

Analyse de forme des composés de coordination

Santiago Alvarez

Departament de Química Inorgànica et Institut de Química Teòrica i Computacional
Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, E-08028 Barcelona



La définition de la forme et de la symétrie moléculaires comme propriétés susceptibles d'être mesurées¹ nous offre une nouvelle vision des problèmes structuraux en Chimie.² A partir des mesures quantitatives des distorsions des polyèdres de coordination par rapport aux polyèdres de référence (de Platon, d'Archimède ou de Johnson, par exemple), nous avons développé des outils tels que les *chemins de moindre distorsion* pour l'interconversion de deux polyèdres,³ les *polyèdres de coordination normalisés*⁴ qui omettent les distorsions associées aux différences entre distances de liaison, et les *chemins d'association et de dissociation de ligands*.⁵ Ces outils nous permettent une description beaucoup plus précise de la stéréochimie des composées de coordination, aussi que l'établissement de corrélations entre structures et propriétés. Parmi les exemples d'application de nos analyses de forme, on discutera la stéréochimie de la coordination secondaire dans certains complexes d'uranium⁶ et les chemins de distorsion de la géométrie octaédrique associés aux transitions de spin.⁷

¹ S. Alvarez et al., *Coord. Chem. Rev.*, **2005**, 249, 1693; D. Casanova et al., *J. Comput. Chem.*, **2010**, 31, 2389.

² S. Alvarez, E. Ruiz, *Supramolecular Chemistry, From Molecules to Nanomaterials*, J. W. Steed, P. A. Gale, eds., John Wiley & Sons, Chichester, UK, **2012**, 5, 1993-2044.

³ D. Casanova et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **2004**, 126, 1755.

⁴ S. Alvarez et al., travail inédit.

⁵ A. Ruiz-Martínez et al., *Chem. Eur. J.*, **2010**, 16, 6567.

⁶ S. Alvarez, B. Menjón, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2014**, 53, 2810.

⁷ M. A. Halcrow et al., *Coord. Chem. Rev.*, soumis.