

L'étude quantique de différents dihétero-cycles et des polymères correspondants, effectuée au moyen des méthodes semi-empiriques AM1 et PM3 a montré que c'est la méthode AM1 qui est la plus appropriée pour étudier la structure et les propriétés électroniques de ces polymères. La meilleure conductivité des polymères `dopés` est bien reproduite par la méthode AM1 puisque nous avons noté que les valeurs des gaps d'énergie AM1 obtenues pour les complexes polymère-dopant sont toutes inférieures à celles relatives à leurs analogues neutres. Nous avons obtenu pour tous les polyhétéro-cycles dopés par le Sodium un transfert de charge de cet atome vers les cycles, de 0,96e à 0,98e; la majorité de cette charge est retrouvée sur le cycle d'approche avec une plus forte localisation sur l'hétéroatome et sur les carbones en β par rapport à celui ci . Ce résultat va dans le même sens que celui obtenu par d'autres auteurs au moyen de méthodes plus sophistiquées ab initio ou DFT. Un déplacement de charge du polymère vers le dopant (de $\sim 0,89e$ pour le polypyrrôle à $0,60e$ pour la polypyridine) est également retrouvé lorsque le dopage est de type p. Nous relevons également que la planéité de la chaîne des polymères est sauvegardée après dopage des polyhétéro-cycles à cinq atomes, ou rétablie après dopage de la polypyridine et du polyparaphénylène . En accord avec les calculs antérieurs , la diminution des longueurs de liaison intercycle ainsi que l'augmentation des longueurs de liaison entre les carbones α et β intracycles, confèrent aux polypyrrôle, polyparaphénylène et au polythiophène dopés, des structures quinoïdales et ce, quelque soit le type de dopage. Par contre la structure aromatique de la polypyridine est sauvegardée après dopage.