Introduction générale :

La chimie des complexes de métaux de transition est un domaine qui ne cesse d'évoluer. Dans divers domaines de chimie moderne, les composes de coordination sont sujets à de nombreuses applications et porteurs de nombreux espoirs. Nombre de ces applications font intervenir une interaction entre la molécule et la lumière, le développement de l'optique en informatique, la conversion en énergie électrique. [1]
Parallèlement, dans les domaines de la chimie computationnelle et de la chimie Théorique, la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) s'affirme de plus en plus comme
Une méthode fiable dans la modélisation de certains phénomènes chimiques ou l'énergie d'un système électronique est déterminée, de Facon univoque, par sa densité électronique. [2]

Dans ce travail, nous nous sommes intéresses aux calculs des énergies au moyen de la méthode DFT .pour la détermination des différents isomères et aux propriétés des états excites des complexes métalliques a l'aide de la méthode TD-DFT (théorie de la fonctionnelle de densité dépendant du temps) qui présente de nombreux avantages : rapidité, absence d'hypothèses préalables au calcul, bon accord qualitatif et quantitatif avec l'expérience pour De nombreux composes.

Le développement important des moyens informatiques (microprocesseur plus puissant, mémoire plus importante, calcul scientifique, infographie,…..) au cours de ces dernières années a permise à la chimie de s'enrichir d'outil est apparu permettant à tout chimiste de mieux comprendre les problèmes liés au domaine moléculaire : la modélisation moléculaire [3.4].

Les études théoriques s'orientent actuellement vers la conception rationnelle **"***Rational design***"** qui signifie que la connaissance de la relation entre les propriétés physico-chimiques et la structure moléculaire des molécules connues permet aux scientifiques de développer des nouvelles molécules, avec une assez bonne anticipation **[5].**

Le premier chapitre consacré à un rappel des généralités sur la théorie de group aussi s'avèrent indispensable.

Dans le deuxième chapitre, on a décrivons la description de la méthode de la méthodologie choisi : la modélisation moléculaire (basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Le troisième chapitre: Résultats et discussions. A la fin de ce manuscrit seront présentées une conclusion générale.

- Références :

[1] F. Zouchoune. These Doctorat Structure électronique des complexes closo-boranes, alanes, galanes et structures organométalliques a pparentées, Université Constantinen,2013.

[2] L. Mansouri . These Doctorat Etude structurale et détermination des propriétés électroniques des matières organiques (colorants) : Etude en méthode DFT. Université Larbi ben M'hidi (Oum El Bouaghi),2016 .

[3] E.Derety,J.Mol.Struct,(Theochem),459,273,1999.

[4] S.Belaidi, Thése de Doctorat, Université de Batna, 2002.

[5] A,car,La recherche, 314,50,1998.