

AVIS DE SOUTENANCE DE THÈSE

Julia SABALOT SABALOT-CUZZUBBO

CANDIDAT(E) au DOCTORAT CHIMIE,
à **L'UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR**
SOUTIENDRA PUBLIQUEMENT sa THÈSE

le **06 avril 2022 à 10h00**
à **L'UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR**
Amphithéâtre H - Bâtiment Duboué

SUR LE SUJET SUIVANT :

"Chimie structurale et électronique : rôle de la symétrie et de la courbure"

JURY :

Didier BEGUE, Professeur des Universités, UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR
Yannick CARISSAN, Maître de Conférences, HDR, AIX-MARSEILLE UNIVERSITÉ
Karine COSTUAS, Directrice de Recherche CNRS, UNIVERSITÉ DE RENNES 1
Jacky CRESSON, Professeur des Universités, UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR
Panagiotis KARAMANIS, Chargé de Recherche CNRS, CNRS-UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR
Sergey KRANOSHCHEIKOV, Professeur, UNIVERSITÉ D'ÉTAT LOMONOSOV DE MOSCOU (RUSSIE)
Corinne NARDIN, Professeur des Universités, UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR
Alfonso SAN MIGUEL FUSTER, Professeur des Universités, UNIVERSITÉ CLAUDE BERNARD LYON1

Pau, le 30 mars 2022

Le Président et,
Par délégation, la Vice-Présidente de la Commission de la
Recherche

p.o. Isabelle BARAILLE



Directeurs de thèse :
D. BEGUE et J. CRESSON
(IPREM)

Résumé :

Cette thèse est le fruit de 3 années de travail reposant sur le sujet intitulé : "Chimie Structurale et Electronique: Rôle des Symétries et de la Courbure".

L'originalité de la thématique abordée dans ce travail se trouve dans la pluridisciplinarité du sujet qui fait appel à la fois aux chimistes théoriciens et aux mathématiciens. Une importante partie des travaux se base sur la compréhension de la chimie théorique et de son utilisation par modélisation.

Un des objectifs alloués à ce travail, est la compréhension des systèmes moléculaires par des outils géométriques principalement initiés par Robert C. Haddon dès 1997. Nous avons tout d'abord proposé une clarification et une généralisation de ces outils basés sur des matériaux carbonés comme les fullerènes dont l'étude des caractéristiques topologiques est largement exploitée dans ce manuscrit. L'ensemble des points théoriques et des outils développés (l'angle de pyramidalisation, la courbure sphérique, le défaut angulaire, et l'hybridation) ont été largement illustrés avec des cartographies par l'utilisation d'outils de programmation et de logiciels qui ont permis l'étude de la déformation, de la courbure et l'étude des propriétés chimiques et physiques des systèmes.

L'utilisation des outils issus de ce travail devrait permettre de pouvoir faciliter la modélisation de molécules sans limitation de tailles et pour des systèmes dont la modélisation par des calculs ab-initio ou DFT reste inaccessible.

Nous avons également cherché à montrer le lien pouvant exister entre la géométrie des systèmes et l'information orbitale. Nous nous sommes intéressés à titre d'exemples à de nombreux systèmes pour la plupart carbonés et potentiellement aromatiques.

Enfin, nous avons proposés l'étude des critères d'aromaticité suivant les théories énoncées entre autre par Hückel. Par cette étude, nous nous sommes penchés sur des systèmes linéaires moins connus i.e. les [n]-cumulènes qui présentent en particulier la curiosité de posséder des orbitales hélicordales. Nous avons établis les critères d'apparition de ce type d'hélices en fonction de la symétrie moléculaire.

Le but in fine de ce travail, était de réussir à faire le lien entre des caractéristiques topologiques et la réactivité chimique de ces molécules et matériaux.