



## Transfert de charge et effet d'antenne par TD-DFT. Une rationalisation par différence de densité électronique.

Submitted by Thomas Cauchy on Tue, 04/22/2014 - 17:26

Titre	Transfert de charge et effet d'antenne par TD-DFT. Une rationalisation par différence de densité électronique.
Type de publication	Communication
Type	Communication par affiche dans un congrès
Année	2014
Langue	Français
Date du colloque	30-31/01/2014
Titre du colloque	Journées de Chimie de Coordination de la Société Chimique de France.
Auteur	Cauchy, Thomas [1]
Pays	France
Ville	Rennes
Mots-clés	TD-DFT [2]

L'interaction entre un rayonnement UV-visible-procheIR et la matière est au centre de plusieurs problématiques : effet photovoltaïque, photochromisme, dichroïsme circulaire, effet d'antenne, luminescence, transferts de charge induits. Les méthodes de calculs basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité de l'état stationnaire (DFT) ou dépendante du temps (TD-DFT) permettent d'obtenir avec une certaine précision et efficacité la structure électronique des composés moléculaires synthétisés au laboratoire et leur réactivité lors de l'interaction avec un rayonnement. La TD-DFT est d'ailleurs dans le monde devenue la méthode la plus populaire et de loin pour étudier les états électroniques excités d'un composé.

Toutefois cette popularité ne signifie pas que la TD-DFT soit une « boîte noire » dont la réponse à la sortie serait toujours facilement compréhensible. Contrairement à notre image d'Epinal 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 ardu et extrêmement fastidieux pouvant rapidement déboucher vers des erreurs d'interprétations.

Résumé en français

La conférence présentera de manière pédagogique comment utiliser certains outils récemment développés ou enrichis par les physico-chimistes de la communauté TD-DFT<sup>1,2</sup> pour rationaliser les propriétés de transferts de charge photoinduits de composés électroactifs ou de type push-pull. Certaines molécules (schématisés ci-dessous) issues de travaux récents (revisités) basés sur des dithiolènes ou des TTF fonctionnalisés et parfois coordonnés, illustreront le propos de la conférence.<sup>3-7</sup>

(1) Peach, M. J. G.; Tozer, D. J. J. *Mol. Struct. THEOCHEM* 2009, 914, 110-114.

(2) Le Bahers, T.; Adamo, C.; Ciofini, I. J. *Chem. Theory Comput.* 2011, 7, 2498-2506.

(3) Pointillart, F.; Cauchy, T.; Le Gal, Y.; Golhen, S.; Cador, O.; Ouahab, L. *Chem. Commun.* 2010, 46, 4947.

(4) Pointillart, F.; Cauchy, T.; Maury, O.; Le Gal, Y.; Golhen, S.; Cador, O.; Ouahab, L. *Chem. - Eur. J.* 2010, 16, 11926-11941.

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

(6) Pop, F.; Branzea, D. G.; Cauchy, T.; Avarvari, N. *Comptes Rendus Chim.* 2012, 15, 904-910.

(7) Pop, F.; Riobé, F.; Seifert, S.; Cauchy, T.; Ding, J.; Dupont, N.; Hauser, A.; Koch, M.; Avarvari, N. *Inorg. Chem.* 2013, 52, 5023-5034.

Notes

30-31 Janvier 2014

URL de la notice

<http://okina.univ-angers.fr/publications/ua3029> [3]

---

## Liens

[1] <http://okina.univ-angers.fr/thomas.cauchy/publications>

[2] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[keyword\]=6764](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=6764)

[3] <http://okina.univ-angers.fr/publications/ua3029>

Publié sur *Okina* (<http://okina.univ-angers.fr>)