



Offre de thèse en chimie supramoléculaire

Cages interpénétrées Donneur-Accepteur : une approche supramoléculaire novatrice de structuration de matériaux actifs pour les cellules solaires

Interlocked Donor-Acceptor Cages: an innovative supramolecular approach to organize active materials for solar cells

Equipe : SOMaF, Laboratoire MOLTECH-Anjou UMR 6200, Université d'Angers, 2 bd Lavoisier, 49045 Angers Cedex

Encadrement : Dr. Sébastien Goeb, sebastien.goeb@univ-angers.fr, 02.41.73.50.64

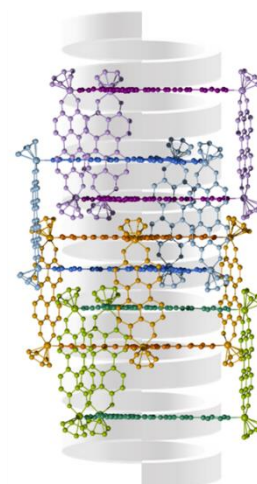
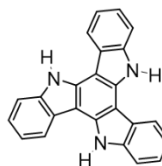
Co-encadrement : Prof. Marc Sallé, marc.salle@univ-angers.fr, 02.41.73.54.39

Financement : Acquis 100%

Sujet de Thèse :

Un des enjeux majeurs dans le domaine du photovoltaïque organique (OPV) réside dans le contrôle de la morphologie de la couche photo-active, constituée de motifs donneurs d'électrons (D) et accepteurs (A). Dans ce cadre, nous souhaitons développer des cages moléculaires hybrides D-A entrelacées, dans le but de contrôler la pré-organisation des sous-motifs D et A. En particulier, les cages de coordination supramoléculaires construites par auto-assemblage dirigé par les métaux sont des candidats hautement pertinents du fait de leur accès synthétique aisé et de leur capacité à s'auto-assembler spontanément, pour former des structures tri-dimensionnelles interpénétrées.^[1] Récemment, une étape supplémentaire a été franchie dans la conception d'objets entrelacés, avec la préparation de polycaténanes de cages de coordination.^[2]

Les cages de coordination auto-assemblées s'obtiennent par association spontanée de ligands polytopiques et de complexes métalliques à la géométrie généralement préorganisée. Dans le contexte de nos travaux actuels qui consistent à produire des récepteurs moléculaires auto-assemblés,^[3] nous avons très



récemment observé au laboratoire que le motif trixène associé à des complexes dinucléaires de Ruthénium permettait de produire des cages entrelacées.

Figure 1. Motif triazatruxène et polycaténane de coordination cible

Sur la base de ce résultat nous souhaitons préparer une nouvelle famille de polycaténanes de cages de coordination interpénétrées, impliquant pour chacune d'elles des partenaires D et A, en utilisant comme donneur le fragment triazatruxène (D) associé à des accepteurs dinucléaires de Ruthénium (A) dans l'objectif de produire les premières cellules OPV à base de cage de coordination.

- [1] M. Frank, M. D. Johnstone, G. H. Clever, *Chemistry – A European Journal* **2016**, *22*, 14104-14125.
[2] L. Chen, Q. Chen, M. Wu, F. Jiang, M. Hong, *Acc. Chem. Res.* **2015**, *48*, 201-210.
[3] a) G. Szalóki, V. Croué, V. Carré, F. Aubriet, O. Aleveque, E. Levillain, M. Allain, J. Arago, E. Orti, S. Goeb, M. Sallé, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 16272-16276; b) G. Szalóki, V. Croué, M. Allain, S. Goeb, M. Sallé, *Chem. Commun.* **2016**, *52*, 10012-10015; c) V. Croué, S. Goeb, G. Szalóki, M. Allain, M. Sallé, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 1746-1750; d) V. Croué, S. Goeb, M. Sallé, *Chem. Commun.* **2015**, *51*, 7275-7289; e) S. Bivaud, S. Goeb, V. Croué, P. I. Dron, M. Allain, M. Sallé, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 10018-10021; f) S. Bivaud, J. Y. Balandier, M. Chas, M. Allain, S. Goeb, M. Sallé, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 11968-11970.

Compétences souhaitées :

Une part importante du projet de recherche sera axée sur la synthèse de ligands organiques électroactifs et de complexes organométalliques. Les conditions d'auto-assemblage seront ensuite optimisées. Un important travail de caractérisation des édifices supramoléculaires sera alors réalisé (selon les cas : RX, RMN multinoyaux, RMN DOSY, spectrométrie de masse (ESI, FTICR), caractérisations électrochimiques, spectroélectrochimiques, fluorescence). Enfin, la préparation de composants OPV et des mesures de rendement de conversion seront réalisés en exploitant le continuum d'expertises « de la molécule aux composant » au sein de l'unité. Ces différentes caractérisations seront menées en partenariat avec d'autres membres de l'UMR, tout en laissant le doctorant au cœur du projet afin de parfaire sa formation.

Le candidat présente un intérêt prononcé pour la synthèse et possède de préférence des connaissances en chimie supramoléculaire et de coordination.

Candidature : Toute candidature (CV, lettre de motivation et relevé de notes M1, M2 ou diplôme d'ingénieur) sera à effectuer sur le site de l'Université Bretagne Loire (UBL) : <https://theses.u-bretagne Loire.fr/3m/>