

Tuesday, 26 March 2019

Amphi B

10:45-11:30

Plenary lecture 2

**Les méthodes de la Chimie Théorique Comme Alternative
et/ou Complément à l'expérience.**



Prof. Meziane Brahimi

*Faculté de Chimie. Université des sciences et de la technologie
Houari-Boumédiène (U.S.T.H.B.), Algiers, (Algeria).*

Membre fondateur de la Société Algérienne de Chimie (S.A.C.).

Abstract. Les questions qui m'ont souvent été posées durant ma carrière de quanto-chimiste sont: **A quoi sert la chimie théorique? Est-ce qu'elle peut remplacer l'expérience? Elle est trop compliquée?**

J'essayerai d'argumenter mes réponses, par des exemples bien précis (développés au sein des équipes de recherche 2, 3 et 4 de notre laboratoire ou dans la littérature), en espérant pouvoir transmettre le message que la théorie et l'expérience sont complémentaires et que dans certains cas, la théorie est incontournable. Je commencerai par développer brièvement les bases de la chimie théorique : Mécanique Moléculaire (MM), Mécanique Quantique (MQ) et les méthodes hybrides QM/MM ainsi que leurs domaines d'application. Je passerai ensuite en revue quelques exemples d'applications que j'ai eu à traiter avec mes collaborateurs au sein du laboratoire de Physico-Chimie Théorique et Chimie Informatique (LPCTCI) de la Faculté de Chimie à l'USTHB. Je balayerai les domaines de la Pharmaco-chimie, des nanostructures, de l'utilisation de différents nanotubes comme sièges de réactions chimiques ou de stockage d'énergie. Je m'étalerai aussi sur l'expérience acquise en collaborant avec les expérimentateurs. Je finirai enfin par quelques autres applications en chimie inorganique, chimie du solide et dans l'étude théorique des systèmes impliqués dans des réactions exothermiques comme les propérgols.