

TITRE DU PROJET : **Élaboration in silico de systèmes moléculaires pour la fabrication de dispositifs en nano- et opto-électronique**

Equipe d'accueil : **Chimie théorique inorganique**
Institut des Sciences chimiques de Rennes (ISCR)
CNRS - Université de Rennes 1
<https://iscr.univ-rennes1.fr/cti/>



Financement : Contrat doctoral de l'Université de Rennes 1 - démarrage au 01/10/2018
Encadrement : **Karine Costuas** - directeur de recherche CNRS - ISCR
Jérôme Cornil - directeur de recherche FNRS - Université de Mons (Belgique)

Collaborations : Christophe Lescop - chargé de recherche - ISCR -INSA Rennes
Stéphane Rigaut - professeur - ISCR, Université de Rennes 1

Equipe d'accueil. L'équipe "Chimie théorique inorganique" de l'Institut des Sciences Chimiques de Rennes (ISCR - <https://iscr.univ-rennes1.fr/cti/>) est composée de 14 membres (CNRS, Université de Rennes 1 et Ecole nationale supérieure de Chimie de Rennes). Ses axes de recherche s'appuient sur des simulations de chimie quantique pour la rationalisation d'architectures inorganiques complexes (clusters métalliques, verres de chalcogénure), l'étude de structures et propriétés de matériaux solides pour l'énergie et l'étude de systèmes moléculaires fonctionnels pour des applications en opto-électronique ou encore en spintronique. C'est dans ce dernier axe que s'inscrit ce projet de recherche. Une collaboration étroite existe sur cette thématique avec le Service de Chimie des Matériaux Nouveaux de Mons dont un des axes de recherche concerne la modélisation multi-échelle de matériaux pour l'opto-electronique en totale complémentarité avec l'équipe rennais.

Contexte scientifique. Les investissements importants dédiés ces deux dernières décennies à la recherche sur les technologies basées sur l'électronique moléculaire, l'opto-électronique ou encore la spintronique ont conduit à des avancées importantes qui nous amènent aux premières applications en nanotechnologie. L'intérêt majeur de ces systèmes réside dans l'efficacité, c'est à dire une économie d'atomes et d'énergie permettant d'apporter une réponse aux défis environnementaux auxquels l'humanité fait face. Les secteurs couverts sont nombreux, on peut citer notamment les technologies de l'information, la médecine, la sécurité alimentaire, l'énergie (énergie solaire, éclairage...). La faisabilité est démontrée pour un nombre important d'applications comme la détection chimique/biologique, le transport de courant électrique ou encore le stockage de l'information. Deux développements galvanisent maintenant les chercheurs des secteurs privé et institutionnel : (1) l'optimisation des propriétés pour permettre de passer à une étape industrielle, (2) la découverte de nouvelles fonctionnalités permettant d'agrandir le champ des applications.

Description du projet de recherche. Ce projet de recherche vise à contribuer à ces nouvelles voies par une approche particulière où les simulations de chimie quantique serviront d'outil de ciblage de molécules à haut degré de fonctionnalité. En effet, la plupart des nanotechnologies utilisent les propriétés de molécules intégrées dans des dispositifs. Pour ce faire, la stabilité des dispositifs et un maintien de l'efficacité en conditions de fonctionnement sont recherchés. L'expérience acquise par l'équipe rennais en étroite collaboration avec les équipes d'expérimentateurs de l'ISCR et de plusieurs groupes étrangers montre que les simulations quantiques rendent compte de façon quantitative des propriétés moléculaires, notamment en chimie inorganique et organométallique, mais aussi permettent aussi de simuler des dispositifs.*¹ Deux applications seront ciblées : l'éclairage à bas coût et la captation d'énergie thermique à l'échelle nanométrique. Pour le premier objectif, l'utilisation d'atomes métalliques peu chers comme le cuivre seront privilégiés. Dans un environnement de ligands appropriés, les complexes obtenus peuvent être luminescents. Le ciblage in silico consistera à trouver les arrangements moléculaires permettant d'obtenir l'émission la plus intense et la plus stable possible en s'appuyant sur les différences d'énergie entre états excités et les effets relativistes. La piste principale retenue dans ce projet est d'utiliser des systèmes comprenant des atomes métalliques qui permettent d'obtenir des phénomènes de phosphorescence ou de fluorescence retardée et donc des propriétés de luminescence souvent bien plus intéressantes que celles des matériaux purement organiques. Nos travaux récents avec les équipes de C. Lescop de l'ISCR et le groupe de V. W.-W. Yam de l'Université de

Hong-Kong ont permis de montrer des propriétés de fluorescence retardée activée thermiquement à température ambiante pour un complexe polymétallique de cuivre.*² Ce projet de thèse s'appuiera sur ces résultats qui permettent d'envisager un grand nombre de modifications structurales. Les synthèses des meilleurs systèmes seront menées en parallèle des calculs pour permettre des échanges et une optimisation fine où les contraintes expérimentales seront prises en compte.

Cette même approche sera utilisée pour le ciblage *in silico* de composés moléculaires pour des applications thermoélectriques dans l'idée de pouvoir convertir l'énergie perdue (chaleur) de nano-dispositifs en fonctionnement en électricité (récupération d'énergie mais aussi limitation de l'augmentation de température potentiellement néfaste pour le fonctionnement). Cette partie du projet sera développée en collaboration avec l'équipe de l'Université de Mons. Le but est de quantifier la capacité des meilleurs candidats moléculaires insérés dans une jonction électrique à convertir un gradient de température en courant électrique, ou, à l'inverse, à refroidir un matériau par application d'un potentiel électrique. La recherche dans ce domaine en est à ses balbutiements. Ces recherches font suite à nos travaux en collaboration avec l'équipe de S. Rigaut (ISCR), spécialisée dans la synthèse organométallique pour l'électronique moléculaire, et de celle de X. Chen (Nanyang University, Singapour), qui ont permis de concevoir la première jonction moléculaire présentant un transport électronique photo-et electro-modulable.*¹

Candidat(e). Le ou la doctorant(e) recruté(e) disposera donc d'un environnement scientifique international de qualité dans lequel ses travaux de thèse seront un élément majeur. Le (la) candidat(e) devra être détenteur d'un Master 2 recherche en chimie ou chimie-physique. Une formation en chimie quantique (type label de chimie théorique) ainsi qu'une expérience en modélisation seraient un atout supplémentaire.

Pour candidater ou obtenir des informations complémentaires. Envoyer un email à Karine Costuas kcostuas@univ-rennes1.fr

* 1 - F. Meng, Y.-M. Hervault, L. Norel, K. Costuas, C. Van Dyck, V. Geskin, J. Cornil, H. H. Hng, S. Rigaut, X. Chen, *Chem. Sci.*, **2012**, 3, 3113

* 2 - M. El Sayed Moussa, S. Evariste, H.-L. Wong, L. Le Bras, C. Roiland, L. Le Polles, B. Le Guennic, K. Costuas, V. W.-W. Yam, C. Lescop, *Chem. Commun.* **2016**, 52, 11370.