



Le CCIPL : un outil performant pour les simulations théoriques des structures et des propriétés des systèmes moléculaires

Jean-Yves Le Questel, Professeur, laboratoire CEISAM, UMR 6230

Dans l'arsenal des méthodes physicochimiques d'exploration des propriétés des systèmes moléculaires conçus par les chimistes, les méthodes de modélisation et de simulation moléculaire sont devenues des outils à part entière, à la fois en tant que moyen d'aide à la caractérisation mais également en tant qu'approches permettant de rationaliser voire de prédire les propriétés des molécules.

Dans cet exposé, des exemples d'applications des moyens de calcul disponibles au CCIPL réalisées au laboratoire CEISAM seront présentés. Ainsi, la mise en œuvre d'approches théoriques pour explorer les propriétés de l'Astate, un radioélément prometteur pour l'alpha-immunothérapie des cancers sera exposée. Ce sujet, particulièrement transversal, fédère les travaux de recherche de deux laboratoires (SUBATECH et CEISAM) de la fédération GRIM3. L'utilisation des méthodes quantiques pour comprendre, optimiser, concevoir les propriétés optiques de photochromes et de colorants sera également illustrée. Enfin, des travaux en partie fondés sur des approches théoriques visant à une compréhension fine de la structure et des interactions de ligands d'intérêt thérapeutique seront exposés.

Cette présentation permettra donc d'illustrer aux acteurs de la fédération GRIM3 la diversité des problématiques abordées au laboratoire CEISAM à travers les ressources de calculs et, donc, le potentiel de modèles de simulations théoriques disponibles au CCIPL.