

(English below)

<b>Intitulé</b>	<b>F/H Doctorant.e en nanoplasmonique pour la catalyse</b>
lieu de travail	ICPEES (UMR 7515) / IPCMS (UMR7504), Strasbourg
date de publication de l'offre	1er avril 2026
type de contrat	contrat doctoral CNRS
durée du contrat	36 mois
date d'embauche prévue :	1 <sup>er</sup> octobre 2026
quotité de travail	100%
rémunération :	selon grilles du CNRS
niveau d'études souhaité :	Master M2
expérience souhaitée :	-

### **Mission**

La catalyse plasmonique est un sujet de recherche en plein essor depuis les années 2010. Basée sur le confinement de la lumière dans des nanoparticules métalliques, elle présente un potentiel prometteur dans l'élaboration de procédés chimiques soutenable, comme la photosynthèse artificielle. Elle repose sur l'association de processus photophysiques de bulk et de processus chimiques de surface dont l'articulation, au sein de nanostructures composites complexes, est encore mal comprise. Le projet interdisciplinaire CNRS-MITI-80PRIME « NanoPLASMOnique pour la CATalyse » (PLASMOCAT) vise à mobiliser les compétences de deux équipes du CNRS en catalyse plasmonique et en modélisation physique, afin de mieux comprendre les phénomènes physiques et chimiques qui sous-tendent l'activité plasmonique, dans l'objectif de développer des matériaux performants. Dans ce cadre, le/la doctorant.e sera chargé.e de comprendre l'impact de la nanostructuration de l'objet sur les dynamiques électroniques afin de mieux les maîtriser au sein de nanostructures optimisées pour le recyclage du CO<sub>2</sub> en méthane.

### **Activités**

Le travail de thèse inclut un volet expérimental et un volet de théorie/modélisation. Pour le premier, le/la doctorant.e sera en charge de la synthèse de nanostructures plasmoniques par voie chimique et de la caractérisation physico-chimique de leurs propriétés texturales, structurales, optiques et catalytiques issues de l'activation plasmonique des nanostructures. Le second volet impliquera le développement et l'implémentation de modèles de la réponse plasmonique – linéaire et non-linéaire – basés sur les équations de l'hydrodynamique quantique (QHD), l'implémentation des codes numériques correspondants et leur optimisation. Les nanostructures contenant des nanoparticules métalliques et bimétalliques supportées seront considérées en particulier. Le/la doctorant.e sera amené.e à étudier les effets des caractéristiques géométriques des objets métalliques sur les dynamiques électroniques aux interfaces et sur les performances catalytiques, et d'établir des corrélations entre modèles de dynamiques électroniques et performances catalytiques. L'enjeu sera de développer des modèles physiques réalistes et de synthétiser des nanostructures s'approchant le plus possible des géométries idéales considérées dans les modèles à partir des voies de synthèse développées dans l'équipe.

### **Compétences attendues**

- Connaissances solides en catalyse hétérogène, dont synthèse, caractérisation physico-chimique et évaluation catalytique de nanomatériaux inorganiques composites (XRD, UV-visible, XPS, TEM/SEM, BET, TGA, FTIR, Raman)
- Savoir-faire opérationnels: synthèses inorganiques et/ou évaluation catalytique
- Connaissances de base en physique quantique, mécanique des fluides, physique de la matière condensée
- Capacité à apprendre et à développer des compétences en calcul analytique, modélisation théorique et simulations numériques, en particulier la résolution numérique d'équations aux dérivées partielles
- Capacité à situer le travail réalisé par rapport à l'état de l'art
- Maîtrise de l'anglais et du français, aussi bien à l'écrit qu'à l'oral

- Qualités rédactionnelles dans la perspective de publier et valoriser les recherches
- Aptitude au travail collaboratif dans une équipe pluridisciplinaire
- Capacité à travailler dans le respect des règles et procédures, flexibilité et adaptabilité

### **Contexte du travail**

Le/la candidat.e intégrera une équipe pluridisciplinaire menée par Valérie Caps (ICPEES/CNRS Chimie) et Giovanni Manfredi (IPCMS/CNRS Physique) et localisée sur le campus CNRS de Cronenbourg. Rattaché.e à l'ICPEES, elle/il aura accès aux deux unités de recherche, ICPEES et IPCMS. Elle/il bénéficiera ainsi de l'ensemble des techniques et savoir-faire nécessaires à la réalisation du projet, dans les domaines des nanomatériaux, de la catalyse plasmonique et de la physique théorique et numérique. Elle/il sera co-encadré.e par V. Caps et G. Manfredi. Elle/il bénéficiera d'un encadrement suivi, facilité par la proximité géographique des 2 unités de recherche.

Inscrit.e à l'école doctorale ED222 – Sciences Chimiques de l'Université de Strasbourg, le/la doctorant.e bénéficiera de l'environnement scientifique et culturel de cette Université d'Excellence.

Intégré.e aux différents réseaux scientifiques régionaux et nationaux dans lesquels ses encadrant.es sont impliqués (ITI QMat et HiFunMat, IRN Nanoalloys, GDR Plasmonique Active, réseau post-GDR Or-nano), elle/il aura la possibilité de réaliser des stages dans d'autres laboratoires pour la réalisation de tâches spécifiques du projet.

Le/la doctorant.e sera impliqué.e de façon active dans la diffusion des résultats scientifiques (rédaction de publications, participation à des congrès).

## PhD in nanoplasmonics for catalysis

### Mission

Plasmonic catalysis has been a rapidly growing research area since the 2010s. Based on the confinement of light within metallic nanoparticles, it holds great promises for the development of sustainable chemical processes, such as artificial photosynthesis. It relies on the combination of bulk photophysical processes and surface chemical processes within complex composite nanostructures, the interplay of which is still poorly understood. The interdisciplinary CNRS-MITI-80PRIME project "NanoPLASMONics for Catalysis" (PLASMOCAT) aims to combine the expertise of two CNRS teams in plasmonic catalysis and physical modelling to better understand the physical and chemical phenomena underlying plasmonic activity, with the goal of developing high-performance materials. In this context, the PhD student will be responsible for understanding the impact of the object nanostructuring on electronic dynamics in order to better control them within nanostructures optimized for the recycling of CO<sub>2</sub> into methane.

### Activities

The PhD work includes experimental and theoretical/modelling tasks. First, the doctoral candidate will be in charge of the chemical synthesis of plasmonic nanostructures and the physicochemical characterization of their textural, structural, optical, and catalytic properties resulting from plasmonic activation of the nanostructures. Second, the theory part will involve the development and implementation of linear and nonlinear plasmonic response models based on the equations of quantum hydrodynamics (QHD), the implementation of the corresponding numerical codes, and their optimization. Nanostructures containing supported metallic and bimetallic nanoparticles will be considered in particular. The doctoral candidate will study the effects of the geometry of metallic nanoobjects on electronic dynamics at interfaces and on catalytic performances. He/she will establish correlations between electronic dynamics models and catalytic performance. The challenge will be to develop realistic physical models and to synthesize nanostructures as close as possible to the ideal geometries considered in the models, using the synthesis methods developed in the team.

### Expected skills

- Solid knowledge of heterogeneous catalysis, including synthesis, physicochemical characterization, and catalytic evaluation of composite inorganic nanomaterials (XRD, UV-visible, XPS, TEM/SEM, BET, TGA, FTIR, Raman)
- Operational skills: inorganic synthesis and/or catalytic evaluation
- Basic knowledge of quantum physics, fluid mechanics, and condensed matter physics
- Ability to learn and develop skills in analytical computing, theoretical modelling, and numerical simulations, particularly the numerical solution of partial differential equations
- Ability to situate the work performed within the state of the art
- Fluency in English and French, both written and spoken
- Strong writing skills for publishing and disseminating research
- Ability to work collaboratively in a multidisciplinary team
- Ability to work in compliance with rules and procedures, flexibility and adaptability

### Work environment

The candidate will join a multidisciplinary team led by Valérie Caps (ICPEES/CNRS Chemistry) and Giovanni Manfredi (IPCMS/CNRS Physics) and located on the CNRS campus in Cronenbourg. Affiliated with ICPEES, he/she will have access to both ICPEES and IPCMS research units and benefit from all the techniques and expertise necessary for the project, in the fields of nanomaterials, plasmonic catalysis, theoretical and

numerical physics. He/she will be co-supervised by V. Caps and G. Manfredi. He/she will benefit from close supervision, facilitated by the geographical proximity of the two research units.

Enrolled in the ED222 - Chemical Sciences Doctoral School at the University of Strasbourg, the doctoral candidate will benefit from the scientific and cultural environment of this University of Excellence.

Integrated into the various regional and national scientific networks in which her/his supervisors are involved (ITI QMat and HiFunMat, IRN Nanoalloys, GDR Plasmonique Active, Or-nano network), he/she will have the opportunity to undertake internships in other laboratories to carry out specific tasks related to the project.

The doctoral candidate will be actively involved in the dissemination of scientific results (writing publications, participating in conferences).