

CYCLE DE CONFÉRENCES DE CHIMIE

Avec le concours de : *Manufacture Française des Pneumatiques MICHELIN*
Sigma Clermont
Institut de Chimie de Clermont-Ferrand (ICCF UMR 6296)
U.F.R. S.T. Département de Chimie

Jeudi 22 juin à 16 h

Salle C

Lionel PERRIN

ICBMS/ITEMM UMR 5246, Université de Lyon, Villeurbanne

**Etude théorique de mécanismes :
un atout en synthèse organique et en catalyse de polymérisation**



Acc. Chem Res. **2016** 49(5) 1070–1078

La description et la compréhension des mécanismes en chimie sont sources de développement, que ce soit d'un point de vue structural ou réactionnel. Dans ce contexte, la chimie théorique et la modélisation sont des outils de choix pour explorer les mécanismes à l'échelle moléculaire et offrir une base rationnelle à l'établissement de relations structure(s) / propriété(s). En catalyse de polymérisation, ce point sera illustré par l'établissement de relations entre la structure du catalyseur, son activité et la microstructure des polymères produits via l'exploration de paysages réactionnels.^{1,2} En synthèse de organique, nous monterons l'intérêt de ces études mécanistiques dans la compréhension de processus complexes.³ Enfin, nous monterons qu'il est également possible d'étudier les mécanismes de structurations d'objets afin d'établir des relations entre structure primaire et secondaire.⁴

¹ Deciphering the mechanism of Coordinative Chain Transfer Polymerization of ethylene using neodymocene catalysts and dialkylmagnesium. Ribeiro R, Ruivo R, Nsiri H, Norsic S, D'Agosto F, Perrin L*, Boisson C: *ACS Catal.* 6:851-860, **2016**

² Ethylene-Butadiene Copolymerization by Neodymocene complexes: a Ligand Structure / Activity / Polymer Microstructure Relationship based on DFT calculations. Nsiri H, Belaid I, Larini P, Thuilliez J, Boisson C, Perrin L*: *ACS Catal.* 6:1028-1036, **2016**

³ Remote functionalization of hydrocarbons with reversibility enhanced stereocontrol.

Vasseur A, Perrin L*, Eisenstein O, Marek I: *Chem. Sci.* 6:2770-2776, **2015**

⁴ Weak backbone CH^{δ+}O=C and side chain tBu^{δ-}tBu London interactions help promote helix folding of achiral NtBu peptoids. Angelici G, Bhattacharjee N, Roy O, Faure S, Didierjean C, Jolibois F, Perrin L*, Taillefumier: *Chem. Commun.* 52:4573-4576, **2016**. Correction *ibid.* 52:6625-6625, **2016**