

# Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques

www.lcpq.ups-tlse.fr



Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques

## ACTIVITÉ DU LABORATOIRE

Le Laboratoire de Chimie et Physique Quantique (LCPQ) regroupe des chercheurs dont les activités couvrent plusieurs domaines de la chimie théorique -essentiellement quantique- et de la physique moléculaire théorique. Elles s'étendent de la méthodologie, forte composante du laboratoire, aux applications à des systèmes d'intérêt physico-chimique et biologique : magnétisme moléculaire, spectroscopie à très haute résolution, physique moléculaire relativiste, réactivité et photochimie de complexes de coordination et de biomolécules, agrégats et nanoparticules.

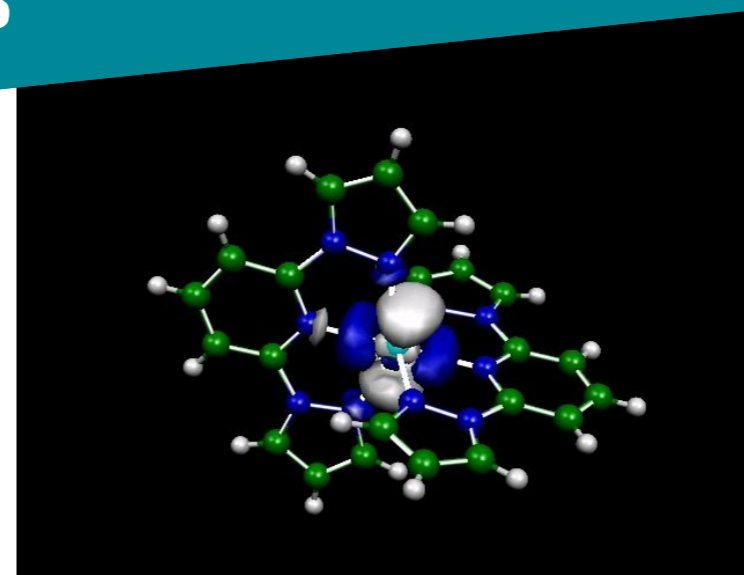
Le LCPQ est membre de l'Institut de Recherches sur les Systèmes Atomiques et Moléculaires Complexes (IRSAMC – FR 2568).

UMR 5626 (CNRS / UPS)

Directeur : Thierry LEININGER

Université de Toulouse III-Paul Sabatier  
bâtiment 3 R1b4  
118 route de Narbonne  
31062 Toulouse Cedex 9

05 61 55 61 52  
thierry.leininger@irsamc.ups-tlse.fr



Complexe  $[Fe(dipyrazole-pyridine)_2]^{2+}$  étudié pour les mécanismes de transition de spin photo-induite (LIESST)

©CNRS / LCPQ

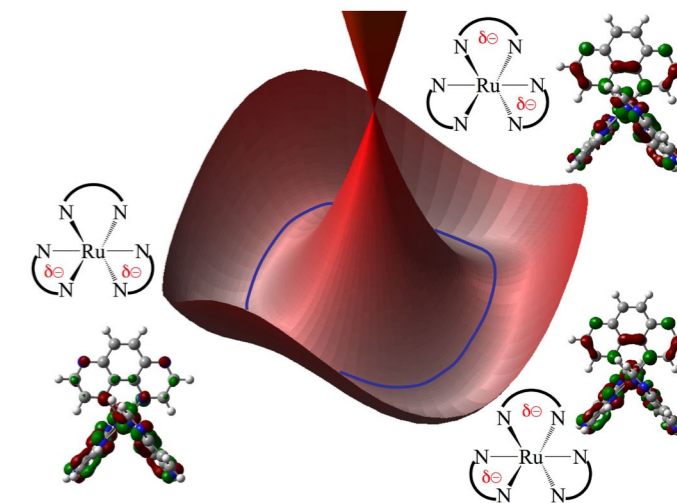
## LES ÉQUIPES DE RECHERCHE

### Méthodes et Outils de la Chimie Quantique (GMO)

Le groupe GMO a pour vocation de développer des méthodes et des logiciels de calculs moléculaires intensifs pour la résolution de l'équation de Schrödinger électronique. Les objectifs de l'équipe sont de développer des formalismes, méthodologies et algorithmes pour traiter le problème quantique électronique, une des applications du problème à N corps quantique. L'équipe est spécialisée dans le traitement rigoureux des interactions électron-électron au-delà de l'approximation de champ moyen, fondés sur la détermination de la fonction d'onde. Ces traitements incluent les méthodes d'interaction de configuration multi-référentielles, les méthodes couplant interaction de configuration et DFT, ainsi que les méthodes Monte Carlo quantiques. Le champ d'intervention est celui des systèmes à forte corrélation électron-électron, que la théorie de la fonctionnelle de la densité ne traite pas correctement aujourd'hui. Les recherches actuelles concernent le traitement des systèmes moléculaires de grande taille (orbitales locales), la description des états électroniques excités et l'inclusion des effets relativistes dans les calculs moléculaires impliquant des atomes lourds.

### Systèmes Étendus et Magnétisme (SEM)

L'équipe SEM se consacre à l'étude des propriétés électroniques remarquables de systèmes moléculaires ou supra-moléculaires, nano-structures ou systèmes périodiques de diverses dimensionnalités. Il s'agit d'abord de déterminer et comprendre, à l'aide de calculs rigoureux à l'échelle microscopique, les mécanismes physiques à l'origine des interactions locales (couplages magnétiques, propagation de charge, anisotropie magnétique...) et d'évaluer l'amplitude de ces interactions. On peut ensuite construire des Hamiltoniens modèles simples qui permettent d'étudier les propriétés collectives de structures étendues, voire périodiques, à l'aide de techniques spécifiques, telles que le groupe de renormalisation dans l'espace réel. Les propriétés visées concernent par exemple le ferro- ou le ferri-magnétisme, les réseaux de spins dopés, le phénomène de double échange et la magnéto-résistance colossale, les systèmes magnétiques commutables, ou l'anisotropie magnétique de molécules-aimants.



Effet Jahn-Teller et délocalisation électronique dans l'état triplet MLCT de complexes de ruthénium

©CNRS / LCPQ

### Modélisation-Agrégats-Dynamique (MAD)

L'équipe MAD développe une activité de modélisation et de simulation pour les agrégats atomiques et moléculaires, les nanoparticules et plus généralement les systèmes moléculaires complexes à nombreux degrés de liberté, essentiellement en phase gazeuse. Elle a pour objectif la description de différentes propriétés : spectroscopie, propriétés et transitions structurales, réactivité, dynamique, thermodynamique, collisions et fragmentation. L'équipe possède également une expertise en dynamique moléculaire quantique (paquets d'onde), utilisable pour des systèmes dont certains degrés de liberté pertinents sont traités quantiquement.

### Chimie des éléments d et f (d&f)

Cette équipe oriente ses recherches vers les applications de la chimie théorique, avec deux axes prioritaires concernant la chimie de métaux de transition ou de terres rares :

- La photoréactivité des complexes de ruthénium vis-à-vis de biomolécules (protéines, ADN) avec des applications possibles en cancérothérapie. Ces complexes de ruthénium se révèlent être des objets d'études très intéressants pour leurs propriétés photo-physiques et leurs applications dans le domaine du transfert électronique, notamment pour la conversion de l'énergie solaire dans les systèmes photovoltaïques.
- Le traitement théorique des composés des éléments lourds, en particulier dans la compréhension de la réactivité des complexes d'actinides, activités qui s'inscrivent dans le cadre général du retraitement des déchets nucléaires.

Les propriétés étudiées sont la structure, la dynamique, la spectroscopie vibrationnelle et électronique (UV, visible), la réactivité à l'état fondamental et dans les états électroniquement excités. Pour les systèmes de grande taille, en particulier pour la réactivité en présence de solvants et pour la dynamique, l'équipe développe ou utilise des traitements de la structure électronique dans des approches hybrides de type Quantum Mechanics-Molecular Mechanics, où le système actif est traité quantiquement, le solvant classiquement.

## SPÉCIFICITÉS

Les activités de développement de logiciels et de valorisation sont chargées d'accompagner les développements algorithmiques et numériques des logiciels de chimie théorique développés au laboratoire, à travers différentes actions : tests et bancs d'essai, performance logicielle (algorithmique adaptée aux architectures scalaires ou parallèles), aide à l'utilisation et à la valorisation (manuels, affichage et services en ligne, interfaçage, outils de traitement et de visualisation graphique, conseil aux utilisateurs).

Le laboratoire anime un réseau européen (COST D37) visant au développement d'un logiciel en chimie quantique structuré autour d'un format de données permettant l'interfaçage aisé de différentes chaînes logicielles.

Au niveau des moyens techniques, le laboratoire possède ses propres moyens de calcul numérique intensif car il est équipé en serveurs de calculs scalaires et parallèles.

EFFECTIF DU LABORATOIRE : 46