

UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE - PARIS 6

UFR de Chimie

Soutenance de l'Habilitation à Diriger les Recherches

Sélectivités : apports de chimie quantique

Hélène GERARD

Laboratoire de Chimie Théorique
UMR 7616 CNRS/UPMC

Amphi Jean Perrin, le vendredi 7 décembre 2007 à 9h00

La compréhension fine des mécanismes réactionnels permet d'envisager une amélioration raisonnée de la sélectivité en chimie. Ce manuscrit met en évidence quelques apports de la modélisation théorique sur la base d'exemples impliquant une interaction forte avec les équipes expérimentales. La première partie est centrée sur des réactions d'organolithiens et d'organocuprates. L'utilisation de méthodes statiques révèle la complexité induite par la solvataion de ces composés. Une reproduction correcte des effets entropiques et dynamiques a donc nécessité l'adaptation des méthodes de dynamique moléculaire *ab initio* à ces systèmes. Simultanément, un soin particulier est apporté à l'analyse des effets responsables de la sélectivité au moyen de plusieurs types de méthodes interprétatives. La seconde partie se tourne vers des systèmes inorganiques dans lesquels la variété des modes de coordination est explorée. La compétition entre les interactions métal-ligands et les liaisons hydrogène entre ligands y joue un rôle particulièrement important dont la compréhension est essentielle dans une perspective biomimétique.