



# Réactivité organométallique théorique



Niveau d'étude  
BAC +5



ECTS  
3 crédits



Composante  
Faculté des  
Sciences

## En bref

- › **Date de début des cours:** 1 sept. 2021
- › **Langue(s) d'enseignement:** Français
- › **Méthode d'enseignement:** En présence
- › **Organisation de l'enseignement:** Formation initiale
- › **Ouvert aux étudiants en échange:** Non

## Objectifs

Compétences visées :

- faire le lien entre propriétés électroniques, mécanismes réactionnels multi-étapes et observations expérimentales
- interpréter la structure électronique de complexes de métaux d et f et de nano-objets organiques et inorganiques
- identifier les principales méthodes utilisées pour explorer la réactivité chimique

## Présentation

### Description

Des exemples de réactions de la catalyse homogène seront présentés en insistant sur les concepts sous-jacents et les limitations des approches théoriques (DFT principalement). La métathèse des oléines et des exemples de polymérisation illustreront la catalyse supportée, en insistant sur l'influence du support.

Divers exemples illustreront la spécificité des nanocatalyseurs, en distinguant le rôle respectif des facteurs électroniques et géométriques.

**Volumes horaires\* :**

CM : 20

TD : 10

### Pré-requis nécessaires

Orbitales atomiques et moléculaires ; structure de bandes des solides ; théorie du champ des ligands ; méthode de Hückel

### Contrôle des connaissances

Contrôle terminal écrit.

### Syllabus

(1) Catalyse homogène

(a) Champ de ligand, classification des ligands, décompte électronique, diagrammes d'OM ML6 octaédrique et



ML4 plan carré, diagrammes de Walsh

<https://master-chimie.edu.umontpellier.fr/>

(b) Pseudopotentiels atomiques, définition des modèles chimiques, précision

(c) Quelques exemples : activations de liaisons (C-H, C-X), insertion, métathèse

(d) La chimie rédox : transfert mono- vs. biélectronique, activation de CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>

(e) Comparaison entre catalyse homogène et hétérogène : Cas de polymérisation Ziegler-Natta

(2) Catalyse supportée

(a) Quelques éléments sur la surface de greffage (silice, alumine)

(b) Effet de la surface sur quelques réactions choisies : Polymérisation par ouverture de cycle, polymérisation des

oléfines, métathèse des oléfines, activation de liaisons

(3) Nanocatalyseurs

(a) Où sont les électrons ? Nature des liaisons ? Application à des systèmes modèles (polymères et clusters

organométalliques).

(b) Relation taille / morphologie - activité catalytique

(c) Réaction de Fischer-Tropsch, activation C-H, réactions d'hydrogénation

(d) Descripteurs de réactivité : relation BEP, principe de Sabatier, courbes volcan.

(e) Quelques grands enjeux actuels : énergie, biomasse, CO<sub>2</sub>

## Infos pratiques

### Contacts

Responsable pédagogique

Christophe RAYNAUD

✉ [christophe.raynaud1@umontpellier.fr](mailto:christophe.raynaud1@umontpellier.fr)

### Lieu(x)

➤ Montpellier - Triolet

---

## Informations complémentaires

**Contact(s) administratif(s) :**

Secrétariat Master Chimie