
Principes, performances et applications de la DFT sous contrainte dans deMon2k

Aurélien De La Lande^{*1}, Natacha Gillet^{1,2}, Bernard Lévy¹, Isabelle Demachy¹, Etienne Mangaud, and Jan Rezac

¹Laboratoire de Chimie Physique D'Orsay (LCPO) – CNRS : UMR8000, Université Paris XI - Paris Sud – Bâtiments 349/350 avenue Georges CLEMENCEAU 91405 ORSAY CEDEX, France

²Departament de Química Física i Analítica – Universitat Jaume I, 12071 Castellon de la Plana, Espagne

Résumé

La DFT sous contrainte (cDFT) permet de définir des états quasi-diabatiques de manière ad hoc en DFT. Cette description diabatique est par exemple utile pour décrire les processus de transferts de charge entre des fragments moléculaires. Sur cette affiche nous présentons l'implémentation de la cDFT dans le logiciel deMon2k, laquelle tire pleinement partie de l'utilisation de densités électroniques auxiliaires pour accélérer les temps de calculs. Nous présentons plusieurs exemples d'applications de la méthode: pour la modélisation des transferts d'électrons dans les protéines, incluant la modélisation des processus de décohérence entre états électroniques, la calibration de modèles d'Hamiltonien pour réaliser des dynamiques dissipatives ou encore le calcul des énergies de transferts de charges entre fragments moléculaires.

Mots-Clés: DFT, densités auxiliaires, transfert d'électrons, transferts d'électrons, QM/MMs dynamique moléculaire

*Intervenant