

Intitulé du Sujet de Thèse : Etude des relations structure-propriété de poly-alkyleneoxythiophènes électropolymérisés pour l'informatique neuromorphique.

Laboratoire : CINaM UMR 7325

Équipe : Smart Molecules and Surfaces (SMS) - département IMMF

Directeur de thèse HDR (% 100) : Jean-Manuel Raimundo

Co-encadrant (0%) : Tommaso Nicolini

Email : jean-manuel.raimundo@univ-amu.fr ; tommaso.nicolini@univ-amu.fr

Descriptif du projet

Contexte scientifique et objectifs

L'informatique neuromorphique¹, inspirée de l'architecture du cerveau humain, a fait l'objet d'une attention particulière ces dernières années en raison de son potentiel à révolutionner diverses industries. Le composant électronique de base au cœur d'une architecture informatique neuromorphique est un dispositif mémristif, inspiré du concept de memristor². Ces dispositifs sont des interrupteurs à résistance électrique variable et non volatile, influencée par la tension et l'historique du courant³.

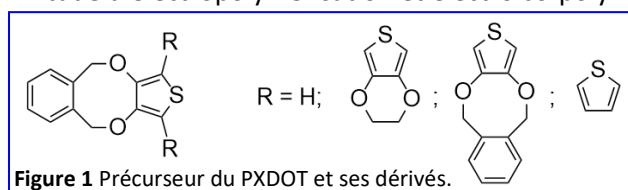
Du point de vue de la recherche sur les matériaux, des dispositifs à base inorganique et organique ont été et sont actuellement développés. Cependant, les matériaux électroniques organiques⁴ promettent de fournir des dispositifs informatiques neuromorphiques légers, peu coûteux, flexibles et sans métaux lourds, basés sur une architecture de transistors électrochimiques organiques (acronyme anglais : OEET)⁵. Les matériaux actifs utilisés dans les OEETs sont des polymères conjugués qui présentent une conduction mixte ionique et électronique (acronyme anglais : OMIEC). Les OMIECs présentent un comportement mémristif grâce à leurs propriétés d'oxydoréduction et à la cinétique de diffusion contrôlée des ions, et ont déjà été intégrés avec succès dans des applications d'apprentissage automatique pour la robotique⁶. Récemment, le poly(3,4-xylylèneedioxythiophène) (PXDOT) électropolymérisé⁷ a montré des propriétés électrochimiques et de transport de charge uniques⁸, y compris un piégeage de charge réversible avec hystérèse⁹, promettant d'obtenir un comportement mémristif par un mécanisme jamais utilisé auparavant.

Cette thèse a l'objectif d'approfondir les études d'électropolymérisation de ces matériaux et, en couplant des techniques électrochimiques, spectroscopiques et conductimétriques, d'établir des relations structure-propriétés mémristives afin de les intégrer dans des dispositifs neuromorphiques organiques. De plus, différents précurseurs du PXDOT seront synthétisés afin de moduler leurs propriétés redox ainsi que les propriétés optoélectroniques finales des polymères conjugués en introduisant d'autres comonomères typiquement utilisés dans les OMIECs.

Axes de recherche

1. Synthèse et électropolymerisation du PXDOT et ses dérivés

- Synthèse du précurseur du PXDOT et de ses dimères et trimères.
- Etude d'électropolymérisation et électro co-polymérisation.

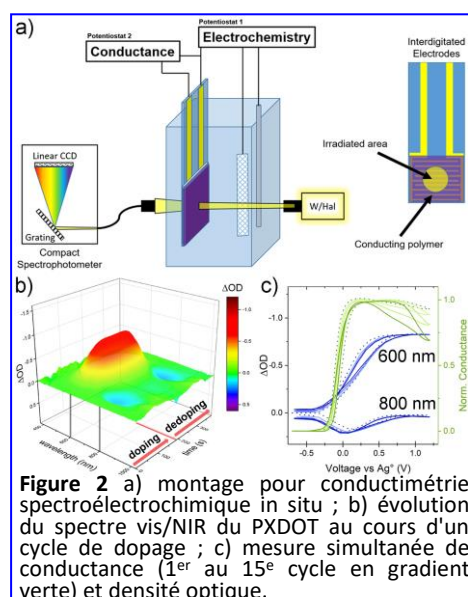


2. Etude du piégeage de charge réversible et hystérétique

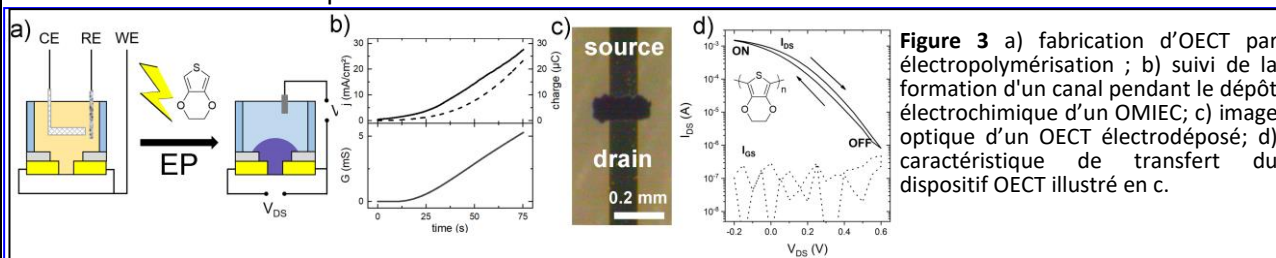
- Conductimétrie spectroélectrochimique (voir Figure 2).
- Rationalisation de relations structure-propriétés par modélisation DFT.

3. Applications en neuromorphique organique

- Intégration des matériaux dans des OEETs par dépôt électrochimique.



- Évaluation des performances de propriétés mémristives par mesures électriques pulsées.
- Tests de stabilité des dispositifs.



Profil recherché

Le(la) candidat(e) devra être titulaire d'un Master (ou diplôme équivalent) en physico-chimie et/ou chimie des matériaux. Au moins une expertise en spectroscopie, en électrochimie moléculaire ou en électronique organique est requise. Une expertise en synthèse sera appréciée. Un intérêt pour la modélisation moléculaire constituera un atout majeur.

Encadrement et environnement scientifique

Le doctorat sera réalisé au sein du CINaM (UMR CNRS 7325), centre interdisciplinaire reconnu pour son expertise entre autres en chimie des matériaux organiques et en électronique moléculaire. La thèse sera encadrée par une équipe de chercheurs spécialistes en chimie organique et en physico-chimie, en étroite collaboration avec des physiciens afin d'assurer la fabrication et caractérisation des dispositifs neuromorphiques.

L'équipe dispose d'un ensemble d'équipements utiles pour la synthèse, la purification et la caractérisation des molécules organiques (réacteur à micro-ondes, HPLC, combi-flash, spectroscopie UV-Vis, potentiostat-galvanostats pour l'électrochimie et la spectroélectrochimie) et bénéficie au sein du CINaM d'un ensemble de plateformes internes (RMN, MEB, TEM, mesures électriques, salle blanche, salle de physico-chimie (ATG, DSC, IRTF, UV-Vis, spectrofluorimètre etc.)) ainsi que d'un accès à des ressources computationnelles (CRCMM) pour la modélisation DFT afin de compléter l'analyse et les caractérisations des molécules et matériaux élaborés.

Candidature

Les candidat(e)s intéressé(e)s sont invité(e)s à soumettre leur dossier comprenant un CV détaillé, une lettre de motivation et les relevés de notes du Master à Jean-Manuel Raimundo (jean-manuel.raimundo@univ-amu.fr) et Tommaso Nicolini (tommaso.nicolini@univ-amu.fr).

Références bibliographiques

- [1] Monroe, D. [Neuromorphic computing gets ready for the \(really\) big time](#). *Commun. ACM* **57**, 13–15 (2014).
- [2] Chua, L. [Memristor-The missing circuit element](#). *IEEE Trans. Circuit Theory* **18**, 507–519 (1971).
- [3] Yang, J. J. *et al.* [Memristive devices for computing](#). *Nature Nanotechnology* **8**, 13–24 (2013).
- [4] van de Burgt, Y. *et al.* [Organic electronics for neuromorphic computing](#). *Nat. Electron.* **1**, 386–397 (2018).
- [5] Rivnay, J. *et al.* [Organic electrochemical transistors](#). *Nat. Rev. Mater.* **3**, 17086 (2018).
- [6] Krauhausen, I. *et al.* [Organic neuromorphic electronics for sensorimotor integration and learning in robotics](#). *Sci. Adv.* **7**, eabl5068 (2021).
- [7] Salinas, G. *et al.* [Electrochemical polymerization, characterization and in-situ conductivity studies of poly-3,4-ortho-xylendioxythiophene \(PXDOT\)](#). *Synth. Met.* **245**, 135–143 (2018).
- [8] Salinas, G. *et al.* [Electrochemical behavior of poly-bithiophene, poly-3,4-ethylendioxythiophene and poly-3,4-ortho-xylendioxythiophene in EtOH/H₂O \(1:1\) mixture](#). *Synth. Met.* **237**, 65–72 (2018).
- [9] Nicolini, T. *et al.* [In Situ Spectroelectrochemical-Conductance Measurements as an Efficient Tool for the Evaluation of Charge Trapping in Conducting Polymers](#). *J. Phys. Chem. Lett.* **12**, 10422–10428 (2021).