

Proposition de financement doctorale pour la rentrée 2019-2020

Titre de la thèse :

Description et Prédiction de Processus Réactifs par l'Analyse Topologique de
Fonctions de Localisation Electroniques

Directeur de thèse : Julien PILME (pilme@lct.jussieu.fr)

Laboratoire d'accueil : LCT – UMR 7616

L'objectif de la thèse est d'évaluer et d'utiliser les capacités prédictives des descripteurs topologiques pour identifier et discriminer les sites réactifs d'une molécule ainsi que pour décrire et prédire des chemins impliqués dans des mécanismes complexes. Afin de disposer d'un outil opérationnel, de nouveaux algorithmes de partition et d'automatisation seront nécessaires. Ces développements sont motivés par deux sujets applicatifs majeurs. D'une part, comprendre la dynamique de réponse de la structure électronique de biomolécules soumises à des rayonnements ionisants et, d'autre part, décrire et prédire la réactivité de substrats impliqués dans les mécanismes de formation d'éthers et de thioéthers. Le dialogue théorie-expérimental sera un point fort d'apprentissage. L'objectif à terme est de proposer des descripteurs alternatifs à ceux proposés par la DFT conceptuelle et utilisables dans des contextes chimiques très différents.

Mots clés : Descripteurs topologiques – chimie sous rayonnement - Réactivité–