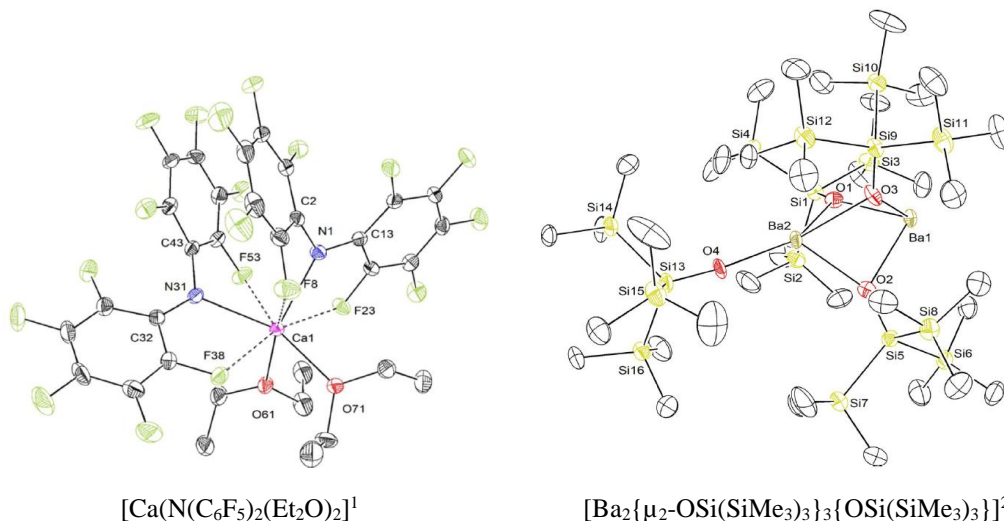


Chimie structurale et structure électronique de complexes hétérobimétalliques d'alcalino-terreux

Encadrement : S. Kahlal et J.-Y. Saillard (ISCR, équipe CTI)

Ce projet de chimie inorganique s'inscrit dans le cadre d'une collaboration déjà bien établie¹⁻³ au sein de notre institut entre notre groupe de chimie théorique et celui du Dr. Yann Sarazin (équipe OMC) qui conçoit et synthétise des complexes d'alcalino-terreux (Ca-Ba) en vue notamment de leur utilisation en catalyse. Dans cette collaboration, la mission des théoriciens est, à l'aide de calculs de chimie quantique en méthode DFT, d'interpréter la stabilité, la structure et les propriétés de ces composés qui présentent souvent des architectures inattendues, et si possible d'orienter les expérimentateurs vers des synthèses de composés à propriétés optimisées.



Le stage bibliographique proposé s'intéressera plus particulièrement aux complexes bimétalliques comportant un alcalino-terreux et un autre métal. Les deux métaux peuvent être liés ou non, en interaction forte ou faible, covalente ou ionique... Les métaux non alcalino-terreux plus particulièrement visés seront des éléments du groupe 14 (Si-Pb) ou des alcalins (Na-Cs). Le stagiaire recherchera dans la littérature les composés dont la structure moléculaire a été déterminée, en analysera les caractéristiques géométriques en fonction notamment de leur nombre d'électrons de valence (octet, hypervalence, VSEPR...). Il cherchera et analysera toute les interprétations théoriques (basées ou non sur des calculs de chimie quantique) proposées dans la littérature.

Le stage de recherche qui suivra se situera dans la continuation de cette étude bibliographique (calculs en méthode DFT de complexes hétérobimétalliques d'alcalino-terreux et rationalisation de leur stabilité, structure et propriétés).

1. Metal...F-C bonding in low-coordinate alkaline earth fluoroarylamides

H. Roueindeji, A. Ratsifitahina, T. Roisnel, V. Dorcet, S. Kahlal, J.-Y. Saillard, J.-F. Carpentier, Y. Sarazin.
Chem. Eur. J. **2019**, *25*, 8854-8864.

2. Barium siloxides and catalysed formation of Si-O-Si' motifs

E. Le Coz, S. Kahlal, J.-Y. Saillard, T. Roisnel, V. Dorcet, J.-F. Carpentier, Y. Sarazin.
Chem. Eur. J. **2019**, *25*, 13509-13513.

3. Bis(imino)carbazolate: a master key for barium chemistry

P. M. Chapple, S. Kahlal, J. Cartron, T. Roisnel, V. Dorcet, M. Cordier, J.-Y. Saillard, J.-F. Carpentier, Y. Sarazin.
Angew. Chem. Int. Ed. **2020**, *59*, 9120-9126.