
Simulation des propriétés optiques de fluoroborates

Siwar Chibani*¹

¹Chimie Et Interdisciplinarité : Synthèse, Analyse, Modélisation (CEISAM) – CNRS : UMR6230,
Université de Nantes – UFR des Sciences et des Techniques - 2 rue de la Houssiniere BP 92208 - 44322
NANTES Cedex 3, France

Résumé

Les fluoroborates comme, les aza-Bodipy, les Bodipy et les boranil, constituent une classe importante de colorants organiques [1]. Ces colorants présentent une forte absorption et une émission intense de la lumière dans le domaine visible, voire du proche infrarouge. Ces molécules sont considérées comme une sous-classe de la famille des cyanines et sont utilisées comme des capteurs ou des photosensibilisateurs. Mon objectif est de proposer une méthode adéquate de calcul pour simuler les propriétés des états électroniques excités de ces molécules organiques. Dans ce cadre, la théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps (TD-DFT), qui est considérée comme l'une des approches les plus efficaces en terme d'équilibre entre la précision et le temps de calcul, sera utilisée. [2]

Lors de cet exposé, je montrerai les résultats obtenus avec plusieurs bases atomiques et fonctionnelles hybrides testés sur ces fluoroborates en prenant en compte les effets de solvants à l'aide de l'approche PCM [3]. Les résultats obtenus avec ces modèles de solvant : linear response (LR), corrected-linear-response (cLR) et state-specific (SS) seront comparés. Les calculs des énergies de transitions 0-0 et du couplage vibronique seront discutés. Le protocole mis en point nous a permis, d'une part, de reproduire précisément les spectres d'absorption et d'émission expérimentaux, et d'autre part, de comprendre les effets de différentes variations chimiques (auxochromes, complexation..) [4-7].

A. Loudet et al., Chem. Rev., 107, 4891-4932 (2007).

D. Jacquemin et al., Phys. Chem. Chem. Phys., 13, 16987–16998 (2011).

R. Improta et al., Chem. Phys., 127, 074504 (2007).

S. Chibani et al., J. Chem. Theory Comput., 8, 3303-3313 (2012).

S. Chibani et al., Chem. Sci., 4, 1950–1963 (2013).

S. Chibani et al., J. Chem. Theory Comput., 9, 3127-3135 (2013).

S. Chibani et al., J. Chem. Theory Comput., 10, 805-815 (2014).

*Intervenant

Mots-Clés: Bodipy, TD, DFT, PCM (LR, cLR, SS), spectre vibronique