

UNIVERSITE CLAUDE BERNARD – LYON I

DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT (Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : 14 décembre 2016

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Frédéric GUÉGAN**

Titre de la thèse : "Approches jointes expérience/théorie pour la chimie de coordination : des effets *trans* aux molécules-aimants."

Résumé de la thèse

Dans ce travail, nous nous sommes principalement intéressé à la description et à la rationalisation de certaines propriétés des complexes de coordination, par des approches mixtes expérience/théorie.

La première de ces études, purement théorique, revisite les propriétés de coordination des ligands par des méthodes de type DFT conceptuelle. Dans un premier temps, les ligands seuls sont étudiés, puis les résultats de cette première approche sont utilisés pour caractériser et rationaliser les effets *trans* dans les complexes octaédriques.

La deuxième étude ci-présentée, concerne la synthèse et la caractérisation de complexes polynucléaires de CU(II) et de ligands de types base de Schiff dérivés d'acides aminés. Dans un premier temps, la réactivité de ces complexes en solution est rationalisée par des mesures spectroscopiques et des calculs de type DFT.

Puis, les propriétés magnétiques de deux complexes trinucéaires sont présentées et analysées grâce au support de calculs *ab initio* de haut niveau.

Enfin, dans la troisième étude nous nous intéressons à des complexes mononucléaires d'ion lanthanides présentant une dynamique lente et l'aimantation à basse température. Des mesures magnétiques, mais aussi de luminescence et de diffraction de neutrons polarisés, combinées à des calculs de type SA-CASSCF/RASSI-SO permettent de rationaliser les propriétés magnétiques ainsi observées.