

Stage de Master 2 ou de projet de fin d'études

Résolution de structure d'un complexe polymère de PEDOT :PSS grâce à la reconstruction d'images en cryo-TEM

Alexis BIGO--SIMON (abigosimon@unistra.fr), Marc SCHMUTZ (marc.schmutz@ics-cnrs.unistra.fr), Laure BINIEK (laure.biniek@ics-cnrs.unistra.fr)

Description synthétique du sujet :

La cryo-microscopie électronique (cryo-EM) a révolutionné la découverte des structures de macromolécules, notamment grâce à l'obtention de la résolution atomique. Le défi actuel réside dans l'adaptation de ces techniques à des structures plus petites, telles que les complexes polymériques, notamment le poly(3,4-ethylenedioxythiophène) : (polystyrène sulfonate) ou PEDOT:PSS. Ce polymère semi-conducteur est le plus utilisé aussi bien au niveau académique ou industriel dans diverses applications de la conversion d'énergie mais également du biomédical. Or sa structure (dont dépendent directement les propriétés opto-électroniques)¹ n'a encore jamais été résolue. En 2023, nous avons, pour la première fois, démontré (par cryo-TEM et SAXS) l'assemblage fibrillaire de ce complexe de polymère au sein d'une dispersion aqueuse.² L'objectif est d'élucider la structure de ces complexes pour comprendre en détail les interactions qui forment le réseau fibrillaire, et ainsi expliquer principalement les propriétés électroniques du matériau.

Le stage consistera à analyser des images cryo-TEM de PEDOT :PSS à très haute résolution , obtenues à l'aide d'un microscope Glacios équipé d'une caméra K2 et une collaboration avec l'IGBMC, Illkirch, France. L'objectif sera de résoudre la structure moléculaire du PEDOT :PSS en générant une carte de projection 3D, permettant d'y intégrer une structure chimique du complexe. Ce travail fera appel à des outils modernes de traitement d'images à haute résolution.³ Les résultats pourront être corrélés aux résultats d'analyses structurales par diffusion des rayons X.

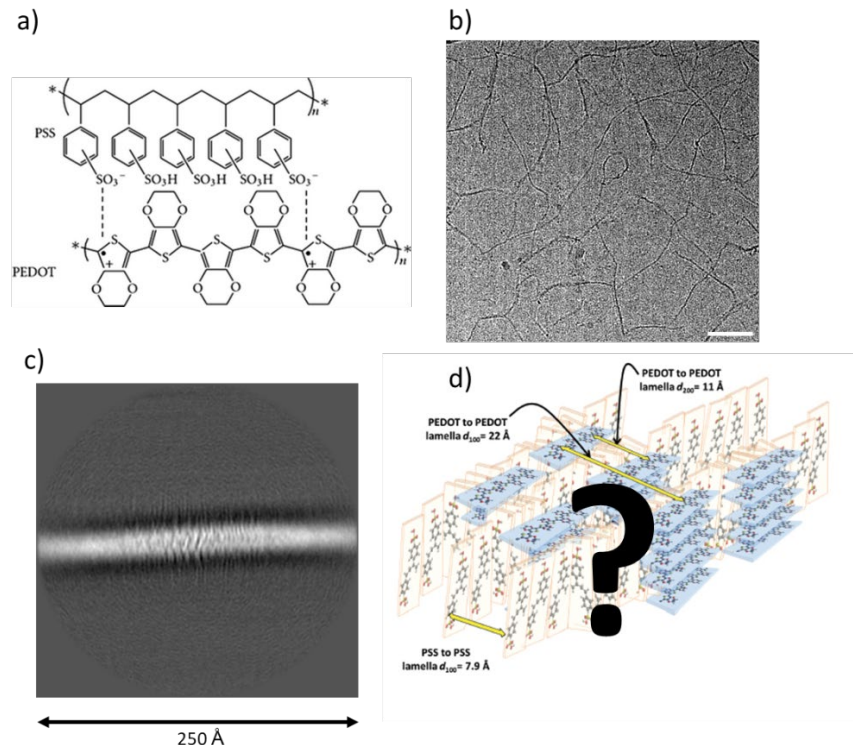


Figure 1 : a) Structure chimique du PEDOT :PSS, b) Image TEM en haute résolution (0.9 Å/pix) de la dispersion, c) une première classification 2D avec l'apparition d'un motif au centre et d) une potentielle structure proposée par Hosseini et al.⁴



- (1) [Weinbach, Biniek et al., *Front. Electron. Mater* 2022, 2](#)
- (2) [Weinbach, Schmutz, Biniek et al. *J. Mater. Chem. C*, 2023,11, 7802-7816](#)
- (3) Bigo—Simon, Schmutz et al., *ACS Nano*, 2024 (under revision)
- (4) Hosseini et al. *J. Mater. Chem. C*, 2020, 8, 3982-3990

Profil de l'étudiant(e) :

L'étudiant(e) doit avoir suivi un cursus de chimie, chimie – physique, physique des matériaux ou de traitement de l'images. Le/la candidat(e) doit être motivé(e), autonome, faire preuve de qualités humaines et relationnelles pour un travail d'équipe pluridisciplinaire et dans un cadre multiculturel. Une attention particulière sera portée à la qualité du CV et de la lettre de motivation des candidat(e)s qui devront être envoyés avec le relevé de note du M1 aux co-encadrants de stage.

Un mot sur l'Institut Charles Sadron (ICS) :

L'Institut Charles Sadron (ICS) est une unité propre du CNRS (UPR) qui se focalise sur l'étude des polymères, macromolécules et matériaux mous allant de leur synthèse à leur caractérisation pour études théoriques, fondamentales et appliquées. L'ICS est situé sur le campus de Cronembourg à 10 minutes en transport en communs / vélos de Strasbourg (<https://www.ics-cnrs.unistra.fr/>). Le ou la stagiaire intégrera l'équipe SYCOMMOR - Systèmes Complexes Moléculaires et Macromoléculaires Organisés et bénéficiera des ressources communes du laboratoire. Merci de noter que le laboratoire est considéré ZRR (Zone à Régime Restrictive).