

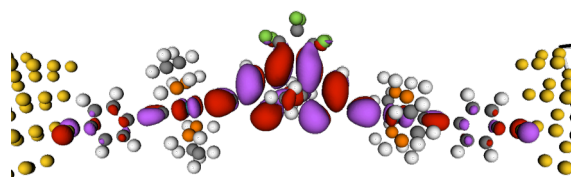
TITRE DU STAGE : **Élaboration de systèmes moléculaires pour la fabrication de jonctions pour la nanoélectronique**

Equipe d'accueil : **Chimie Théorique Inorganique (CTI)**
<https://iscr.univ-rennes1.fr/cti/>
Organométalliques : Matériaux et Catalyse (OMC)
<https://iscr.univ-rennes1.fr/omc/>

Encadrement : **Karine Costuas**
 chercheur CNRS, ISCR équipe CTI
Lucie Norel et Stéphane Rigaut
 enseignants-chercheurs à l'Université de Rennes 1, ISCR équipe OMC

Contexte scientifique : Les effets thermoélectriques bien connus à l'échelle macroscopique permettent de générer un courant électrique par l'application d'une différence de température entre deux extrémités d'un matériau et vice versa. Cette transformation entre énergie thermique et énergie électrique est par contre très peu développée à l'échelle nanométrique. Néanmoins, cette propriété pourrait permettre de réguler la température ou encore de récupérer de l'énergie thermique perdue d'un nano-dispositif en fonctionnement.

Description du projet de recherche : La fabrication de jonctions moléculaires (molécules entre deux électrodes comme composants électroniques) est actuellement bien maîtrisée après une vingtaine d'années de recherche intensive dans le domaine. Le développement vers des applications concrètes nécessite maintenant la conception de molécules à très haut potentiel. Le but de ce stage est d'orienter ces recherches de nouvelles molécules générant des propriétés thermoélectriques. Dans cette optique, le stage sera pour une part dédié au ciblage par des calculs de chimie quantique (simulations numériques) de molécules fonctionnelles permettant la conception de nano-jonctions présentant des propriétés de rectification et de thermoélectricité. Les recherches préliminaires s'orientent vers des fils moléculaires organométalliques qui présentent des structures électroniques favorables pour conduire à des propriétés thermoélectriques en jonction.



Jonction or / complexe organométallique (Ru) / or (cf. réf 1)

Le stage peut s'orienter uniquement sur les études de chimie quantique, ou revêtir un aspect interdisciplinaire expérience-théorie. Le candidat ou la candidate pourra participer à la synthèse des molécules organométalliques cibles ainsi que les mesures et caractérisations physico-chimiques associées de façon concomitante avec les études de chimie quantique.

Un financement d'une bourse ministérielle sera ouvert le 1er octobre 2018 sur ce sujet.

Référence

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.

Pour candidater : écrire à karine.costuas@univ-rennes1.fr ; 02 23 23 69 73

Lieu du stage : Institut des sciences chimiques de Rennes, CNRS - Université de Rennes 1, Campus de Beaulieu, 263 avenue du Général Leclerc, Rennes