

Résumé :

Le sujet de thèse traite d'un point de vue théorique le mode de coordination et la structure électronique des complexes de métaux de transition aux ligands carbéniques en fonction de la nature du métal. Plusieurs sites de coordinations sont possibles donnant lieu à plusieurs isomères classés entre eux en fonction de leurs énergies relatives.

La méthode de calcul utilisée est la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) pour toute la série de complexes étudiée à l'aide des deux programmes ; ADF en utilisant la base TZP et GAUSSSIEN09 en utilisant la base 6-31++G** avec les fonctionnelles hybrides B3LYP, B3PW91 et non hybrides BP86, PW91PW91. Les visualisations et les représentations des structures moléculaires ont été effectuées à l'aide des programmes Molden, Gaussview et Molekel.

Le manuscrit porte sur quatre parties, la première est une introduction à la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). La deuxième et la troisième partie étudient la structure moléculaire et électronique du carbène et les complexes métalliques de type : $[M(CO)_2Cl(NHC)]$ dont M : (M= V, Mn, Co, Re et Rh) et NHC : (NHC = C_3N_2 ou $N_2H_6C_{11}O_2$) et la quatrième partie parle uniquement de structures moléculaires de quelques complexes de cuivre (Etude de corrélation)

Nous avons étudié dans tous les cas les différentes liaisons. (Re) que dans les éléments riches en électrons comme le Cu

Mots clés :

Fonctionnelle de la densité - Structures électroniques- fonctionnelle hybride, fonctionnelle non hybride.