

AVIS DE SOUTENANCE DE THÈSE

DOCTORAT (Arrêté du 26 août 2022 modifiant l'arrêté du 25 mai 2016)

Madame Federica SOLANO

candidate au diplôme de Doctorat de l'Université d'Angers, est autorisée à soutenir publiquement sa thèse

le 06/12/2023 à 09h00

**Faculté des Sciences
2, boulevard Lavoisier
49045 ANGERS Cedex 01**

sur le sujet suivant :

Functionalized BVD-TTF for electro-active coordination polymers and molecular conductors

Directeur de thèse : **Monsieur Narcis AVARVARI**

Composition du jury :

Monsieur Narcis AVARVARI, Directeur de Recherche CNRS Université d'Angers, Directeur de thèse
Monsieur Stéphane BAUDRON, Directeur de Recherche CNRS Université de Strasbourg, Rapporteur
Madame Aude DEMESSENCE, Chargée de recherche CNRS Université Claude Bernard Lyon 1, Rapporteur
Madame Maria Laura MERCURI, Professeur Université Cagliari, Italie, Examinatrice
Monsieur Marc SALLÉ, Professeur des Universités Université d'Angers, Examineur
Monsieur Nicolas ZIGON, Maître de Conférences Université d'Angers, Co-encadrant
Madame Iwona OLEJNICZAK, Senior Researcher Institute of Molecular Physics of the Polish Academy of Sciences, Poznan, Pologne, Membre Invité



Résumé de la thèse

Un matériau conducteur poreux serait un atout majeur dans diverses applications telles que les électrodes de batteries ou de piles à combustible, ainsi que les supercondensateurs. Les polymères de coordination (MOFs) sont des matériaux cristallins formés par la combinaison de métaux et de ligands polytopiques. Ils sont généralement poreux mais pas ou peu conducteurs. Les travaux décrits dans cette thèse portent sur la conception et l'étude de MOFs électroactifs. Ils visent à comprendre la relation entre leur structure et leurs propriétés électroniques, ainsi que le rôle joué par les interactions π - π dans la mobilité des porteurs de charge. Dans le cadre de notre étude, nous nous sommes particulièrement intéressés aux réseaux basés sur l'échafaudage BVD TTF, qui est une structure dérivée du tétrathiafulvalène (TTF) par l'incorporation de vinylènes soufrés supplémentaires. La surface π et le nombre d'atomes de soufre plus importants confèrent aux structures obtenues une meilleure dispersion de leur bande de conduction. Les réseaux ont été oxydés post-synthétiquement pour améliorer leur conductivité électrique. L'analyse structurale aux rayons X, la spectroscopie Raman et l'analyse computationnelle ont permis de comprendre les voies de transport de charge au sein de ces réseaux. Dans le domaine des sels à transfert de charge, nous avons exploré des variantes insaturées du BEDT-TTF : BVD-TTF (Bis(Vinylenedithio)-Tetrathiafulvalene) et EVT-TTF (Ethylène-vinylenedithiotetrathiafulvalene). Quatre nouveaux sels conducteurs ont été synthétisés et caractérisés par spectroscopie RX et Raman. Ces composés présentent un comportement semi-conducteur, avec des conductivités à température ambiante comparables aux sels BEDT-TTF avec des anions similaires