

## STAGE DE RECHERCHE MASTER 2

Institut des Sciences Chimiques de Rennes - Theoretical Inorganic Chemistry group

Encadrants : Arnaud Fihey, Claudine Katan

Contacts : [arnaud.fihey@univ-rennes1.fr](mailto:arnaud.fihey@univ-rennes1.fr), [claudine.katan@univ-rennes1.fr](mailto:claudine.katan@univ-rennes1.fr)

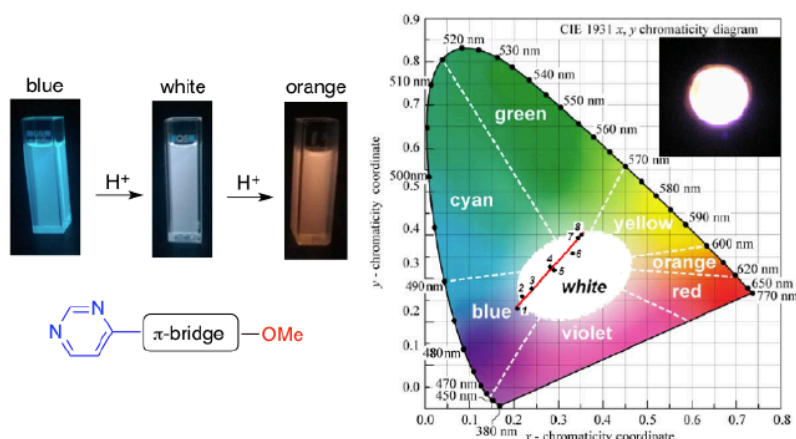
### Spectroscopie théorique appliquée au développement de composés émetteurs de lumière blanche

Mots-clés : Chimie théorique, spectroscopie, chromophore, lumière blanche.

Dates : Février – Juillet 2020

Ce projet de stage à caractère fondamental vise à utiliser des approches théoriques basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et de sa version dépendante du temps (TD-DFT) adaptées à la prédiction, et à la rationalisation des propriétés optiques de chromophores, dans le cadre d'une collaboration entre des expérimentateurs et l'équipe CTI de l'ISCR. La modélisation des propriétés de composés d'intérêt expérimental en amont de leur conception en laboratoire et le dialogue constant avec les expérimentateurs permet en effet d'économiser du temps et des ressources de synthèse précieuses, et d'accélérer le développement de composés organiques adaptés à une application spécifique : l'émission de lumière blanche.

En parallèle des travaux expérimentaux menés par Sylvain Achelle (Université de Rennes I, Institut des Sciences Chimiques de Rennes, OMC), il sera question de développer des molécules organiques susceptibles à elles seules d'émettre un rayonnement se rapprochant d'une lumière « blanche » (OLED blanches). À travers une protonation contrôlée de chromophores  $\pi$ -conjugués



basés sur un motif pyrimidine<sup>1</sup> (voir ci-dessous), il a été notamment démontré que la photo-luminescence finale de la solution obtenue pouvait couvrir un large spectre de longueurs d'onde et se rapprocher ainsi de la chromaticité désirée. Le travail de modélisation est alors ici primordial, que cela se traduise par un balayage des meilleurs candidats ou d'une compréhension fine des mécanismes photochimiques impliqués.

Dans le cadre de telles études, les calculs quantiques de type TD-DFT peuvent se révéler parfois coûteux en ressources informatiques. Afin d'accélérer le processus de conception de chromophores cibles et de permettre la modélisation de systèmes de plus en plus complexes (molécules volumineuses et/ou prise en compte de son environnement direct), il sera également question dans ce stage de mettre en place des protocoles théoriques permettant de calculer les propriétés optiques d'intérêt sur la base du modèle « Density Functional Tight-Binding » (DFTB)<sup>2</sup> et d'évaluer leur performance. Ce travail méthodologique sera mené en collaboration avec le groupe OMC et consistera à valider puis adapter les outils DFTB préexistants à la description des propriétés optiques de chromophore  $\pi$ -conjugués, que ce soit l'absorption, l'émission, ou les réponses d'optique non-linéaire.

1- Achelle S, Rodríguez-López J, Larbani M, Plaza-Pedroche R, Robin-le Guen F. *Molecules*. **2019**, 24(9), 1742.

2- Nishimoto, Y., *J. Phys. Chem. A* **2019** 123 (26), 5649-5659.