

AVIS DE SOUTENANCE DE THÈSE

Monsieur Chen ZHANG

Candidat au Doctorat de Chimie,
de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour

Soutiendra publiquement sa thèse intitulée :
Synthèse, caractérisation et calculs de la structure électronique de certaines familles d'hydrocarbures aromatiques polycycliques dopés au BN

Dirigée par Madame Shih-Yuan LIU

le 6 avril 2023 à 10h00

Lieu : IPREM 2 Avenue du Président Pierre Angot 64000, Pau

Salle : Amphithéâtre IPREM

Composition du jury :

M. Shih-Yuan LIU, Full professor	Boston College	Directeur de thèse
M. Panagiotis KARAMANIS, Chargé de recherche	Université de Pau et des Pays de l'Adour	Co-encadrant de thèse
M. Holger BETTINGER, Professeur	Université de Tübingen	Rapporteur
M. Emmanuel KOUKARAS, Professeur assistant	Université Aristote de Thessalonique	Rapporteur
Mme Anna CHROSTOWSKA, Professeure des universités	Université de Pau et des Pays de l'Adour	Examinatrice
M. Jean-François HALET, Directeur de recherche	National Institute for Materials Sciences	Examineur

Résumé :

Les hydrocarbures aromatiques polycycliques contenant du bore et de l'azote (BN) ont des applications potentielles en science des matériaux. Dans cette thèse, une nouvelle voie de synthèse pour la synthèse d'arènes contenant du BN, complétée par des investigations informatiques structure-propriété systématiques, est présentée et discutée. La méthode de synthèse développée a été appliquée à la préparation du BN-2,1-naphtalène, un nouvel isostère parental BN du naphtalène, et de certains de ses dérivés. La stratégie proposée est générale et pourrait potentiellement être appliquée à d'autres systèmes π dopés BN de plus grande taille. Le travail de calcul de cette thèse est divisé en deux parties. La première partie est consacrée à l'élucidation des effets du dopage BN sur les propriétés de l'état fondamental et excité de seize isomères du phénanthrène dopés BN. La deuxième partie traite de l'évaluation des propriétés moléculaires des phénanthrènes dopés au BN et fonctionnalisés avec des groupes donneurs et accepteurs. Les propriétés d'intérêt comprennent les géométries des états fondamental et excité, les orbitales moléculaires, l'aromaticité, les moments dipolaires, les énergies d'excitation verticale et/ou adiabatique. Les méthodes de calcul impliquent principalement la théorie de la fonction de la densité et des méthodes ab-initio de haute précision prédictive dans le cadre d'approximations de champs autoconsistants couplés en grappes et multi-configurationnels. Les résultats obtenus mettent en lumière des corrélations structure-propriété utiles pour la conception de systèmes organiques dopés au BN dans les applications de matériaux.