

Laboratoire : LASIR UMR 8516

Discipline : Sciences Physiques

NOM/PRENOM DU CANDIDAT : ORIO Maylis

N° d'ordre : 41493

JURY :

Garant de l'habilitation : Hervé Vezin (LASIR, Lille)

Rapporteurs : Didier Gourier (UPMC, Paris), Bruno Guigliarelli (BIP, Marseille), Ilaria Ciofini (UPMC, Paris)

Membres : Dimitrios Pantazis (CEC, Mülheim-an-der-Ruhr, Allemagne), Carole Duboc (DCM, Grenoble), Guy Buntinx (LASIR, Lille)

TITRE :

Application des outils de la chimie quantique et apport de la spectroscopie de Résonance Paramagnétique Électronique pour la caractérisation structurale et dynamique d'architectures moléculaires

RESUME :

Les travaux qui seront présentés dans le cadre de cette soutenance sont dédiés à l'application des outils de la chimie quantique tels que ceux basés sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) et à l'apport de la spectroscopie de Résonance Paramagnétique Électronique (RPE) pour la caractérisation structurale et dynamique d'architectures moléculaires relevant du domaine de la chimie bio-inorganique. Ces activités de recherche concernent l'étude aussi bien sur le plan théorique que sur le plan expérimental de systèmes à couches ouvertes (composés organiques et inorganiques) pour des applications en biologie, en environnement et en catalyse. L'objectif principal de mes travaux est de déterminer les spécificités structurales (paramètres géométriques et électroniques) et dynamiques (observables magnétiques et spectroscopiques) des entités concernées dans le but de déterminer les conditions optimales pour réaliser les meilleurs systèmes modèles en termes de réactivité et d'activité catalytique. Ces travaux visent également à la mise en place de relations du type «structurepropriété-activité» dont les objectifs sont multiples : prédiction de structures, utilisation comme sonde structurale (dans les enzymes) et conception de nouveaux systèmes (pour la catalyse ou la biochimie). L'utilisation couplée des méthodes théoriques à celles de spectroscopies RPE en ondes continues et impulsionsnelles pour les études de systèmes d'un point de vue macroscopique s'avère être une approche pertinente pour identifier des espèces inconnues, rationaliser leurs propriétés moléculaires et définir des corrélations magnéto-structurales. La présentation orale synthétisera l'essentiel des travaux de recherche que j'ai menés depuis mon doctorat et que j'ai poursuivis depuis mon intégration en 2010 au Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman. La première partie présentera les développements méthodologiques qui ont été réalisés pour modéliser et prédire les propriétés magnétiques et spectroscopiques de systèmes polynucléaires à base de métaux de transition. Dans la seconde partie, je détaillerai les différentes études que j'ai effectuées sur des systèmes relevant du domaine de la chimie bio-inorganique. Je montrerai l'intérêt de l'utilisation d'une approche couplant théorie et expérience pour caractériser des systèmes complexes. Dans la troisième et dernière partie, j'aborderai les perspectives et extensions que je compte apporter à ces différents travaux. Je développerai les différents projets qui seront menés par la suite et qui utiliseront aussi cette double approche ainsi que certains des développements méthodologiques.

Soutenance le 26 septembre 2014 à 10 Heures

Lieu : Amphithéâtre CERLA