

Proposition de financement doctorale pour la rentrée 2018-2019

Titre de la thèse :

Prédiction de processus réactifs par l'analyse topologique des fonctions de localisations. Application à la formation d'éthers et thioéthers.

Directeur de thèse : Julien PILME (julien.pilme@sorbonne-universite.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 afin de prédire les chemins de réactions impliqués dans des mécanismes complexes en phase gazeuse ou dans un solvant. Un nouveau code de calcul sera élaboré afin de disposer d'un outil opérationnel permettant notamment une recherche automatisée des points critiques le long des chemins de réactions. Cette nouvelle méthodologie sera ensuite appliquée à l'étude de la réactivité de substrats impliqués dans les mécanismes de formation d'éthers et de thioéthers. Le dialogue théorie-expérience sera aussi un point fort d'apprentissage. L'idée est de proposer à terme des descripteurs alternatifs à ceux proposés par la DFT conceptuelle qui soient utilisables aussi bien au niveau DFT que pour les calculs corrélés.

Mots clés : Réactivité– ELF - Topologie – Nucléophilie