

Interactions Non Covalentes : Importance de la Corrélacion Electronique

Vincent Robert¹¹ Laboratoire de Chimie Quantique - UMR 7177 Institut de Chimie, 67081 Strasbourg France*vrobot@unistra.fr*

La structuration des complexes relève souvent de schémas ou de théories basés sur un champ moyen (champ cristallin, champ des ligands). Pourtant, certaines interactions incorporant les fluctuations des distributions de charges peuvent jouer un rôle primordial. A travers deux exemples, nous montrerons comment les calculs de chimie quantique utilisant des orbitales moléculaires localisées (CASSCF/CASPT2) permettent de "lire" des contributions qui gouvernent à la fois la formation et la structuration spatiale des complexes.