

Intitulé du Sujet de Thèse :

Nanographènes chiraux: synthèses et propriétés

Laboratoire : Institut des Sciences Moléculaires de Marseille – UMR7313

Equipe : Synthèse Totale et Réactivité Organique

Directeur de thèse : Dr. Yoann Coquerel

Co-directeur : Dr. Yannick Carissan

Co-encadrant : Prof. Jean Rodriguez

Personne à contacter : Dr. Yoann Coquerel

Courriel : yoann.coquerel@univ-amu.fr

Téléphone : 04 91 28 90 88

Descriptif du projet :

Les hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) possédant des systèmes π étendus sont des molécules très étudiées pour leurs applications en électronique organique (LEDs, cellules photovoltaïques, capteurs, stockage de données...). La très grande majorité de ces molécules possèdent une structure bidimensionnelle comme par exemple le graphène ou des petits fragments de ce dernier appelés "nanographènes".^[1] Cependant, l'accumulation de contraintes stériques dans ces architectures moléculaires relativement rigides permet leur déformation avec l'introduction d'une troisième dimension, conduisant à des HAP à chiralité hélicoïdale comme par exemple les hélicènes.^[2] Du fait de leur surprenante flexibilité, ces HAP étendus 3D racémisent relativement rapidement dans des conditions standards et ne peuvent habituellement pas être obtenus sous la forme d'un seul énantiomère. Le contrôle de la chiralité moléculaire dans les nanographènes apparaît comme une approche très prometteuse pour ajuster finement et exalter les propriétés de ces molécules organiques π -conjuguées. Des travaux préliminaires ont déjà été réalisés au laboratoire.^[3]

Les objectifs du projet sont de **préparer des nanographènes chiraux** énantiopurs par synthèse organique et d'**étudier leurs propriétés moléculaires** par des méthodes expérimentales et de modélisation assistée par ordinateur. La question fondamentale derrière ce projet est: *Quelle sont les possibilités et les limites des HAP chiraux en termes de déformation hors du plan, d'accessibilité synthétique, de réactivité, de stabilité configurationnelle, d'aromaticité localisée, et surtout de propriétés chirales?*

Contexte de l'étude :

Par nature, le projet est **collaboratif et transdisciplinaire** assurant une formation professionnelle initiale très riche et complète de l'étudiant(e) qui en aura la charge. Il implique de la synthèse organique moderne pour la préparation des objets, des techniques de spectrométrie et spectroscopie avancées diverses et variées pour leur caractérisation complète et l'étude de leurs propriétés photophysiques et chiroptiques, ainsi qu'une large part de modélisation et de chimie théorique pour la compréhension approfondie, voire la prédiction, des phénomènes et des propriétés observés, le tout au sein d'une équipe de jeunes chercheur(se)s et de chercheur(se)s confirmé(e)s travaillant en étroite collaboration. La thématique du projet est émergente dans un contexte scientifique international de très haut niveau et en expansion rapide.

Profil :

Le(la) candidat(e) devra justifier d'un Master2 en chimie avec mention Bien minimum et d'une expérience en synthèse organique. Un intérêt pour la modélisation sera apprécié. La candidature devra être envoyée par e-mail à yoann.coquerel@univ-amu.fr et comprendra un CV, le relevé de notes du Master2, une lettre de motivation et au moins une lettre de recommandation.

Date limite de candidature : 1^{er} juin 2018

Références bibliographiques :

[1] Par exemple: Y. Koga *et al.*, *Science* **2018**, 359, 435, DOI: 10.1126/science.aap9801.

[2] M. Rickhaus *et al.*, *Chem. Soc. Rev.* **2016**, 45, 1542, DOI: 10.1039/c5cs00620a.

[3] V. Bereznaia *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139, 18508, DOI: 10.1021/jacs.7b07622.