

SOUTENANCE de THESE

Mercredi 19 octobre 2016 - 10h00
l'amphi Georges Besse de l'Ecole des Mines de Nantes

Dumitru SERGENTU

"Géométries, structures électroniques et propriétés physico-chimiques
d'espèces de l'astate : une application de la mécanique quantique
relativiste"

Résumé

Les tentatives menées pour détruire des cellules cancéreuses avec les agents radiothérapeutiques à base de ^{211}At qui ont été synthétisés jusqu'à présent ne sont pas encore pleinement satisfaisantes car elles sont entachées par une deastatination in vivo. Étant donné que ce problème est lié aux connaissances actuelles qui sont limitées concernant la chimie de base de l'astate et de ses espèces, des recherches fondamentales combinant des expériences à l'échelle des ultra-traces et des études théoriques ont été lancées. Dans cette thèse, une étude théorique de plusieurs espèces de l'astate est réalisée au moyen de méthodes relativistes basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité ou des méthodes à basées sur la fonction d'onde. Tout d'abord, les méthodes qui peuvent être utilisées pour faire des prédictions pertinentes sont établies. A l'aide de ces approches, nous rationaliserons les structures électroniques, géométries et propriétés physicochimiques des différents systèmes d'intérêt théorique ou expérimental, en particulier les espèces AtF_3 et AtO^+ . Finalement, nous identifierons formellement une nouvelle espèce de l'astate à l'aide de résultats expérimentaux et de calculs, ce qui non seulement complète le diagramme de Pourbaix de l'astate en milieu aqueux non complexant, mais aussi donne des informations cruciales pour identifier des conditions expérimentales pour rendre le plus « réactif » possible le précurseur $\text{At}^{\#8722}$, qui est de nos jours impliqué dans la synthèse d'agents radiothérapeutiques innovants.