

## AVIS DE SOUTENANCE DE THÈSE

**Monsieur Danylo HATYCH**

Candidat au Doctorat de Chimie,  
de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour

Soutiendra publiquement sa thèse intitulée :

*Vers la synthèse et la caractérisation des dérivés d'azulène dopés au bore et à l'azote en tant que matériaux potentiels  
de fission singulet*

Dirigée par Madame ANNA CHROSTOWSKA et Monsieur PANAGHIOTIS KARAMANIS

le 23 juin 2023 à 15h00

Lieu : IPREM, Technopôle Helioparc, 2 avenue P. Angot 64000, Pau Amphithéâtre IPREM

Salle : Amphithéâtre IPREM

### Composition du jury :

Mme ANNA CHROSTOWSKA, Professeur des universités	IPREM, Université de Pau et des Pays de l'Adour	Directrice de thèse
M. Panagiotis KARAMANIS , Chargé de recherche CNRS	Université de Pau et des Pays de l'Adour	Co-directeur de thèse
M. François GABBAL , Professeur	Texas A&M University	Rapporteur
M. Piotr KASZYNSKI , Professeur	University of Łódź	Rapporteur
M. Shih-Yuan LIU , Professeur	Boston College	Examineur
Mme Karinne MIQUEU , Directeur de recherche CNRS	Université de Pau et des Pays de l'Adour	Examinatrice
M. Emmanuel KOUKARAS , Docteur	University of Thessaloniki	Examineur
M. Georgios FANOURGAKIS , Docteur	University of Thessaloniki	Examineur

**Résumé :**

L'énergie solaire a le potentiel de répondre à la demande croissante d'un système énergétique mondial, neutre en carbone. Les cellules solaires à jonction unique approchent de la limite d'efficacité dans la conversion de l'énergie solaire. En conséquence, la conception et le développement de matériaux capables de contourner la limite de conversion photoélectrique, dite de Shockley-Queisser, ont reçu une attention particulière. Les matériaux de fission singulet (SF) ont la capacité potentielle de générer deux excitons triplets à partir d'un exciton singulet, doublant ainsi le nombre de porteurs de charge et augmentant l'efficacité d'un dispositif photovoltaïque. Selon les études théoriques préliminaires les composés organiques conjugués dopés au bore-azote (BN) présentent les propriétés favorables requises pour la fission singulet. Dans cette thèse, nous avons d'abord exploré de manière systématique à l'aide de la chimie computationnelle l'effet du dopage BN sur les paramètres clés critiques pour le comportement de fission singulet dans le cas de l'azulène. Nos résultats de calcul ont permis d'identifier une cible appropriée pour l'exploration synthétique. Dans la deuxième partie de la thèse, la conception synthétique et les progrès réalisés en vue d'obtenir un BN-azulène et ses dérivés sont décrits. L'approche synthétique proposée s'appuie sur la richesse des connaissances existantes sur les dérivés de 1,2-azaborine (isostères BN du benzène), développées par le groupe du Pr Liu. Les connaissances fondamentales acquises grâce aux études computationnelles et synthétiques des BN-azulènes jetteront les bases du développement d'une nouvelle famille de BN-hétérocycles.