



# Dr. Odile EISENSTEIN

Institut Charles Gerhardt, Université Montpellier 2 CNRS, UMR 5253

## A la recherche de mécanismes de réaction en chimie organométallique: une enquête à base de calculs DFT

Il est maintenant considéré comme aisé, et presque routinier d'utiliser des méthodes théoriques pour déterminer et analyser des mécanismes de réaction. Cela semble d'autant plus vrai que l'on s'intéresse à des réactions en solution impliquant des molécules de nature connue (ou à peu près). Les méthodes théoriques sont bien établies et fiables si les molécules ne sont pas d'une complexité particulière. Derrière cette apparente simplicité se cache souvent une réelle complexité et il apparaît rapidement que des réactions simples ne le sont pas autant que l'on aurait pu le croire. Il apparaît également que le calcul théorique ne permet pas toujours de répondre de manière quantitative aux interrogations mécanistiques. Cependant dans tous les cas, l'étude théorique permet de mieux comprendre les transformations chimiques surtout si cette étude est en permanence confrontée à des observations expérimentales. Ces points seront illustrés par quelques exemples. (1-6) Après avoir montré qu'il est possible d'utiliser de manière quantitative une approche théorique pour hiérarchiser les forces de liaisons, deux études impliquant des ruptures de liaisons CH et des formations de liaisons CC permettront de discuter les facteurs qui peuvent se poser dans une réaction de couplage. Si le temps le permet, on conclura par une étude de transfert d'hydrogène par un mécanisme encore rarement considéré.

[1] E. Clot, C. Mégret, O. Eisenstein, R. N. Perutz, *J. Am. Chem. Soc.* 2006, 128, 8350-8357; [2] E. Clot, C. Mégret, O. Eisenstein, R. N. Perutz, *J Am Chem Soc.*, 2009, 131, 7817-7827 ; [3] M. E. Evans, C. L. Burke, S. Yaibuathes, E. Clot, O. Eisenstein, W. D. Jones, *J Am Chem Soc.*, 2009, 131, 13464-13473 ; [4] J. Guihaumé, E. Clot, O. Eisenstein, R. N. Perutz, *Dalton Trans.* Special Issue Dalton Discussion CH and CX activation **2010**, 10510-10519 ; [5] J. Guihaumé, S. Halbert, O. Eisenstein, R. N. Perutz, *Organometallics* **ASAP** ; [6] G. E. Dobreiner, A. Nova, N. D Schley, N. Hazari, S. J. Miller, O. Eisenstein, R. H Crabtree, *J. Am. Chem. Soc.* 2011, 133, 7547-7562

**Vendredi 2 mars à 14h ~ Bât. Lavoisier, salle 774 ~**

**15 rue Jean-Antoine de Baïf, 75013 Paris**

Contact : Aurélie Perrier

Université Paris Diderot, UFR de Chimie

Tél: 33 0 (0) 1 57 27 68 61 – Fax: 33 0 (1) 57 27 72 63 – aurelie.perrier-pineau@univ-paris-diderot.fr