

# Calcul ab initio de la chiralité de systèmes périodiques.

Michel RERAT

Institut des Sciences analytiques et de physico-chimie pour  
l'environnement et les matériaux (IPREM/ECP) – Université de Pau  
et des Pays de l'Adour – France

le pouvoir rotatoire des molécules chirales en solution est facilement mesurable, mais il n'en est pas de même dans le solide, la valeur de la chiralité étant faible devant celle de la biréfringence du cristal moléculaire ou du minéral. En ce qui concerne son calcul, au problème bien connu d'invariance de jauge pour les molécules isolées, s'ajoute celui de la périodicité pour les systèmes infinis. Une méthode de calcul de cette propriété d'activité optique a été implémentée dans le code Crystal, et des applications sur l'acide tartrique, le quartz-alpha ou des nanotubes de carbone seront présentées.