

Etude de structures et propriétés spectroscopiques de matériaux et métalloprotéines par des méthodes quantiques

D. Berthomieu

Institut Charles Gerhardt de Montpellier - Laboratoire des Matériaux Avancés pour la Catalyse et la Santé

UMR CNRS ENSCM UMI UM2 5253

Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Montpellier

8, rue de l'Ecole Normale

34296 MONTPELLIER

La modélisation par des méthodes de chimie quantique devient une approche courante pour prédire ou conforter des structures, quelles soient périodiques ou moléculaires et trouve un large écho dans les domaines de la chimie, de la biologie et de la physique. Une des raisons principales résulte de ce que les méthodes de calculs de chimie quantique et les outils développés permettent d'avoir des informations particulièrement fiables dans des temps raisonnables.

En 2007, Ulf Ryde écrivait que « most crystal structures are actually 50% theoretical » (*Dalton Trans.* (2007) 607-625). C'est dire l'importance de la modélisation (U. Ryde parlait des approches classiques et quantiques) à la résolution de structures.

Des exemples seront montrés de la complémentarité des approches théoriques et expérimentales qui ont permis d'étudier des structures locales de matériaux catalytiques (zéolithes), matériaux hybrides organique-inorganique (matériaux à base de boronates complexés à des cations alcalinoterreux) et des métalloprotéines (la Cu, Zn-Superoxyde dismutase). Il s'agira en particulier de les comparer à des spectres DRX et EXAFS, mais aussi à des spectres vibrationnels.