



## Ecole Doctorale - 104

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

### ETABLISSEMENT : CENTRALE LILLE

**Laboratoire(s) de Rattachement** : Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS) - Equipe ModSpeC - Cité Scientifique - Villeneuve d'Ascq (59)

**Domaine scientifique, Spécialité** : Catalyse hétérogène environnementale, Spectroscopie IR (CNU 31) Chimie théorique, physique, analytique

**Direction de thèse** : Prof. Christophe DUJARDIN

**Co-encadrement** : Dr. Mélissandre RICHARD

**Titre de la thèse** : Éluclidation des mécanismes d'activation du CO<sub>2</sub> en photocatalyse : approche combinée SSITKA et spectroscopie IR operando résolu en temps

### SUJET DE THESE

La conversion catalytique du CO<sub>2</sub> en molécules d'intérêt énergétique est une voie prometteuse pour répondre aux enjeux énergétiques et environnementaux, mais elle reste limitée par une compréhension incomplète des mécanismes élémentaires d'activation et de réduction du CO<sub>2</sub>. Cette thèse vise à élucider ces mécanismes en catalyse hétérogène, notamment sous conditions photo-assistées, en combinant la méthode d'échange isotopique en régime stationnaire (SSITKA) et la spectroscopie infrarouge *operando* résolue en temps. Cette approche originale, développée récemment à l'UCCS, permettra de corréler des informations cinétiques quantitatives (temps de résidence, populations et vitesses de formation des intermédiaires) avec l'identification spectroscopique des espèces réactives de surface. Les travaux porteront sur des catalyseurs métalliques et photoactifs supportés sur zircone stabilisée à l'yttrium (YSZ), dont les lacunes d'oxygène et les sites basiques favorisent l'adsorption et la polarisation du CO<sub>2</sub>. La spectroscopie IR permettra de suivre les espèces carbonatées, carboxylates, formiates et le CO adsorbé, ainsi que leur évolution sous irradiation. L'objectif est d'identifier le rôle du support YSZ, des lacunes d'oxygène et des interfaces métal-support dans l'activation et la réduction du CO<sub>2</sub>, afin d'établir des liens entre structure de surface, espèces réactionnelles et sélectivité, et de proposer des bases rationnelles pour concevoir des catalyseurs plus efficaces et plus sélectifs dans la réduction du CO<sub>2</sub>.

**Mots clés** : Activation du CO<sub>2</sub>, (photo)catalyse hétérogène, mécanismes réactionnels, SSITKA-IR *operando*, YSZ.

**Date de recrutement envisagée** : 01/10/2026 (36 mois) - Contrat doctoral | Temps-plein

**Contact (adresse e-mail)** : [christophe.dujardin@centralelille.fr](mailto:christophe.dujardin@centralelille.fr) et [melissandre.richard@centralelille.fr](mailto:melissandre.richard@centralelille.fr)

**Remarques/commentaires supplémentaires** : Les personnes ayant obtenu un diplôme d'ingénieur ou un Master 2 recherche avec des connaissances en catalyse hétérogène peuvent candidater en envoyant un CV, une lettre de motivation ainsi que leurs relevés de note.

1) Le financement Centrale/Région n'est pas définitivement acquis à ce jour (02/2026). N'hésitez pas à nous contacter pour plus d'information.

2) Le poste sur lequel vous candidatez est susceptible d'être situé dans une « zone à régime restrictif » au sens de l'article R. 413-5-1 du code pénal. Si tel est le cas, votre nomination et/ou votre affectation ne pourront intervenir qu'après autorisation d'accès délivrée par le chef d'établissement, conformément aux dispositions de l'article 20-4 du décret n°84-431 du 6 juin 1984.



**Ecole Doctorale - 104**

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

**INSTITUTION: CENTRALE LILLE**

**Laboratory(s) to which they are attached:** Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS) - ModSpeC Team - Cité Scientifique - Villeneuve d'Ascq (59)

**Scientific field, Specialty:** Environmental Heterogeneous Catalysis, IR Spectroscopy  
(CNU 31) Theoretical, physical and analytical chemistry

**Thesis supervision:** Prof. Christophe DUJARDIN

**Co-supervision:** Dr. Mélissandre RICHARD

**Thesis title:** Elucidation of CO<sub>2</sub> activation mechanisms in photocatalysis: a combined SSITKA and time-resolved operando IR spectroscopy approach

### THESIS SUBJECT

The catalytic conversion of CO<sub>2</sub> into energy-relevant molecules is a promising route to address current energy and environmental challenges; however, it is still hindered by an incomplete understanding of the elementary mechanisms governing CO<sub>2</sub> activation and reduction. This PhD project aims to elucidate these mechanisms in heterogeneous catalysis, with particular emphasis on photo-assisted conditions, by combining steady-state isotopic transient kinetic analysis (SSITKA) with time-resolved *operando* infrared spectroscopy. This original approach, recently developed at UCCS, will enable the correlation of quantitative kinetic information (residence times, surface populations, and formation rates of reaction intermediates) with the spectroscopic identification of reactive surface species. The research will focus on metallic and photoactive catalysts supported on yttria-stabilized zirconia (YSZ), whose oxygen vacancies and basic sites promote CO<sub>2</sub> adsorption and polarization. Infrared spectroscopy will be used to monitor carbonate, carboxylate, and formate species, as well as adsorbed CO, and to follow their evolution under irradiation. The objective is to identify the respective roles of the YSZ support, oxygen vacancies, and metal-support interfaces in CO<sub>2</sub> activation and reduction, in order to establish relationships between surface structure, reaction intermediates, and selectivity, and ultimately to provide a rational basis for the design of more efficient and selective catalysts for CO<sub>2</sub> reduction.

**Keywords:** CO<sub>2</sub> activation, heterogeneous (photo)catalysis, reaction mechanisms, *operando* SSITKA-IR, YSZ.

**Planned recruitment date:** 10/01/2026 (36 months) - Doctoral contract | Full-time

**Contact (email address):** [christophe.dujardin@centralelille.fr](mailto:christophe.dujardin@centralelille.fr) and [melissandre.richard@centralelille.fr](mailto:melissandre.richard@centralelille.fr)

**Additional Notes/Comments:** Applicants holding an engineering degree or a Master's degree (MSc) with a research orientation and having a background in heterogeneous catalysis are invited to apply by submitting a CV, a cover letter, and their academic transcripts.

1) As of 02/2026, the Centrale/Region funding has not yet been definitively secured. Please do not hesitate to contact us for further information.

2) The position for which you are applying is likely to be located in a "restricted area" within the meaning of article R. 413-5-1 of the penal code.

If this is the case, your appointment and/or assignment can only take place after access authorization has been issued by the head of the institution, in accordance with the provisions of article 20-4 of decree n°84-431 of June 6, 1984.