# AVIS DE SOUTENANCE DE THÈSE
# EN COTUTELLE

**Monsieur Gabriel GOMES BALTAZAR ALVES**

Candidat au Doctorat de Chimie polymères,
de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour
En cotutelle avec l'Université d'État Paulista Julio de Mesquita Filho - AUF, Bauru (BRESIL)

Soutiendra publiquement sa thèse intitulée :
*L'étendue de l'applicabilité des descripteurs de réactivité : Du prédicteur de voies chimiques au transfert de charge et à la description du transport*

Dirigée par Monsieur DIDIER BEGUE et Monsieur Batagin-Neto Augusto

le 29 avril 2025 à 9h00
Lieu : Held online on Google meet service. The link will available by the post graduation program from Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho - Unesp, Brazil
Salle : Defense room in POSMAT - UNESP, Bauru

## Composition du jury :

| | | |
|---|---|---|
| M. Didier BEGUE, Professeur des universités | Université de Pau et des Pays de l'Adour | Directeur de thèse |
| M. Augusto BATAGIN-NETO, Professeur | Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho (UNESP) | Co-directeur de thèse |
| Mme Paula HOMEM-DE-MELLO, Professeur | Université fédérale de l'ABC | Rapporteure |
| M. Rafael PLANA SIMÕES, Professeur | Université Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho (UNESP) | Rapporteur |
| Mme Clarissa DE ALMEIDA OLIVATI, Professeur | Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho (UNESP) | Examinatrice |
| Mme Christine LARTIGAU-DAGRON, Maître de conférences HDR | Université de Pau et des Pays de l'Adours | Examinatrice |

AVIS DE SOUTENANCE DE THÈSE EN COTUTELLE

de Monsieur Gabriel GOMES BALTAZAR ALVES

**Mots-clés :** accepteurs non-fullerènes, cellule solaire organique, calculs de structure électronique, descripteurs de réactivité, voies chimiques, indicateur de région interactif

**Résumé :**

L'utilisation d'outils de calcul dans la science des matériaux n'est pas une nouveauté. Par exemple, la théorie de la fonctionnelle de la densité est un élément essentiel de la physique du solide depuis environ cinquante ans. Au fil du temps, la technologie évolue, de même que les méthodes de calcul, leur précision et leur fiabilité. Bien entendu, plus une méthode est complexe et complète, plus elle est coûteuse en termes de calcul. Une méthode coûteuse est une méthode qui requiert un temps de calcul important. Cependant, il existe des outils qui ne sont pas coûteux et qui produisent des résultats fiables. L'un de ces outils est le descripteur de réactivité, à la fois simple sur le plan théorique et computationnel, mais qui offre des résultats très fiables, alignés sur d'autres méthodes et données expérimentales. Ce travail a pour but d'explorer de nouvelles voies avec les descripteurs de réactivité, en les utilisant pour d'autres calculs que ceux de la réactivité. Dans le premier chapitre, le descripteur appelé indices de Fukui atomiques condensés, qui est généralement utilisé pour décrire les sites réactifs dans une molécule, est utilisé pour décrire les sites de récupération et de réception d'électrons, comme outil pour définir ce qu'est un bon ou un mauvais matériau donneur/accepteur d'électrons pour les applications de cellules solaires organiques. En outre, le deuxième chapitre applique la douceur globale au descripteur précédent pour construire ce que l'on appelle la douceur locale, un descripteur utilisé pour classer la probabilité que deux molécules interagissent et avec quels atomes. Toutefois, ce descripteur est utilisé ici pour identifier les atomes susceptibles d'interagir au sein d'une même molécule, ce qui modifie sa structure et en fait une nouvelle molécule. L'objectif est de contribuer à l'identification des voies de transformation du 1-azafulvenallène en phénylnitrène. Les résultats montrent que, bien que simples, les descripteurs de réactivité permettent d'obtenir des résultats fiables et précis, allant au-delà des simples études de réactivité et peuvent être utilisés pour décrire le transfert de charge et trouver des voies de réaction chimique.