



## **CYCLE DE CONFÉRENCES DE CHIMIE**

*Avec le concours de : Manufacture Française des Pneumatiques MICHELIN  
Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Clermont-Ferrand  
Institut de Chimie de Clermont-Ferrand (ICCF UMR 6296)  
U.F.R.S.T. Département de Chimie*

---

**Jeudi 30 Mai 2013 à 16 h**

Amphi de Chimie Paul REMI - (Site des Cézeaux)

**Dr. Didier Bégué**

*Institut IPREM (UMR CNRS 5254), Université de Pau*

### **Pourquoi mettre en œuvre des simulations numériques en chimie ?**

La simulation numérique est aujourd'hui intégrée dans tous les cycles de conceptions et d'études scientifiques qu'elles soient académiques ou industrielles afin de prédire ou de comprendre le comportement de phénomènes complexes souvent couplés ou multi-physique. La qualité de la prédiction nécessite d'avoir des modèles précis et adaptés mais aussi de disposer d'algorithmes de calcul efficacement implantés sur des ordinateurs aux architectures en permanente évolution.

L'IPREM (Institut de Sciences Analytiques et Physico-Chimie pour l'Environnement et les Matériaux) et en particulier, l'équipe de Chimie-Physique dans laquelle je travaille, s'est fait pour spécificité la mise en œuvre d'études fondamentales basées sur des approches couplant expérience et théorie. Basés sur l'expertise de l'équipe en physico chimie et chimie théorique, les travaux de recherche qui y sont réalisés s'appuient sur le développement avancé de techniques essentiellement spectroscopiques permettant l'obtention d'informations fines à l'échelle atomique/moléculaire (XPS, Raman, IR, photoélectronique, UV-Visible, Fluorescence) et le support de méthodes théoriques (ab initio ou dynamique moléculaire classique) développées et programmées à Pau. Cette mise en synergie d'approches expérimentales et théoriques est souvent à l'origine d'avancées originales dans différents domaines d'application comme celui, par exemple, des matériaux (inorganiques et hybrides organiques-inorganiques) avec, pour ma part, des études spécifiquement orientées vers des problématiques spectroscopiques.

Concernant les propriétés de spectroscopie vibrationnelle, mon expérience se concentre essentiellement sur la résolution des problèmes vibrationnels afin de fournir des spectres en position et en intensité. Je développe pour ce faire des codes de calcul dont l'originalité est de prendre en compte simultanément les corrections d'anharmonicités électrique et mécanique pour assurer la représentativité des spectres IR calculés. Les challenges méthodologiques et calculatoires, à ce niveau, concernent, l'étude de systèmes moléculaires de grande dimension les plus proches possibles des besoins des expérimentateurs.

Je montrerai, dans cet exposé, quelques exemples d'études fondamentales basées sur des approches couplant expérience et théorie, en particulier dans le domaine des études liées à la caractérisation des espèces qui constituent les cellules photovoltaïques organiques.

---

**Coordinatrice** : Christine MOUSTY, Institut de Chimie de Clermont-Ferrand (ICCF-UMR 6296)

Université Blaise Pascal, 24, avenue des Landais, BP 80026 63171 Aubière cedex-France

☎ 33 473 407 598 – fax : 33 473 407 108 courriel : Christine.Mousty@univ-bpclermont.fr