



## SEMINAIRE ISMO

**Gilles FRISON**

*Laboratoire de Chimie Moléculaire École Polytechnique,  
CNRS Route de Saclay, Palaiseau*

### **Caractérisation de complexes organométalliques réduits en phase gazeuse**

La caractérisation d'intermédiaires de réaction est souvent difficile en solution du fait de leur réactivité et de leur faible concentration. Ceci est particulièrement vrai pour les espèces radicalaires telles que les complexes organométalliques réduits, qui sont des intermédiaires en photocatalyse, ou lorsque des ligands non-innocents sont liés au métal. En conséquence, leur structure électronique à l'état fondamental est encore mal comprise, sachant que l'électron ajouté peut être situé sur différents sites de la molécule (métal, un ou plusieurs ligands).

Nous utilisons la dissociation par capture d'électron (ECD), technique de spectrométrie de masse habituellement utilisée en protéomique, pour former en phase gazeuse des complexes organométalliques réduits. Le couplage de l'ECD à la spectroscopie IRMPD permet d'obtenir des signatures IR de ces complexes. La comparaison des signatures expérimentales avec des spectres calculés à l'aide de fonctionnelles DFT permet, en principe, de déterminer la structure électronique des complexes étudiés, illustrant que celle-ci dépend de la nature du métal et des ligands. Nous montrerons cependant pour plusieurs molécules que l'erreur de self-interaction dont souffre certaines fonctionnelles DFT, notamment celles les plus utilisées dans la littérature, rendent celles-ci totalement inopérantes.

**Mardi 14 juin 2016 à 11h**  
**Bât 210 – Amphi 1 (2<sup>ème</sup> étage)**  
**Université Paris-Sud - 91405 ORSAY Cedex**