

AVIS DE SOUTENANCE DE THÈSE EN COTUTELLE

Monsieur João Paulo CACHANESKI LOPES

Candidat au Doctorat de Chimie spécialité 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 (BRÉSIL)

Soutiendra publiquement sa thèse intitulée :

Structure électronique des composés d'origine naturelle et de leurs dérivés pour application en électronique organique

Dirigée par Monsieur DIDIER BEGUE et Monsieur Augusto Batagin-Neto

le 29 octobre 2025 à 13h30

Lieu : 519, Geraldo Alckmin, Vila Nossa Senhora de Fátima, Bloco 8, CEP: 18409-010, Itapeva, São Paulo, Brasil.
Salle : 16

Composition du jury :

M. Didier BÉGUÉ, Professeur des universités	Université de Pau et des Pays de l'Adour	Directeur de thèse
M. Augusto BATAGIN-NETO, Professeur	Université d'État Paulista	Co-directeur de thèse
Mme Paula HOMEM-DE-MELLO, Professeur	Université fédérale de l'ABC	Rapporteure
Mme Marystela FERREIRA, Professeur	Université Fédérale de São Carlos	Rapporteure
Mme Christine LARTIGAU-DAGRON, Maître de conférences HDR	Université de Pau et des Pays de l'Adour	Examinatrice
Mme Clarissa DE ALMEIDA OLIVATI, Maître de conférences	Université d'État Paulista	Examinatrice

Mots-clés : composés à base de mélanine, détection de nitroaromatiques, cellules solaires organiques, théorie de la fonctionnelle de densité (DFT), matériaux durables

Résumé :

L'intégration de composés naturels dans les matériaux suscite un intérêt croissant en chimie, en raison de leurs avantages à la fois pratiques et économiques. Bien que des travaux antérieurs aient mis en évidence des modifications de la stabilité et des propriétés optoélectroniques de certains de ces matériaux fonctionnalisés, des informations détaillées concernant leurs caractéristiques à l'échelle moléculaire ainsi que les mécanismes fonctionnels associés à ces ajouts demeurent encore limitées. Dans cette thèse, l'objectif a été d'étudier des composés bio-inspirés à base de mélanine pour une application dans les capteurs chimiques et les cellules solaires organiques, à travers des calculs de structure électronique basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Deux axes principaux ont été explorés : i) la faisabilité de composés à base de vanilline pour la détection des nitroaromatiques (NAC) et ii) la proposition/évaluation des performances de composés inspirés de la mélanine en tant qu'accepteurs/donneurs dans des cellules solaires organiques à hétérojonction en volume. Le premier axe étudie l'interaction entre des systèmes à base de mélanine et des NACs, en examinant leurs propriétés électroniques, optiques, structurales et de stabilité. Les résultats montrent que les dérivés de la mélanine présentent une sensibilité élevée à ces analytes, permettant une détection chimique sélective, réversible, peu coûteuse et respectueuse de l'environnement. Concernant le second axe, une série de molécules donneuses et accepteurs basées sur des dérivés du composé Y6 et des motifs inspirés de l'eumélanine a été proposée et étudiée. Nos résultats indiquent que des groupes terminaux dérivés de la mélanine peuvent conférer des propriétés optiques et électroniques uniques, permettant la conception de matériaux accepteurs performants, tandis que des oligomères de type eumélanine apparaissent comme des donneurs prometteurs. Ces résultats soulignent comment des modifications chimiques bio-inspirées peuvent améliorer à la fois l'efficacité et la durabilité de la prochaine génération de composés dans l'électronique organique.