
Les différences de densité comme outils de rationalisation des propriétés d'absorption en UV-visible dans un laboratoire de chimie organique !

Thomas Cauchy*¹ and Yohann Morille¹

¹Laboratoire MOLTECH-Anjou – CNRS : UMR6200, Université d'Angers – UFR Sciences, Bât K., 2 Bd Lavoisier, 49045 Angers, France

Résumé

L'interaction entre un rayonnement UV-visible et la matière est au centre de plusieurs thématiques du laboratoire MOLTECH-Anjou : effet photovoltaïque, transferts de charge photoinduits, dichroïsme circulaire. Les méthodes de calculs basées sur la théorie TD-DFT permettent d'obtenir avec une certaine précision les propriétés des composés moléculaires synthétisés au laboratoire.

Toutefois la TD-DFT n'est pas une "boîte noire" dont la réponse serait toujours facilement compréhensible surtout au moment de dialoguer avec les expérimentateurs. Alors que ces derniers restent attachés à l'idée d'une transition mono-électronique depuis une OM de départ vers une OM d'arrivée, les états excités simulés en TD-DFT sont souvent décrits comme des combinaisons de transitions. La rationalisation par l'analyse topologique entre les OM impliquées devient ainsi un travail extrêmement fastidieux pouvant rapidement déboucher vers des erreurs d'interprétations.

La conférence présentera les résultats récents obtenus avec un logiciel maison ABSiCC (Automating Boring Stuff in Computational Chemistry). En programmant certains outils récemment développés ou enrichis par les physico-chimistes de la communauté TD-DFT[1,2] il a été possible de rationaliser efficacement et pédagogiquement les propriétés de transferts de charge photoinduits de composés électroactifs basés sur le tetrathiafulvalene (TTF) de type push-pull et de proposer des pistes intéressantes concernant le dichroïsme circulaire.[3-5]

M Peach, DJ Tozer, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 914, 110 (2009)

T Le Bahers, C Adamo, I Ciofini, *Journal of Chemical Theory and Computation*, 7, 2498 (2011)

F Pop, F Riobé, S Seifert, T Cauchy, J Ding, N Dupont, A Hauser, M Koch, N Avarvari, *Inorg. Chem.*, 52, 5023 (2013)

F Pop, S Laroussi, T Cauchy, CJ Gomez-Garcia, JD Wallis, N Avarvari, *Chirality*, 2013. Vol. 25, p. 466-474.

Biet, T.; Fihey, A.; Cauchy, T.; Vanthuyne, N.; Roussel, C.; Crassous, J.; Avarvari, N. *Chem. - Eur. J.* **2013**, 19, 13160–13167.

*Intervenant

Mots-Clés: TD, DFT, delta, rho, push, pull