
Evaluation quantitative du Transfert de Charge intramoléculaire photoinduit à travers un nouveau Descripteur topologique

Thibaud Etienne^{*†1}, Xavier Assfeld¹, and Antonio Monari¹

¹Université de Lorraine – CNRS : UMR7565 – BP 70239, Boulevard des Aiguillettes 54506 Vandoeuvre-lès-Nancy (France), France

Résumé

Cette communication relate la modélisation par la mécanique quantique de la variation de densité électronique moléculaire induite par l'absorption d'un photon. Nos études récentes sur le sujet ont convergé vers la création d'un nouveau descripteur relatif à la topologie des états excités d'intérêt. Ce nouvel indice s'obtient par une évaluation numérique du recouvrement spatial entre les densités dites de détachement et d'attachement, où le détachement localise la zone de déplétion de densité électronique générée par l'absorption de lumière, tandis que l'attachement correspond physiquement à l'incrément de densité accumulée dans l'état excité. En plus de sa capacité à caractériser quantitativement le transfert de charge photoinduit, ce descripteur constitue un test diagnostique fiable de fonctionnelles d'échange-corrélation dans le cadre de la méthode TDDFT (Time-Dependent Density-Functional Theory). Une application de ce nouvel outil est la discrimination de candidats moléculaires potentiellement exploitables par des technologies basées sur l'absorption de la lumière.

Mots-Clés: Topologie, Etats Excités, TDDFT, Test Diagnostic, Chromophore

^{*}Intervenant

[†]Auteur correspondant: thibaud.etienne@univ-lorraine.fr