisation structurale du méthylaluminoxane (MAO) et de ses dérivés par spectroscopie RMN à l'état solide

SUJET DE THESE (environ 1/2 page)

Le méthylaluminoxane (MAO) est un activateur de catalyseurs important dans la production de polyoléfines, permettant chaque année, la synthèse de millions de tonnes de polymères. Malgré son rôle crucial dans l'industrie, sa structure moléculaire et ses mécanismes d'activation restent inconnus en raison de sa nature complexe et hautement réactive, notamment dans l'environnement de ses sites aluminium périphériques. Le projet ANR Aime-AO, fruit d'une collaboration impliquant des spécialistes en catalyse hétérogène de Paris et Villeurbanne, vise à relever ces défis en utilisant les outils avancés de la spectrométrie RMN à l'état solide, sous ultra-haut champ, un outil puissant pour sonder les noyaux quadripolaires tels que l'²⁷Al. L'Université de Lille donne l'accès à un spectromètre RMN de pointe dont le champ magnétique de 28,2 T, permet d'obtenir des informations sans précédent sur la structure et la réactivité du MAO. Le projet bénéficiera aussi d'interactions fréquentes entre les différents groupes de travail, garantissant une approche pluridisciplinaire.

Ce projet de thèse, mené au sein de l'équipe RM2I de l'UCCS, spécialiste des développements méthodologiques pour les noyaux quadripolaires en RMN à l'état solide, se concentrera sur deux objectifs principaux : (1) le développement et l'adaptation de méthodologies RMN pour des conditions extrêmes, incluant des champs magnétiques ultra-élevés et une rotation ultra-rapide des échantillons, et (2) l'application de ces méthodologies pour caractériser les systèmes moléculaires et supportés dérivés du MAO. La recherche intégrera des approches RMN multinoyaux et des calculs ab initio pour affiner les modèles structuraux, visant à établir une compréhension détaillée au niveau moléculaire du MAO. Ce travail contribuera au projet ANR Aime-AO en faisant progresser les connaissances fondamentales nécessaires à la conception rationnelle de systèmes catalytiques de nouvelle génération.

Date de recrutement envisagée : 01/10/2026

Contact (adresse e-mail) : laurent.delevoye@univ-lille.fr

Remarques/commentaires supplémentaires : Co-financement ANR acquis



Ecole Doctorale - 104

Sciences de la Matière, du Rayonnement
et de l'Environnement

INSTITUTION: University of Lille

Laboratory(s) to which they are attached : Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS)

Scientific field, Specialty :

DS4 | Materials Chemistry

Thesis supervision : DELEVOYE Laurent, DR CNRS, laurent.delevoye@univ-lille.fr

Co-supervision : --

Thesis title: Structural Characterization of Methylaluminoxane (MAO) and Its Derivatives by Advanced Solid-State NMR Spectroscopy

THESIS SUBJECT (about 1/2 page)

Methylaluminoxane (MAO) is a key catalyst activator in the industrial production of polyolefins, enabling the synthesis of millions of tons of polymers annually. Despite its pivotal role, its molecular structure and activation mechanisms remain elusive due to its complex and highly reactive nature, particularly in the environment of its peripheral aluminum sites. The ANR Aime-AO project, a collaborative initiative involving specialists in heterogeneous catalysis from Paris and Villeurbanne, aims to address these challenges by using advanced solid-state NMR spectroscopy under ultra-high magnetic fields. This powerful tool is ideal for probing quadrupolar nuclei such as ^{27}Al . The 28.2 T NMR spectrometer available at the University of Lille is a world-leading instrument, providing unprecedented insights into the structure and reactivity of MAO. The project will also benefit from frequent interactions between the different working groups, ensuring a multidisciplinary approach.

This PhD project, conducted in the RM2I team at UCCS, a leading group in methodological developments for quadrupolar nuclei in solid-state NMR, will focus on two main objectives: (1) the development and adaptation of NMR methodologies for extreme conditions, under ultra-high magnetic fields and ultra-fast sample spinning, and (2) the application of these methodologies to characterize molecular and supported MAO-derived systems. The research will integrate multinuclear NMR approaches and *ab initio* calculations to refine structural models, aiming to establish a detailed molecular-level understanding of MAO. This work will contribute to the broader Aime-AO project by improving the knowledge required for the rational design of next-generation catalytic systems.

Planned recruitment date: 01/10/2026

Contact (email address) : laurent.delevoye@univ-lille.fr

Additional Notes/Comments: Co-funding with ANR secured