

---

# L'alliance DFT-DFT conceptuelle-QTAIM : un outil de choix pour l'étude des réactions chimiques

Vincent Tognetti\*<sup>†1</sup> and Laurent Joubert<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire COBRA – CNRS : UMR6014, Université de Rouen, INSA de Rouen – 1 rue Tesniere  
76821 Mont St Aignan Cedex, France

## Résumé

L'étude théorique d'une réaction chimique comprend en général deux étapes. La première consiste en la détermination du mécanisme et peut être menée d'un point de vue statique ou dynamique. La seconde se concentre sur la rationalisation de ces résultats : il s'agit alors d'extraire de la quantité considérable d'informations obtenues les quelques descripteurs susceptibles de résumer la réactivité et de guider l'amélioration du procédé. En pratique, deux stratégies complémentaires sont envisageables : quantifier les caractéristiques des réactifs (nucléo/électrophilie...) et déterminer les interactions (liaisons faibles, répulsions stériques...) entre molécules contribuant à la stabilisation ou à la déstabilisation d'intermédiaires-clés.

Nous montrerons, au travers d'exemples récents de chimie organique [1-4], que la densité électronique est l'observable de choix pour mener à bien ces différentes tâches. La DFT permet en effet la détermination précise de la surface d'énergie potentielle, la DFT conceptuelle[5] la caractérisation de la réactivité des réactifs (notamment via le descripteur dual et ses évolutions[6,7]) et la théorie Atoms in Molecules de Bader (QTAIM) [8] celle des interactions pertinentes (en particulier dans l'approche IQA [9] de Pendás) le long du chemin réactionnel. Cette combinaison DFT-DFT conceptuelle-QTAIM constitue, de notre point de vue, un cadre particulièrement adapté à l'étude théorique de réactions même complexes.

Safár et al., *Eur. J. Org. Chem.* 28 (2012) 5498.

Jouanno, Tognetti, Joubert, Sabot, Renard, *Org. Lett.* 15 (2013) 2530.

Jouanno, Di Mascio, Tognetti, Joubert, Sabot, Renard, *J. Org. Chem.* 79 (2014) 1303.

Tognetti, Joubert, BouzBouz, en préparation.

Geerlings, De Proft, Langenaeker, *Chem. Rev.* 103 (2003) 1793.

Morell, Grand, Toro-Labbé, *J. Phys. Chem. A* 109 (2005) 205.

Tognetti, Morell, Ayers, Joubert, Chermette, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 15 (2013) 14465

---

\*Intervenant

<sup>†</sup>Auteur correspondant: [vincent.tognetti@univ-rouen.fr](mailto:vincent.tognetti@univ-rouen.fr)

Bader, Atoms in Molecules: A Quantum Theory; Oxford University Press: 1990.

Pendás, Blanco, Francisco, J. Chem. Phys. 125 (2006) 184112.

**Mots-Clés:** DFT, DFT conceptuelle, Atoms in molecules, réactivité chimique