

AVIS DE SOUTENANCE DE THÈSE

Aniket HANDE

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

le **05 mars 2020 à 10h00**
à **L'UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR**
Amphithéâtre de l'IPREM

SUR LE SUJET SUIVANT :

"Nano-graphènes paramagnétiques - dérivés des radicaux de Blatter"

JURY :

Holger BETTINGER, Professeur, UNIVERSITÉ DE TÜBINGEN (ALLEMAGNE)

Stéphane CAMPIDELLI, Directeur de Recherche, CEA Saclay

Anna CHROSTOWSKA, Professeur des Universités, UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR

Piotr KASZYNSKI, Professeur, UNIVERSITÉ DE LODZ (POLOGNE)

Panayiotis A. KOUTENTIS, Professeur, UNIVERSITÉ DE CHYPRE (CHYPRE)

Karinne MIQUEU, Directeur de Recherche CNRS, IPREM - UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR

Pau, le 16 février 2021

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

p.o. Isabelle BARAILLE



UNIVERSITÉ
DE PAU ET DES
PAYS DE L'ADOUR
Tél. : 05 59 40 70 00
www.univ-pau.fr

Avenue de
l'Université
BP 576
64012
PAU Cedex

S. Mercier
Directrice ED 211

Directeur de thèse : Anna CHROSTOWSKA

Laboratoire : IPREM

Abstract :

This thesis describes the synthesis and electronic structure characterization of 2-phenyl-3*H*-[1,2,4]triazino[5,6,1-*kl*]phenoxazin-3-yl (planar Blatter radical) and its derivatives by Ultra-Violet photoelectron spectroscopy (UV-PES). First part describes synthesis and electronic structure of Blatter radical and a series of C(10)-substituted derivatives of planar Blatter radicals containing H, F, Cl, Br, CN, CF₃ and OMe substituents was investigated by gas phase UV-photoelectron spectroscopy. The radicals were also analyzed by electron paramagnetic resonance, UV vis and electrochemical methods. The interpretation of photoelectron spectra was supported by quantum calculations using DFT CAM-B3LYP/6-311G(d,p) method. The comparative analysis of theoretical and the experimental ionization energies are presented. The second part of the manuscript deals with the effect of expansion of the π -system and increased spin delocalization on the planar Blatter radicals containing naphthalene, phenanthrene and pyrene rings. The electronic structure of these radicals were investigated by UV-photoelectron spectroscopy and compared to DFT computational results obtained at the CAM-B3LYP/6-311G(d,p) level of theory. The final part presents some functional group transformations for C(10)-substituted derivatives of planar Blatter radicals and their spectroscopic and electrochemical characterizations, as well as computationally studied physical chemistry description.