

Equipe: Organométalliques : Matériaux et Catalyse
<http://iscr.univ-rennes1.fr/omc/>

Ecole Doctorale Matière, Molécules et Matériaux (ED-3M 596)

Université Bretagne Loire - Université de Rennes 1

Offre de thèse (2018-2021)

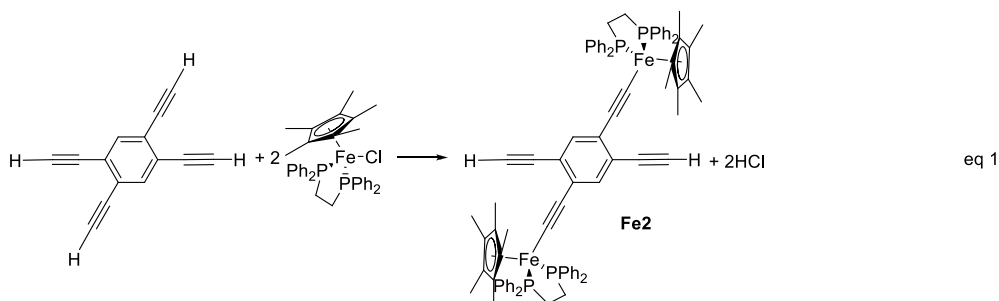
Financée par le ministère de l'Enseignement supérieur, de la Recherche et de l'innovation

Titre du projet: Organométalliques modèles d'automates cellulaires quantiques

Résumé du projet:

Les automates cellulaires quantiques ou “QCA” constituent un sujet brûlant et très innovant. Ils sont essentiels pour le développement d'ordinateurs quantiques. Les propriétés des QCA, basées sur le couplage des charges et des champs électriques, ont été prévues théoriquement et établies expérimentalement à la température de l'hélium liquide sur des dispositifs de 50 nm. Les physiciens prévoient que des QCA moléculaires de 2 nm devraient fonctionner à température ambiante. Il semble admis que des molécules formées de quatre sites redox disposés en carré ou avec une géométrie proche du carré, pourraient constituer un modèle de QCA moléculaire viable.¹ Une description plus détaillée des QCA est disponible en suivant le lien donné en référence 2.

Dans ce contexte, la préparation d'un complexe binucléaire de fer dans lequel les greffons organométalliques sont en position *ortho* d'un cycle benzénique a été récemment décrite.³ Il est maintenant envisagé de préparer un nouveau complexe tétranucléaire de fer **Fe4** (Schéma 1), au travers d'une séquence de deux réactions permettant également l'accès sélectif au complexe intermédiaire binucléaire **Fe2**.



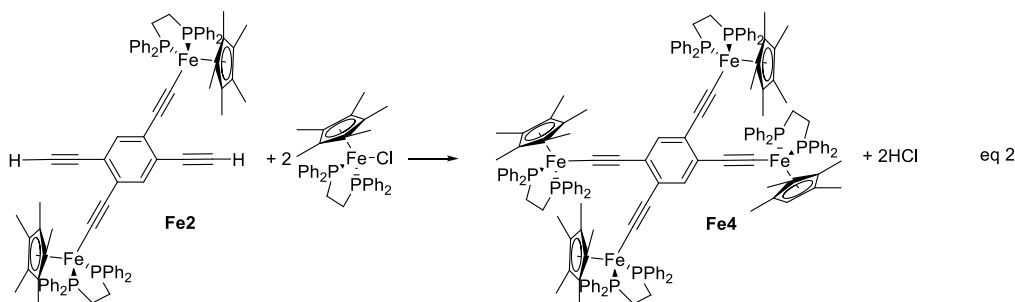


Schéma 1: principe de préparation des complexes **Fe2** et **Fe4**

Le dérivé **Fe2** devrait également servir à m'élaboration de composés hétéro tetranucléaires **Fe2M2**, et de petits oligomères $[\text{Fe}_2]_n$, qui, sous leur forme partiellement oxydée, peuvent être regardées comme des modèles de fils quantique. Un aspect important du projet consistera à caractériser les états oxydés de **Fe4** et **Fe2M2**, et notamment les entités $[\text{Fe}_4]^{2+}$ et $[\text{Fe}_2\text{M}_2]^{2+}$ où deux charges positives sont distribuées sur quatre sites métalliques, c'est-à-dire la situation recherchée dans un QCA.

Références:

1. C. Lent *Science* **2000**, 288, 1597.
2. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0957-4484/4/1/004/pdf>
3. R. Makhoul, H. Sahnoune, V. Dorcet, J.-F. Halet, J.-R. Hamon, C. Lapinte *Organometallics* **2015**, 34, 3314-3326.

Candidature:

Le/la candidat(e) devra posséder de bonnes connaissances en chimie moléculaire. Une expérience en chimie organométallique et/ou de coordination (ou même un simple intérêt) sera un atout supplémentaire. Le/la candidat(e) devra faire preuve d'enthousiasme, d'initiative, d'autonomie et apprécier le travail en équipe. Certains aspects du projet seront menés en collaboration avec d'autres groupes de recherche à l'échelle rennais, nationale et internationale. Une bonne maîtrise de l'anglais sera vivement appréciée.

Les personnes intéressées sont invitées à adresser une lettre de motivation, un CV détaillé, le relevé de notes du master, ainsi que les coordonnées (e-mail et/ou téléphone) de deux personnes pouvant les recommander.

Contacts :

Dr. Jean-René HAMON (jean-rene.hamon@univ-rennes1.fr), Tél.: +33 (0)2 23 23 59 58
 Dr. Claude LAPINTE (claude.lapinte@univ-rennes1.fr), Tél.: +33 (0)2 23 23 59 63