



Modélisation et simulation en chimie : l'avènement des sciences computationnelles

par Jacques Weber, Université de Genève

Depuis le célèbre modèle de Kekulé pour le benzène, datant de 1866, les chimistes ont eu recours à toutes sortes de représentations graphiques simplifiées, plus ou moins réalistes, pour visualiser les systèmes auxquels ils s'intéressent. De nos jours, la modélisation (calcul des structures et propriétés) et la simulation (évolution temporelle) sont devenues les bases d'une nouvelle discipline essentielle en chimie, en bonne partie grâce aux développements théoriques en chimie quantique ainsi qu'aux progrès fulgurants de l'informatique. Comme en chimie computationnelle la partie dédiée à la visualisation reste importante, elle est considérablement renforcée de nos jours par des bases théoriques solides permettant d'obtenir des modèles visualisés réalistes.

D'une façon générale, il n'est pas exagéré d'affirmer que toutes les sciences reposent aujourd'hui sur les piliers traditionnels que constituent expérience et théorie, auxquels est venue s'ajouter une composante computationnelle d'égale importance. Dans cet exposé, un historique de ce développement dans le domaine de la chimie sera présenté et des perspectives seront esquissées quant aux possibilités actuelles et futures de la chimie computationnelle vues sous l'angle de la Density Functional Theory (DFT).

Conférence présentée le : LUNDI 19 DÉCEMBRE 2005 À 17H30

Université de Genève - Bâtiment Sciences II

Auditoire P.F. Tingry (A 150)

30, quai Ernest-Ansermet, Genève

LA CONFÉRENCE EST PUBLIQUE