
Descripteur Dual: Nouvelles bases théoriques et applications récentes

Christophe Morell*¹

¹Institut des Sciences Analytiques (ISA) – CNRS : UMR5280, PRES Université de Lyon, École Normale Supérieure (ENS) - Lyon, Université Claude Bernard - Lyon I – 5 rue de la Doua, 69100 Villeurbanne, France

Résumé

La réactivité chimique et la sélectivité d'un système chimique peuvent généralement s'interpréter en termes de réponses ou dérivées de l'énergie électronique du système à des perturbations extérieures. Ces dérivées constituent un ensemble de descripteurs locaux et globaux à partir duquel le comportement chimique d'un système peut être rationalisé. Cette approche est appelée DFT conceptuelle [1]. La DFT conceptuelle devrait reposer sur trois principes incontournables : l'observabilité, l'universalité et la rigueur mathématique [2] ; L'interprétation de la réactivité chimique doit s'appuyer sur des observables quantiques ; les outils développés doivent être indépendants du type de calcul ; les outils développés doivent être mathématiquement définis. Idéalement, les outils développés devraient aussi avoir un sens physique. Le descripteur dual [3,4] (DD) répond à l'ensemble de ces critères. Le but de cette présentation est double. Il s'agira en premier lieu de présenter les bases physiques du descripteur dual et son évolution[5,6]. En second lieu, il s'agira de présenter quelques applications du descripteur dual à l'interprétation de la régiosélectivité de réactions. [7].

Geerlings, P.; De Proft, F.; Langeneacker, W. *Chem. Rev.* **2005**, 109, 205

Johnson, P.A.; Bartolotti, L.J.; Ayers, P.W.; Fievez, T.; Geerlings, P. *Charge Density and Chemical Reaction: a Unified View from Conceptual DFT*, in *Modern Charge Density Analysis* Springer **2012**

Morell, C.; Grand, A.; Toro-Labbé, A. *J. Phys. Chem. A.* **2005**, 109, 205

Morell, C.; Grand, A.; Toro-Labbé, A. *Chem. Phys. Lett.* **2006**, 425, 342

Morell, C.; Ayers, P.W.; Grand, A.; Chermette, H. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, 13, 9601

Tognetti, V.; Morell, C.; Joubert, L.; Chermette, H. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2013**

Morell, C.; Grand, A.; Gutiérrez-Oliva, S.; Toro-Labbé, A. *Theoretical and Computational*

*Intervenant

Chemistry. Vol 17: Theoretical Aspects of Chemical Reactivity. Volume Editor: Alejandro Toro-Labbé. Elsevier. **2006**

Mots-Clés: DFT conceptuelle, descripteur dual, concepts chimiques