

OUTILS POUR LA THÉORIE DE LA DFT CONCEPTUELLE

LABORATORY : Institut Lumière Matière
LEVEL : M2
TEAM(S) : THEOCHEM
CONTACT(S) : ALLOUCHE Abdul rahman
CONTACT(S) DETAILS: abdul-rahman.allouche[at]univ-lyon1.fr /
KEYWORD(S) : CDFT / C++ / Mécanique quantique

SCIENTIFIC CONTEXT :

Prédire et quantifier les propriétés chimiques et physiques est un problème central que la théorie vise à résoudre. Pour cela, différents cadres théoriques ont été proposés, parmi lesquels la DFT conceptuelle (CDFT)[1]. Depuis son apparition au début des années 1980, la CDFT a prouvé une efficacité remarquable dans la reproduction et l'explication de la chimie. Elle a permis, par exemple, de redéfinir des concepts et des grandeurs centraux en sciences chimiques, comme l'électronégativité ou la dureté.[2]

Mis à part le logiciel ADF[3], les descripteurs CDFT habituels ne sont pas directement implémentés dans les codes de chimie computationnelle. Pour effectuer une analyse CDFT, le scientifique est alors contraint soit de développer ses propres outils (scripts, programmes), soit de s'appuyer sur des outils post-existants, qui ne sont pas nécessairement faciles à utiliser. Dans le cadre de l'ANR QCTES, nous envisageons de développer un code, interfacé avec plusieurs programmes de chimie quantique, code efficace, mais surtout simple à utiliser par des non-spécialistes, qui n'ont pas forcément des connaissances avancées sur le sujet.

MISSIONS :

Le travail consiste à développer un code composé d'une librairie et d'un programme en C++ (multi-plateformes) de calculs de descripteurs quantiques issus de la DFT. La librairie comportera 2 classes principales : une pour effectuer des calculs numériques (sur une grille) et une autre pour effectuer des calculs analytiques. Le logiciel Gabedit [4] sera le front-end de ce programme, c'est-à-dire qu'il permettra à la fois de préparer les inputs et d'en visualiser les résultats, ce qui permettra d'avoir un package user-friendly ayant comme objectif de fournir à une communauté élargie un programme utilisable très facilement et qui intègre les tout derniers descripteurs développés. Le(La) stagiaire doit implémenter le code pour calculer les descripteurs les plus connus dans la littérature. Si le temps le(la) permettra, il(elle) implémentera des nouveaux descripteurs pour des états électroniques excités, qui sont en cours d'élaboration dans l'équipe de l'ANR QCTES.[5]

Profil du candidat : Etudiant(e) en Master 2 ou école d'ingénieur. Le(La) candidat(e) doit avoir un goût prononcé pour la programmation et avoir des notions de programmation en C++ (ou en C).

OUTLOOKS :

Participation à un projet ANR.
Durée du stage : 4 à 6 mois, début en février, mars ou avril 2024.

BIBLIOGRAPHY :

- 1) P. Geerlings, et al., Chem. Rev., 2003, 103, 1793–1874
- 2) R. G. Parr, et al., J. Chem. Phys., 1978, 68, 3801–3807
R. G. Parr et al., J. Am. Chem. Soc., 1983, 105, 7512–7516
- 3) G. te Velde, et al., J. Comput. Chem., 2001, 22, 931–967
- 4) Allouche, A.-R., Journal of Computational Chemistry, 32 (2011) 174–182
- 5) F. Guégan, et al., in Conceptual Density Functional Theory: Towards a New Chemical Reactivity Theory, ed. S. Liu, Wiley-VCH Verlag GmbH, 27 April 2022, ch. 5: Excited States.