



Offre de thèse à l'Institut des Sciences Chimiques de Rennes
équipe MaCSE, début Septembre 2023

Titre: Synthèse de matériaux moléculaires conducteurs pour le stockage de l'énergie

Lieu : Equipe Matière Condensée et Systèmes Electroactifs (MaCSE) de l'Institut des Sciences Chimiques de Rennes (ISCR), UMR 6226 CNRS, Campus de Beaulieu bat 10A, 35042 Rennes cedex (France)

Encadrants : Pr Dominique Lorcy

Mots clés : Chimie Moléculaire, Matériaux moléculaires conducteurs, Batteries, Energie.

Les matériaux moléculaires, qu'ils soient construits à partir de composés entièrement organiques ou de coordination, suscitent beaucoup d'intérêt pour leurs applications en électronique organique et dans les dispositifs de stockage d'énergie (batteries).^{1,2} Il y a de nombreux avantages à utiliser des composés organiques puisque la synthèse organique nécessite moins d'énergie (par rapport aux céramiques) et que les matériaux organiques peuvent être facilement recyclés. Très récemment le complexe par transfert de charge TTF-TCNQ, généré à partir du tétrathiafulvalène (TTF) comme donneur d'électrons et du tétracyanoquinodiméthane (TCNQ) comme accepteur d'électrons, a été décrit comme très prometteur pour une application dans le stockage électrochimique d'énergie en tant qu'électrode conductrice-sans additif mais aussi en tant qu'additif conducteur doté de propriétés de stockage.¹ Ces résultats avec TTF-TCNQ ouvrent la voie à de nouvelles études sur les matériaux moléculaires conducteurs pour le stockage de l'énergie.

En effet, il existe plusieurs catégories de matériaux moléculaires conducteurs: les complexes par transfert de charge, les sels d'ions radicalaires et les conducteurs simple composant. Ces catégories de matériaux moléculaires présentent des propriétés de conduction électronique et ionique remarquables qui découlent des molécules électroactives (type n ou type p) capables de stocker des électrons réversiblement, en fonction de leur composition chimique et de leur organisation à l'état solide. Le laboratoire d'accueil possède une solide expérience sur la synthèse de précurseurs de ces matériaux et sur l'élaboration de matériaux conducteurs.³

Ce projet de thèse vise à développer de nouvelles familles de molécules organiques (tétrathiafulvalènes, bisrhodanine et analogues) et de complexes de coordination (complexes dithiolène), capables non seulement de fournir des espèces radicalaires lors de l'oxydation ou de la réduction mais aussi de favoriser des interactions intermoléculaires spécifiques entre molécules à l'état solide, vers des composés hautement conducteurs. Ces nouveaux matériaux

moléculaires conducteurs (complexe par transfert de charge, sels d'ions radicaux et conducteurs à composant unique) seront évalués, soit en tant que matériau d'électrode et/ou comme additif conducteur pour le stockage d'énergie en collaboration avec nos collègues de l'Université d'Amiens au LRCS (Laboratoire de Réactivité et de Chimie des Solides UMR CNRS 7314). Ce sujet multidisciplinaire implique un travail important de conception et de synthèse (organique, chimie de coordination) de nouveaux composés organiques et complexes dithiolène électroactifs, leurs caractérisations en solution (RMN, Spectroscopies optiques, électrochimie) et à l'état solide (diffraction des rayons X).

Financement : ANR COMETS de 36 mois (\approx 2135 € brut mensuel)

Profil du candidat : Le futur doctorant devra avoir une solide formation en chimie moléculaire (synthèse organique, chimie de coordination et organométallique, travail sous atmosphère inerte), avec des compétences en électrochimie. Une motivation pour les sciences des matériaux et les propriétés de l'état solide est un atout (croissance cristalline, cristallographie, propriétés électroniques). De bonnes capacités de communication sont nécessaires pour échanger avec les partenaires associés à ce projet pluridisciplinaire.

Les personnes intéressées par cette offre peuvent contacter :

Dominique Lorcy Tél. :02 23 23 62 73, email : Dominique.lorcy@univ-rennes1.fr

Candidature avant le 15 mai 2023 : CV détaillé et Lettre de motivation ; noms et emails de deux contacts pour les recommandations ; relevés de notes de Master 1 et du 1er semestre de M2.

1 Y. Fujihara, H. Kobayashi, S. Takaishi, T. Tomai, M. Yamashita, I. Honma, *ACS Appl Mater Interfaces*, **2020**, *12*, 25748.

2 P. Poizot, J. Gaubicher, S. Renault, L. Dubois, Y. Liang, Y. Yao, *Chem. Rev.* **2020**, *120*, 6490–6557.

3 Y. Le Gal, T. Roisnel, P. Auban, N. Bellec, J. Iniguez, E. Canadell, D. Lorcy, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 6998.