

# I. Chimie, catalyse

## Un complexe en or pour activer le diazote

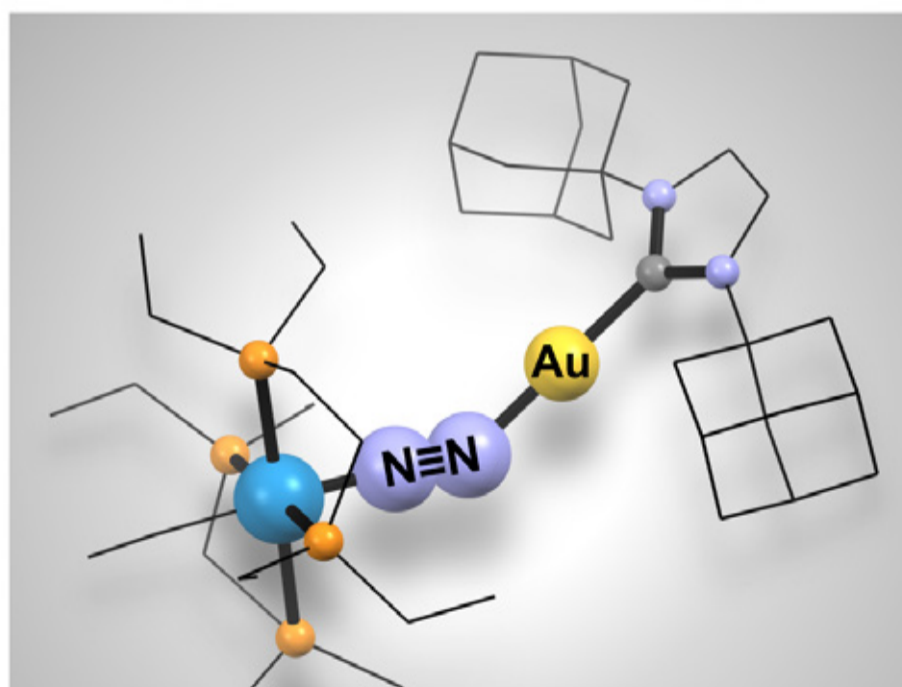
Mots-clés : diazote – or

Le diazote, constituant principal de notre atmosphère, est le seul réservoir d'azote accessible sur la surface terrestre pour les organismes vivants. Pour transformer cette molécule particulièrement inerte, la nature a conçu des enzymes spécifiques, les nitrogénases. Celles-ci fertilisent la biosphère grâce à leur cœur composé d'atomes de fer qui les rend capable de transformer le diazote en ammoniac, un composé facilement métabolisable.

L'homme a dû mettre au point sa propre méthode de transformation de  $N_2$ , le procédé Haber-Bosch, qui mène à la production par centaines de millions de tonnes par an d'ammoniac dont plus des  $\frac{3}{4}$  sont transformés en engrais azotés.

Mais les besoins importants en énergie et ressources fossiles du procédé Haber-Bosch ont poussé les chercheurs à explorer de nouvelles voies de transformation du  $N_2$  en s'inspirant du modèle naturel (les nitrogénases) tout en le dépassant en explorant les capacités d'autres métaux que le fer.

Les chercheurs se sont ainsi intéressés à l'or, métal sous-exploré en chimie du diazote. Ils ont mis au point la synthèse de nouveaux composés présentant une molécule de diazote piégée entre un atome de tungstène et un atome d'or, dont la structure atypique a été expliquée au moyen de calculs quantiques (DFT), progressant ainsi dans la compréhension des mécanismes mis en jeu lors de la coordination du diazote.



© Antoine SIMONNEAU / LCC Toulouse

### Référence

Synthesis, characterization and comparative theoretical investigation of dinitrogen-bridged group 6-gold heterobimetallic complexes, Specklin D., Coffinet A., Vendier L., del Rosal I., Dinoi C., Simonneau A., *Inorganic Chemistry* **2021**, 60, 5545-5562, [10.1021/acs.inorgchem.0c03271](https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c03271)

### Collaboration

Ces travaux ont été réalisés en collaboration avec le laboratoire de physique et chimie des nano-objets (CNRS/Université Paul Sabatier/INSA).

### Équipe

Activation de petites molécules