



Réactivité organométallique théorique



Niveau d'étude
BAC +5



ECTS
3 crédits



Structure de
formation
Faculté des
Sciences

En bref

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

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

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

Heures d'enseignement

Réactivité organométallique théorique - CM	Cours Magistral	20h
Réactivité organométallique théorique - TD	Travaux Dirigés	10h

Pré-requis obligatoires

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

(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 CO₂, H₂, N₂

(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, CO₂

Informations complémentaires

Contact(s) administratif(s) :

Secrétariat Master Chimie

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

Infos pratiques

Contacts

Responsable pédagogique

Christophe RAYNAUD

✉ christophe.raynaud1@umontpellier.fr

Lieu(x)

➤ Montpellier - Triolet