

---

## Hétéroéléments et Coordination (UMR CNRS 7653) –Ecole Polytechnique

Directeur : Pascal Le Floch

**Responsable de l'équipe :** Pascal Le Floch

**Personnes concernées :** Pascal Le Floch (DR2, section 14), Louis Ricard (DR2, section 14), F. Mercier (DR2, section 14), Nicolas Mézailles (CR1, section 14), Audrey Auffrant (CR2, section 14), Bernard Deschamps (section 14), 4 doctorants + 1 post-doctorant.

**Section CNRS :** 14

---

❖ **Activité scientifique de l'équipe :**

- Synthèses de ligands comportant des hétéroatomes : phosphore, soufre, azote et oxygène, bore [1].
- Chimie de coordination et interface ligand métal : métaux de transition et lanthanides.
- Catalyse homogène et supportée : hydroformylation, hydrogénation, couplage C-C, C-C-B, fixation de ligands sur hybrides mésoporeux [2][3].
- Interface théorie/expérience (Chimie théorique) : fonctionnelle de densité, méthodes *ab initio*, méthodes mixtes mécanique quantique/mécanique moléculaire. Structure électronique des ligands et des complexes de transition, calculs de cycles catalytique [4].
- Nanoparticules métalliques : stabilisation de nanoparticules (or) [5], incorporation dans des mésoporeux (capteurs) [6], catalyse supportée [7].

❖ **Résultats obtenus dans le domaine d'action des nanosciences :**

- Stabilisation de nanoparticules d'or par des ligands phosphorés aromatiques à fort pouvoir accepteur permettant une modulation fine de la bande plasmon.
- Synthèse de nanoparticules de type Janus (Figure 1).
- Incorporation de nanoparticules d'or ligandées dans des mésoporeux : élaboration de capteurs sélectifs permettant la détection de petites molécules (phosphines, thiols) (Figure 2).
- Catalyse homogène sur nanoparticules de palladium ligandées (couplages énantiosélectifs).

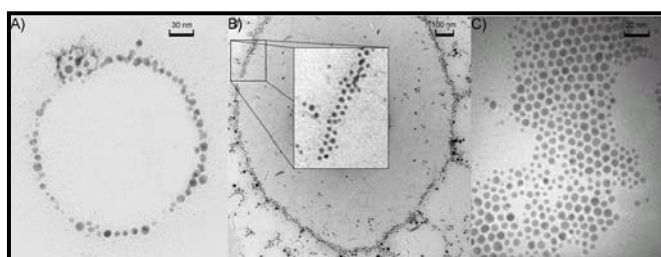


Figure 1 : Formation et organisation de nanoparticules de type Janus. Assemblages obtenus dans un mélange biphasique THF/x H<sub>2</sub>O (A x = 10%, B x = 50%, C x = 0%).

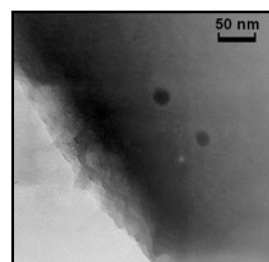


Figure 2 : nanoparticules d'or incorporées dans un film de silice

❖ **Programme de recherche :**

- Stabilisation de nanoparticules métalliques très oxydables par coordination de ligands accepteurs d'électrons (monomériques ou polymériques) et synthèse de nanoparticules de type « Janus » [8].
- Catalyse homogène sur nanoparticules : (réactions de couplage, activation de petites molécules).
- Incorporation de catalyseurs nanostructurés dans des hybrides mésoporeux : application à l'élaboration de « verrerie catalytique ».
- Fonctionnalisation de surfaces de silicium hydrogénées.
- Utilisation de nouveaux précurseurs phosphorés dans l'élaboration de matériaux nanostructurés du type  $M_xP_y$ .

❖ **Interactions et collaborations en Ile de France:**

LCMC, UPMC (Clément Sanchez) : Incorporation de nanoparticules métalliques dans des hybrides mésoporeux et applications (capteurs, procédés catalytiques).

LSI/Ecole Polytechnique (G. Petite) : Coordination de complexes photosensibilisateurs sur nanoparticules d'or : étude des phénomènes photo-induits (transfert d'énergie, d'électrons).

PMC, Ecole Polytechnique : Fonctionnalisation de surfaces hydrogénées par des ligands terpyridiniques.

❖ **Activité d'enseignement :**

\* Cours « introduction à la chimie moléculaire/Chimie quantique », Ecole Polytechnique, 2<sup>ème</sup> année.

\* Cours chimie organométallique et applications : réactions sélectives, catalyse homogène, nanoparticules métalliques. Ecole Polytechnique, 3<sup>ème</sup> année (Master I).

\* Cours Master II : « Chimie de coordination et organométallique : applications ». Master Multinational de Chimie Moléculaire de l'X.

❖ **Références**

- [1] P. LE FLOCH, Phosphorus Carbon Heterocyclic Chemistry: The rise of a New Domain . F. Mathey editor, Pergamon, 485, 2001,
- [2] A. MOORES, N. MEZAILLES, L. RICARD, P. LE FLOCH, *Organometallics*, 508, 2005.
- [3] F. GOETTMANN, D. GROSSO, F. MERCIER, F. MATHEY, C. SANCHEZ, New P<sup>^</sup>O ligand grafted of periodically organized mesoporous silicas for one-pot bifunctional catalysis: coupling of catalyzed Knoevenagel condensation with in situ Rh catalyzed hydrogenation. *Chem. Commun.* 1240, 2004.
- [4] H. PERRON, A. MOORES, I. DEMACHY, A. Lledos, Y. JEAN, P. LE FLOCH, *New. J. Chem.*, 838, 2004.
- [5] A. MOORES, F. GOETTMANN, C. SANCHEZ, P. LE FLOCH, *Chem. Commun.* 272, 2004.
- [6] F. GOETTMANN, A. MOORES, C. BOISSIERE, P. LE FLOCH, C. SANCHEZ, *Small*, 636, 2005.
- [7] F. GOETTMANN, P. LE FLOCH, C. SANCHEZ, *Chem. Commun.* 2005, *in press*.
- [8] F. GOETTMANN, C. BOISSIERE, D. GROSSO, F. MERCIER, P. LE FLOCH, C. SANCHEZ, *Chem. Eur. J.* *in press*, 2005.  
F. GOETTMANN, A. MOORES, C. VILAIN, P. LE FLOCH, C. SANCHEZ, *soumis à publication*.