

# AVIS DE SOUTENANCE DE THÈSE

## Matthieu WOLF

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

le **08 décembre 2022 à 9h00**  
à **L'UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR**  
**Amphi IPREM**

SUR LE SUJET SUIVANT :

**Étude de la dégradation de composés organiques chlorés par des simulations de dynamique moléculaire réactive**

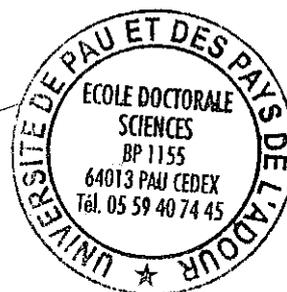
JURY :

Didier BEGUE, Professeur des Universités, UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR  
Patrice BORDAT, Maître de Conférences, HDR, UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR  
Pascal BRAULT, Directeur de Recherche, UNIVERSITÉ D'ORLEANS  
Carine MICHEL, Chargé de Recherche - HDR, ECOLE NORMALE SUPERIEURE DE SCIENCES LYON  
Aurelie PERRIER-PINEAU, Maître de Conférences, HDR, UNIVERSITÉ PARIS CITÉ  
Jose Luis SANCHEZ CEBRIAN, Professeur des Universités, UNIVERSITÉ DE SARAGOSSE (ESPAGNE)

Pau, le 29 novembre 2022

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

P.o. Isabelle BARAILLE



Directeur de thèse  
G. VALLVERDU (IPREM)

**Résumé :**

Cette thèse présente le développement d'un nouveau champ de force réactif pour étudier la réactivité de composés organochlorés dans divers environnements ou conditions tels que les solutions aqueuses, les conditions atmosphériques et la pyrolyse. Ces composés organochlorés sont d'un grand intérêt en raison de leurs longues demi-vies dans les milieux naturels et de leurs toxicités bien connues. Les champs de force réactifs sont une méthodologie intermédiaire entre la mécanique moléculaire et de la mécanique quantique. Ils permettent d'étudier la réactivité de systèmes complexes et de calculer des grandeurs macroscopiques en mettant en œuvre des simulations de dynamique moléculaire réactives. Parmi les potentiels réactifs existants, ReaxFF est aujourd'hui largement utilisé mais n'inclut pas l'atome de chlore. Après un premier chapitre présentant les concepts de base des simulations de dynamiques moléculaires, un deuxième chapitre présente les familles de composés organochlorés considérées dans cette thèse et un troisième chapitre présente la méthodologie utilisée pour développer le champ de force réactif pour les organochlorés, ainsi que l'évaluation de ses performances, en comparant les résultats obtenus avec des valeurs expérimentales et théoriques issues de cette thèse ou de la littérature. Ensuite, dans le chapitre 4, le nouveau champ de force a été appliqué à l'étude des simulations de pyrolyses par simulations moléculaires réactives de trois plastiques différents : PE, PP et PS, incluant du toluène et du chlorobenzène comme additifs. Enfin, le dernier chapitre concerne une librairie python, appelée MolSniper, mettant en œuvre des simulations réactives de collisions entre des molécules d'intérêt telles que des molécules organochlorées avec de petites molécules telles que les radicaux hydroxyles. Les capacités du logiciel sont présentées et comment il peut être utilisé pour sonder la réactivité d'une molécule.