

Populations électroniques

1. Formation du catalyseur

Table 1 – Evolution des charges atomiques lors de l'activation du catalyseur par SiH₄. P1 correspond à l'atome de phosphore non coordonné dans les espèces asymétriques.

Ligand ¹	Réactifs ¹						VDW ¹						TS ¹					
	Cu ¹	Fi	Si ¹	H ¹	P1 ¹	P2 ¹	Cu ¹	Fi	Si ¹	H ¹	P1 ¹	P2 ¹	Cu ¹	Fi	Si ¹	H ¹	P1 ¹	P2 ¹
2 PH ₃ ¹	0.691	-0.731	0.631	-0.161	-0.061	-0.061	0.721	-0.711	0.851	-0.341	-0.041	-0.041	0.691	-0.681	0.951	-0.411	-0.041	-0.041
BiEt-H ¹	S ¹	0.691	-0.721	0.631	-0.161	0.231	0.731	-0.701	0.861	-0.341	0.241	0.241	0.701	-0.681	0.951	-0.401	0.241	0.241
	A	0.611	-0.711	0.631	-0.161	0.241	0.631	-0.701	0.661	-0.181	0.241	0.251	0.661	-0.681	0.951	-0.391	0.241	0.241
BiEt-Me ¹	S ¹	0.691	-0.731	0.631	-0.161	0.801	0.721	-0.701	0.851	-0.331	0.801	0.801	0.691	-0.681	0.951	-0.391	0.811	0.801
	A	0.621	-0.711	0.631	-0.161	0.801	0.631	-0.711	0.661	-0.181	0.801	0.821	0.671	-0.671	0.941	-0.391	0.821	0.811
BiEt-Ph ¹	S ¹	0.721	-0.741	0.631	-0.161	0.821	0.761	-0.711	0.841	-0.331	0.821	0.811	0.721	-0.671	0.951	-0.411	0.821	0.821
	A	0.661	-0.721	0.631	-0.161	0.841	0.681	-0.721	0.661	-0.171	0.861	0.831	0.711	-0.671	0.941	-0.401	0.891	0.831
BiPh-H ¹	S ¹	0.691	-0.731	0.631	-0.161	0.251	0.701	-0.471	0.701	-0.341	0.261	0.261	0.711	-0.681	0.951	-0.401	0.261	0.261
	A	0.621	-0.711	0.631	-0.161	0.281	0.651	-0.701	0.661	-0.171	0.291	0.281	0.651	-0.681	0.951	-0.381	0.311	0.281
BiPh-Me ¹	S ¹	0.701	-0.741	0.631	-0.161	0.821	0.681	-0.711	0.861	-0.341	0.811	0.821	0.701	-0.681	0.951	-0.401	0.831	0.821
	A	0.631	-0.711	0.631	-0.161	0.841	0.671	-0.711	0.661	-0.181	0.831	0.841	0.681	-0.681	0.951	-0.391	0.851	0.821
BiPh-Ph ¹	S ¹	0.671	-0.751	0.631	-0.161	0.831	0.731	-0.711	0.841	-0.331	0.841	0.841	0.731	-0.671	0.951	-0.411	0.841	0.841
	A	0.641	-0.721	0.631	-0.161	0.871	0.671	-0.711	0.661	-0.181	0.901	0.861	0.681	-0.681	0.941	-0.391	0.911	0.851
BiNa-H ¹	S ¹	0.681	-0.731	0.631	-0.161	0.261	0.741	-0.701	0.861	-0.341	0.261	0.261	0.701	-0.681	0.951	-0.401	0.821	0.831
	A	0.631	-0.711	0.631	-0.161	0.281	0.651	-0.711	0.661	-0.171	0.301	0.281	0.671	-0.681	0.951	-0.391	0.851	0.831
BiNa-Me ¹	S ¹	0.701	-0.741	0.631	-0.161	0.811	0.751	-0.701	0.851	-0.331	0.821	0.821	0.711	-0.681	0.951	-0.401	0.261	0.271
	A	0.641	-0.711	0.631	-0.161	0.841	0.631	-0.721	0.661	-0.181	0.841	0.841	0.661	-0.671	0.941	-0.391	0.321	0.271
BiNa-Ph ¹	S ¹	0.711	-0.731	0.631	-0.161	0.841	0.631	-0.711	0.841	-0.341	0.841	0.841	0.731	-0.671	0.951	-0.411	0.841	0.841
	A	0.681	-0.711	0.631	-0.161	0.891	0.681	-0.711	0.661	-0.171	0.891	0.861	0.691	-0.681	0.941	-0.391	0.891	0.851

VDW!						Produits!					
Cu!	F!	Si!	H!	P!	P2!	Cu!	F!	Si!	H!	P!	P2!
0.50!	-0.62!	1.26!	-0.52!	-0.05!	-0.05!	0.46!	-0.61!	1.29!	-0.49!	-0.06!	-0.06!
0.45!	-0.62!	1.26!	-0.48!	0.25!	0.25!	0.40!	-0.61!	1.29!	-0.45!	0.25!	0.24!
0.35!	-0.62!	1.26!	-0.46!	0.25!	0.26!	0.34!	-0.61!	1.29!	-0.43!	0.26!	0.27!
0.45!	-0.62!	1.26!	-0.50!	0.82!	0.82!	0.40!	-0.61!	1.29!	-0.48!	0.82!	0.81!
0.35!	-0.62!	1.27!	-0.47!	0.82!	0.84!	0.33!	-0.61!	1.29!	-0.45!	0.82!	0.84!
0.52!	-0.62!	1.25!	-0.53!	0.83!	0.83!	0.45!	-0.61!	1.29!	-0.50!	0.84!	0.84!
0.39!	-0.62!	1.27!	-0.48!	0.88!	0.86!	0.38!	-0.61!	1.29!	-0.46!	0.85!	0.87!
0.44!	-0.62!	1.26!	-0.49!	0.27!	0.27!	0.41!	-0.61!	1.29!	-0.46!	0.27!	0.27!
0.37!	-0.62!	1.27!	-0.46!	0.29!	0.30!	0.34!	-0.61!	1.29!	-0.43!	0.30!	0.30!
0.62!	-0.64!	1.10!	-0.49!	0.83!	0.83!	0.42!	-0.61!	1.29!	-0.49!	0.84!	0.84!
0.38!	-0.62!	1.26!	-0.48!	0.85!	0.86!	0.35!	-0.61!	1.29!	-0.45!	0.85!	0.86!
0.53!	-0.62!	1.25!	-0.53!	0.85!	0.85!	0.46!	-0.61!	1.29!	-0.50!	0.85!	0.85!
0.38!	-0.62!	1.26!	-0.48!	0.91!	0.88!	0.34!	-0.61!	1.29!	-0.45!	0.89!	0.91!
0.42!	-0.63!	1.26!	-0.49!	0.28!	0.28!	0.40!	-0.61!	1.29!	-0.46!	0.28!	0.28!
0.35!	-0.62!	1.27!	-0.46!	0.31!	0.31!	0.32!	-0.61!	1.29!	-0.43!	0.30!	0.31!
0.47!	-0.62!	1.26!	-0.51!	0.84!	0.84!	0.42!	-0.61!	1.29!	-0.48!	0.84!	0.84!
0.38!	-0.62!	1.26!	-0.47!	0.86!	0.86!	0.33!	-0.61!	1.29!	-0.45!	0.86!	0.86!
0.51!	-0.62!	1.25!	-0.53!	0.85!	0.84!	0.46!	-0.61!	1.29!	-0.50!	0.85!	0.85!
0.39!	-0.62!	1.27!	-0.47!	0.90!	0.88!	0.36!	-0.61!	1.29!	-0.44!	0.88!	0.89!

Table 2 – Evolution des charges atomiques lors de l'activation du catalyseur par SiH_4 . P1 et P3 correspondent respectivement à l'atome de phosphore non coordonné dans les espèces asymétriques et à l'atome de phosphore du PH_3 .

Ligand. PH_3		Réactifs							VDW						
		Cu	F	Si	H	P1	P2	P3	Cu	F	Si	H	P1	P2	P3
3 PH_3	S	0.73	-0.75	0.63	-0.16	-0.05	-0.05	-0.05	0.72	-0.72	0.75	-0.23	-0.06	-0.06	-0.05
	A	0.74	-0.74	0.63	-0.16	0.24	0.24	-0.05	0.74	-0.72	0.77	-0.23	0.24	0.23	-0.06
BiEt-H	S	0.63	-0.71	0.63	-0.16	0.24	0.25	0.01	0.72	-0.71	0.84	-0.32	0.27	0.22	-0.05
	A	0.74	-0.76	0.63	-0.16	0.81	0.80	-0.04	0.73	-0.72	0.76	-0.23	0.80	0.79	-0.04
BiEt-Me	S	0.64	-0.71	0.63	-0.16	0.79	0.82	0.00	0.66	-0.71	0.65	-0.18	0.79	0.82	-0.01
	A	0.77	-0.75	0.63	-0.16	0.82	0.82	-0.04	0.78	-0.74	0.69	-0.22	0.81	0.82	-0.05
BiEt-Ph	S	0.68	-0.72	0.63	-0.16	0.84	0.86	0.00	0.70	-0.72	0.65	-0.18	0.87	0.83	-0.01
	A	0.74	-0.75	0.63	-0.16	0.26	0.25	-0.05	0.72	-0.72	0.76	-0.20	0.26	0.25	-0.04
BiPh-H	S	0.63	-0.71	0.63	-0.16	0.24	0.25	0.01	0.75	-0.73	0.75	-0.24	0.27	0.25	-0.04
	A	0.74	-0.75	0.63	-0.16	0.81	0.82	-0.04	0.76	-0.72	0.77	-0.22	0.81	0.82	-0.05
BiPh-Me	S	0.66	-0.72	0.63	-0.16	0.84	0.85	0.01	0.69	-0.72	0.66	-0.17	0.84	0.84	-0.02
	A	0.71	-0.76	0.63	-0.16	0.84	0.83	-0.04	0.67	-0.74	0.67	-0.21	0.83	0.82	-0.05
BiPh-Ph	S	0.67	-0.72	0.63	-0.16	0.86	0.89	-0.01	0.69	-0.72	0.65	-0.17	0.90	0.85	-0.01
	A	0.67	-0.72	0.63	-0.16	0.86	0.89	-0.01	0.69	-0.72	0.65	-0.17	0.90	0.85	-0.01

TS							VDW							Products						
Cu	F	Si	H	P1	P2	P3	Cu	F	Si	H	P1	P2	P3	Cu	F	Si	H	P1	P2	P3
0.71	-0.71	0.81	-0.30	-0.04	-0.04	-0.04	0.59	-0.62	1.27	-0.56	-0.06	-0.06	-0.06	0.57	-0.61	1.29	-0.55	-0.06	-0.06	-0.06
0.70	-0.68	0.95	-0.40	0.24	0.24	-0.03	0.56	-0.63	1.27	-0.54	0.24	0.24	-0.06	0.55	-0.61	1.29	-0.53	0.24	0.24	-0.06
0.70	-0.68	0.94	-0.40	0.25	0.22	-0.05	0.53	-0.62	1.26	-0.53	0.27	0.24	-0.05	0.42	-0.61	1.29	-0.47	0.25	0.26	-0.06
0.70	-0.68	0.95	-0.40	0.80	0.81	-0.02	0.56	-0.62	1.26	-0.56	0.81	0.80	-0.01	0.55	-0.61	1.29	-0.54	0.80	0.80	-0.07
0.67	-0.68	0.94	-0.39	0.82	0.81	-0.02	0.38	-0.62	1.27	-0.48	0.83	0.84	-0.03	0.36	-0.61	1.29	-0.47	0.82	0.84	-0.04
0.72	-0.67	0.94	-0.40	0.82	0.82	-0.03	0.61	-0.62	1.27	-0.57	0.83	0.82	-0.05	0.59	-0.61	1.29	-0.55	0.83	0.82	-0.05
0.71	-0.67	0.93	-0.40	0.90	0.83	-0.01	0.39	-0.62	1.26	-0.48	0.91	0.88	-0.01	0.51	-0.61	1.29	-0.51	0.84	0.90	-0.06
0.72	-0.68	0.95	-0.40	0.26	0.26	-0.02	0.57	-0.63	1.27	-0.54	0.26	0.25	-0.06	0.55	-0.61	1.29	-0.53	0.26	0.25	-0.06
0.71	-0.68	0.96	-0.41	0.34	0.27	-0.04	0.39	-0.62	1.27	-0.47	0.30	0.30	-0.03	0.36	-0.61	1.29	-0.44	0.30	0.31	-0.04
0.72	-0.67	0.95	-0.40	0.82	0.82	-0.02	0.50	-0.62	1.26	-0.52	0.84	0.84	-0.02	0.55	-0.61	1.29	-0.54	0.81	0.82	-0.06
0.69	-0.68	0.94	-0.39	0.85	0.82	-0.02	0.39	-0.62	1.26	-0.48	0.86	0.85	-0.03	0.37	-0.61	1.29	-0.47	0.85	0.87	-0.03
0.73	-0.67	0.95	-0.41	0.84	0.84	-0.02	0.60	-0.62	1.29	-0.58	0.85	0.84	-0.01	0.60	-0.61	1.29	-0.56	0.85	0.83	-0.07
0.70	-0.68	0.93	-0.39	0.90	0.85	-0.02	0.39	-0.62	1.26	-0.48	0.91	0.88	-0.01	0.36	-0.61	1.29	-0.46	0.88	0.91	-0.02

Table 3 – Evolution des charges atomiques lors de l'activation du catalyseur par HSiMe₃ et HSi(OMe)₃.

HSiMe ₃	Réactifs						VDW						TS					
	Cu	F	Si	H	P1	P2	Cu	F	Si	H	P1	P2	Cu	F	Si	H	P1	P2
BiEt-H	0.69	-0.72	1.51	-0.22	0.23	0.23	0.74	-0.74	1.55	-0.27	0.23	0.23	0.71	-0.68	1.82	-0.43	0.24	0.24
BiEt-Me	0.69	-0.73	1.51	-0.22	0.80	0.80	0.76	-0.70	1.72	-0.38	0.80	0.80	0.70	0.68	1.81	-0.43	0.81	0.81
BiEt-Ph	0.72	-0.74	1.51	-0.22	0.82	0.82	0.81	-0.76	1.59	-0.31	0.81	0.82	0.73	-0.68	1.81	-0.43	0.82	0.82
HSi(OMe) ₃	Réactifs						VDW						TS					
	Cu	F	Si	H	P1	P2	Cu	F	Si	H	P1	P2	Cu	F	Si	H	P1	P2
BiEt-H	0.69	-0.72	2.10	-0.27	0.23	0.23	0.73	-0.74	2.12	-0.31	0.23	0.23	0.72	-0.68	2.21	-0.41	0.24	0.25
BiEt-Me	0.69	-0.73	2.10	-0.27	0.80	0.80	0.74	-0.69	2.17	-0.39	0.81	0.79	0.73	-0.69	2.20	-0.41	0.80	0.81
BiEt-Ph	0.72	-0.74	2.10	-0.27	0.82	0.82	0.76	-0.69	2.19	-0.41	0.82	0.82	0.75	-0.69	2.21	-0.42	0.82	0.82

VDW						Produits					
Cu	F	Si	H	P1	P2	Cu	F	Si	H	P1	P2
0.42	-0.64	2.05	-0.47	0.25	0.25	0.40	-0.64	2.05	-0.45	0.25	0.24
0.44	-0.64	2.05	-0.50	0.82	0.81	0.40	-0.64	2.05	-0.48	0.82	0.81
0.49	-0.64	2.05	-0.53	0.83	0.83	0.45	-0.64	2.05	-0.50	0.84	0.84
VDW						Produits					
Cu	F	Si	H	P1	P2	Cu	F	Si	H	P1	P2
0.44	-0.64	2.47	-0.49	0.25	0.25	0.40	-0.63	2.46	-0.45	0.25	0.24
0.45	-0.64	2.47	-0.51	0.81	0.82	0.40	-0.63	2.46	-0.48	0.82	0.81
0.51	-0.63	2.47	-0.54	0.83	0.83	0.45	-0.63	2.46	-0.50	0.84	0.84

Table 4 – Evolution des charges atomiques en fonction de la nature de l'atome d'halogène lors de l'activation du catalyseur par SiH_4 .

[BiEt-H]CuX	Réactifs						VDW						TS					
	Cu	X	Si	H	P1	P2	Cu	X	Si	H	P1	P2	Cu	X	Si	H	P1	P2
X = F	0.69	-0.72	0.63	-0.16	0.23	0.23	0.73	-0.70	0.86	-0.34	0.24	0.24	0.70	-0.68	0.95	-0.40	0.24	0.24
X = Cl	0.67	-0.76	0.63	-0.16	0.24	0.24	0.69	-0.76	0.66	-0.21	0.24	0.24	0.62	-0.48	0.82	-0.49	0.25	0.24
X = I	0.60	-0.66	0.63	-0.16	0.24	0.24	0.60	-0.70	0.64	-0.17	0.24	0.24	0.58	-0.30	0.64	-0.50	0.25	0.24
[BiEt-Me]CuX	Réactifs						VDW						TS					
	Cu	X	Si	H	P1	P2	Cu	X	Si	H	P1	P2	Cu	X	Si	H	P1	P2
X = F	0.69	-0.73	0.63	-0.16	0.80	0.80	0.72	-0.70	0.85	-0.33	0.80	0.80	0.69	-0.68	0.95	-0.39	0.81	0.80
X = Cl	0.67	-0.78	0.63	-0.16	0.81	0.81	0.68	-0.77	0.64	-0.18	0.81	0.81	0.59	-0.46	0.85	-0.51	0.82	0.81
X = I	0.60	-0.72	0.63	-0.16	0.81	0.81	0.61	-0.72	0.64	-0.18	0.81	0.81	0.57	-0.29	0.65	-0.52	0.82	0.81

VDW						Produits					
Cu	X	Si	H	P1	P2	Cu	X	Si	H	P1	P2
0.45	-0.62	1.26	-0.48	0.25	0.25	0.40	-0.61	1.29	-0.45	0.25	0.24
0.44	-0.42	0.91	-0.48	0.25	0.25	0.40	-0.40	0.91	-0.45	0.25	0.24
0.44	-0.25	0.67	-0.48	0.24	0.25	0.40	-0.21	0.64	-0.45	0.25	0.24
VDW						Produits					
Cu	X	Si	H	P1	P2	Cu	X	Si	H	P1	P2
0.45	-0.62	1.26	-0.50	0.82	0.82	0.40	-0.61	1.29	-0.48	0.82	0.81
0.45	-0.42	0.92	-0.50	0.82	0.82	0.40	-0.40	0.91	-0.48	0.82	0.81
0.45	-0.25	0.67	-0.51	0.81	0.52	0.40	-0.21	0.64	-0.48	0.82	0.81

2. Cycle catalytique

Dans les tables suivantes, H_1 et H_2 représente respectivement l'atome d'hydrogène initialement présent sur le catalyseur et l'atome d'hydrogène initialement présent sur l'agent hydrosilylant. P1 et P2 correspondent aux atomes de phosphore du ligand diphosphine alors que P3 correspond à l'atome de phosphore du ligand PH_3 .

Table 5 – Evolution des charges atomiques lors de la réaction non-catalysée.

SiH ₄	Réactifs			TS			Produits		
	C	O	Si	H	C	O	Si	H	
H ₂ CO	0.22	-0.49	0.63	-0.16	-0.03	-0.79	1.00	-0.05	-0.31 -0.88 1.22 0.20
MeHCO	0.41	-0.52	0.63	-0.16	0.19	-0.80	1.00	-0.07	-0.10 -0.90 1.22 0.20
Me ₂ CO	0.59	-0.54	0.63	-0.16	0.40	-0.82	1.00	-0.08	0.10 -0.90 1.21 0.21
PhMeCO	0.57	-0.55	0.63	-0.16	0.41	-0.82	1.00	-0.08	0.10 -0.90 1.21 0.22
HSiMe ₃	Réactifs				TS				Produits
	C	O	Si	H	C	O	Si	H	
H ₂ CO	0.22	-0.49	1.51	-0.22	-0.06	-0.79	1.87	-0.06	-0.31 -0.91 2.03 0.19
Me ₂ CO	0.59	-0.54	1.51	-0.22	0.37	-0.81	1.87	-0.09	0.11 -0.93 2.03 0.20
HSi(OMe) ₃	Réactifs				TS				Produits
	C	O	Si	H	C	O	Si	H	
H ₂ CO	0.22	-0.49	2.10	-0.27	-0.03	-0.78	2.30	-0.12	-0.31 -0.94 2.47 0.20
Me ₂ CO	0.59	-0.54	2.10	-0.27	0.42	-0.81	2.29	-0.16	0.10 -0.95 2.47 0.23

Table 6 – Evolution des charges atomiques le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}(\text{PH}_3)_2$ et le silane SiH_4 .

H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.45	0.55	0.66	0.63	0.68	0.66	0.74	0.45
H ₁	-0.49	-0.49	-0.39	0.18	0.20	0.20	0.20	0.20
C	0.22	0.12	0.01	-0.28	-0.29	-0.30	-0.30	-0.31
O	-0.49	-0.59	-0.72	-0.94	-0.95	-0.94	-0.97	-0.88
Si	-	-	-	0.63	1.06	1.09	0.84	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.50	-0.52	-0.33	-0.49
P1	-0.06	0.04	-0.03	-0.02	-0.04	-0.05	-0.05	-0.06
P2	-0.06	0.04	-0.03	-0.05	-0.04	-0.05	-0.04	-0.06
MeHCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.45	0.48	0.67	0.62	0.69	0.67	0.52	0.45
H ₁	-0.49	-0.52	-0.38	0.18	0.21	0.22	0.21	0.20
C	0.41	0.42	0.22	-0.07	-0.09	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.57	-0.75	-0.94	-0.95	-0.95	-0.91	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.04	1.08	1.19	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.49	-0.52	-0.52	-0.49
P1	-0.06	-0.05	-0.04	-0.03	-0.05	-0.05	-0.04	-0.06
P2	-0.06	-0.04	-0.04	-0.04	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06
Me_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.45	0.48	0.69	0.61	0.69	0.66	0.53	0.45
H ₁	-0.49	-0.52	-0.37	0.20	0.23	0.23	0.22	0.22
C	0.59	0.62	0.41	0.12	0.11	0.11	0.10	0.10
O	-0.54	-0.59	-0.77	-0.94	-0.95	-0.95	-0.92	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.04	1.09	1.18	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.49	-0.52	-0.52	-0.49
P1	-0.06	-0.04	-0.04	-0.02	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06
P2	-0.06	-0.04	-0.04	-0.04	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06
PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.45	0.47	0.70	0.70	-	-	-	0.45
H ₁	-0.49	-0.51	-0.37	0.19	-	-	-	0.22
C	0.57	0.60	0.41	0.11	-	-	-	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.77	-0.95	-	-	-	-0.90
Si	-	-	-	0.63	-	-	-	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-	-	-	-0.49
P1	-0.06	-0.05	-0.04	-0.05	-	-	-	-0.06
P2	-0.06	-0.03	-0.03	-0.06	-	-	-	-0.06

Table 7 – Evolution des charges atomiques le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}(\text{PH}_3)_3$ et le silane SiH_4 .

H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.57	0.60	0.66	0.74	0.68	0.66	0.57	0.57
H_1	-0.55	-0.55	-0.38	0.17	0.21	0.21	0.22	0.20
C	0.22	0.21	0.03	-0.27	-0.30	-0.30	-0.31	-0.31
O	-0.49	-0.57	-0.69	-0.96	-0.95	-0.94	-0.89	-0.88
Si	-	-	-	0.63	1.04	1.08	1.21	1.22
H_2	-	-	-	-0.16	-0.49	-0.51	-0.55	-0.55
P1	-0.06	-0.07	-0.10	-0.05	-0.05	-0.04	-0.06	-0.06
P2	-0.06	-0.07	-0.10	-0.05	-0.04	-0.04	-0.07	-0.06
P3	-0.06	-0.05	-0.04	-0.06	-0.01	-0.01	-0.06	-0.06
MeHCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.57	0.51	0.66	0.74	0.69	0.65	0.57	0.57
H_1	-0.55	-0.58	-0.36	0.16	0.20	0.22	0.20	0.20
C	0.41	0.43	0.22	-0.06	-0.09	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.57	-0.71	-0.97	-0.95	-0.94	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.04	1.09	1.21	1.22
H_2	-	-	-	-0.16	-0.49	-0.52	-0.55	-0.55
P1	-0.06	-0.08	-0.10	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.06
P2	-0.06	-0.07	-0.11	-0.05	-0.05	-0.04	-0.06	-0.06
P3	-0.06	-0.06	-0.05	-0.06	-0.01	-0.01	-0.07	-0.06
Me_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.57	0.58	0.66	0.73	0.69	0.65	0.57	0.57
H_1	-0.55	-0.57	-0.34	0.17	0.23	0.23	0.21	0.22
C	0.59	0.61	0.41	0.13	0.11	0.11	0.10	0.10
O	-0.54	-0.58	-0.72	-0.97	-0.95	-0.95	-0.91	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.03	1.09	1.21	1.21
H_2	-	-	-	-0.16	-0.49	-0.53	-0.55	-0.55
P1	-0.06	-0.07	-0.11	-0.05	-0.05	-0.56	-0.07	-0.06
P2	-0.06	-0.07	-0.11	-0.05	-0.05	-0.50	-0.06	-0.06
P3	-0.06	-0.06	-0.05	-0.06	-0.01	-0.01	-0.07	-0.06

Table 8 – Evolution des charges atomiques le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiEt-H}]$ et le silane SiH_4 .

H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.40	0.47	0.69	0.69	0.68	0.64	0.40	0.40
H ₁	-0.45	-0.47	-0.37	0.17	0.20	0.20	0.20	0.20
C	0.22	0.16	0.00	-0.28	-0.29	-0.30	-0.32	-0.31
O	-0.49	-0.57	-0.74	-0.94	-0.94	-0.94	-0.90	-0.88
Si	-	-	-	0.63	1.04	1.09	1.21	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.50	-0.46	-0.45
P1	0.25	0.25	0.25	0.23	0.24	0.24	0.25	0.25
P2	0.25	0.25	0.25	0.24	0.25	0.25	0.25	0.25
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.40	0.41	0.70	0.67	0.68	0.63	0.39	0.40
H ₁	-0.45	-0.49	-0.37	0.17	0.22	0.22	0.20	0.20
C	0.41	0.42	0.21	-0.07	-0.09	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.57	-0.76	-0.94	-0.95	-0.95	-0.91	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.04	1.09	1.20	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.48	-0.51	-0.46	-0.45
P1	0.25	0.25	0.25	0.23	0.24	0.24	0.26	0.25
P2	0.25	0.24	0.25	0.24	0.24	0.25	0.25	0.25
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.40	0.42	0.70	0.67	0.68	0.63	0.39	0.40
H ₁	-0.45	-0.49	-0.36	0.17	0.22	0.22	0.20	0.20
C	0.41	0.43	0.21	-0.07	-0.09	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.57	-0.76	-0.94	-0.95	-0.95	-0.91	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.04	1.09	1.20	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.48	-0.51	-0.46	-0.45
P1	0.25	0.25	0.24	0.23	0.24	0.24	0.26	0.25
P2	0.25	0.25	0.25	0.24	0.24	0.25	0.25	0.25
Me ₂ CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.40	0.41	0.69	0.66	0.69	0.64	0.39	0.40
H ₁	-0.45	-0.49	-0.36	0.20	0.23	0.23	0.21	0.22
C	0.59	0.61	0.40	0.12	0.11	0.11	0.10	0.10
O	-0.54	-0.59	-0.78	-0.95	-0.95	-0.65	-0.92	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.04	1.09	1.20	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.48	-0.51	-0.46	-0.45
P1	0.25	0.25	0.25	0.24	0.24	0.24	0.26	0.25
P2	0.25	0.24	0.25	0.24	0.24	0.24	0.25	0.25
(R) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.40	0.41	0.65	0.70	0.71	0.61	0.54	0.40
H ₁	-0.45	-0.49	-0.37	0.19	0.24	0.23	0.23	0.22
C	0.57	0.59	0.45	0.12	0.10	0.10	0.09	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.72	-0.95	-0.94	-0.96	-0.93	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.02	1.12	1.17	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.46	-0.52	-0.52	-0.45
P1	0.25	0.25	0.25	0.23	0.24	0.24	0.24	0.25
P2	0.25	0.25	0.26	0.24	0.25	0.25	0.24	0.25
(S) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.40	0.41	0.72	0.70	0.67	0.64	0.41	0.40
H ₁	-0.45	-0.48	-0.35	0.20	0.24	0.24	0.22	0.22
C	0.57	0.59	0.40	0.12	0.10	0.10	0.09	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.77	-0.94	-0.95	-0.94	-0.91	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.04	1.08	1.20	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.48	-0.50	-0.47	-0.45
P1	0.25	0.25	0.25	0.24	0.24	0.24	0.26	0.25
P2	0.25	0.24	0.25	0.24	0.24	0.24	0.25	0.25

Table 9 – Evolution des charges atomiques le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiEt-Me}]$ et le silane SiH_4 .

H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.40	0.52	0.66	0.72	0.66	0.64	0.43	0.40
H_1	-0.48	-0.49	-0.38	0.16	0.19	0.20	0.20	0.20
C	0.22	0.16	0.01	-0.27	-0.30	-0.30	-0.31	-0.31
O	-0.49	-0.58	-0.73	-0.94	-0.95	-0.93	-0.89	-0.88
Si	-	-	-	0.63	1.02	1.13	1.20	1.22
H_2	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.53	-0.49	-0.48
P1	0.82	0.82	0.81	0.80	0.80	0.80	0.83	0.82
P2	0.81	0.82	0.81	0.81	0.80	0.81	0.82	0.81
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.40	0.45	0.66	0.65	0.65	0.54	0.43	0.40
H_1	-0.48	-0.51	-0.38	0.18	0.20	0.22	0.20	0.20
C	0.41	0.41	0.22	-0.07	-0.08	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.56	-0.75	-0.96	-0.95	0.94	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.02	1.13	1.21	1.22
H_2	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.54	-0.49	-0.48
P1	0.82	0.81	0.81	0.82	0.80	0.80	0.81	0.82
P2	0.81	0.82	0.81	0.81	0.80	0.81	0.83	0.81
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.40	0.46	0.66	0.65	0.65	0.54	0.43	0.40
H_1	-0.48	-0.52	-0.38	0.18	0.20	0.22	0.20	0.20
C	0.41	0.42	0.22	-0.07	-0.08	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.57	-0.75	-0.96	-0.95	0.94	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.02	1.13	1.21	1.22
H_2	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.54	-0.49	-0.48
P1	0.82	0.81	0.81	0.82	0.80	0.80	0.81	0.82
P2	0.81	0.82	0.81	0.81	0.80	0.81	0.83	0.81
Me_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.40	0.45	0.65	0.67	0.70	0.65	0.70	0.40
H_1	-0.48	-0.52	-0.38	0.19	0.21	0.22	0.21	0.22
C	0.59	0.62	0.42	0.13	0.11	0.11	0.11	0.10
O	-0.54	-0.59	-0.76	-0.95	-0.95	-0.94	-0.95	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.03	1.10	1.03	1.21
H_2	-	-	-	-0.16	-0.48	-0.52	-0.48	-0.48
P1	0.82	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.82
P2	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81
(R) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.40	0.44	0.63	0.68	0.73	0.53	0.45	0.40
H_1	-0.48	-0.51	-0.38	0.19	0.24	0.24	0.22	0.22
C	0.57	0.59	0.42	0.12	0.10	0.11	0.10	0.10
O	-0.55	-0.58	-0.76	-0.96	-0.94	-0.95	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.00	1.11	1.21	1.21
H_2	-	-	-	-0.16	-0.46	-0.54	-0.50	-0.48
P1	0.82	0.81	0.81	0.82	0.80	0.79	0.82	0.82
P2	0.81	0.82	0.81	0.81	0.80	0.79	0.81	0.81
(S) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.40	0.36	0.65	0.71	0.61	0.62	0.43	0.40
H_1	-0.48	-0.51	-0.38	0.18	0.25	0.24	0.22	0.22
C	0.57	0.57	0.42	0.12	0.11	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.54	-0.75	-0.85	-0.96	-0.93	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.12	1.20	1.21
H_2	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.52	-0.50	-0.48
P1	0.82	0.80	0.81	0.80	0.80	0.81	0.82	0.82
P2	0.81	0.81	0.80	0.80	0.79	0.81	0.81	0.81

Table 10 – Evolution des charges atomiques le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiEt-Ph}]$ et le silane SiH_4 .

H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.45	0.60	0.60	0.73	0.74	0.67	0.59	0.45
H ₁	-0.50	-0.50	-0.43	0.17	0.19	0.20	0.20	0.20
C	0.22	0.13	0.04	-0.27	-0.29	-0.30	-0.31	-0.31
O	-0.49	-0.61	-0.71	-0.96	-0.94	-0.93	-0.91	-0.88
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.13	1.20	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.54	-0.54	-0.50
P1	0.84	0.83	0.82	0.82	0.83	0.84	0.84	0.84
P2	0.84	0.83	0.82	0.82	0.82	0.82	0.81	0.84
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.45	0.51	0.71	0.71	0.75	0.64	0.54	0.45
H ₁	-0.50	-0.54	-0.41	0.17	0.20	0.21	0.21	0.20
C	0.41	0.43	0.24	-0.07	-0.09	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.59	-0.74	-0.96	-0.94	-0.93	-0.91	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.14	1.19	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.55	-0.54	-0.50
P1	0.84	0.83	0.82	0.83	0.81	0.82	0.83	0.84
P2	0.84	0.83	0.82	0.83	0.81	0.82	0.83	0.84
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.45	0.50	0.71	0.71	0.75	0.64	0.54	0.45
H ₁	-0.50	-0.54	-0.41	0.17	0.20	0.21	0.21	0.20
C	0.41	0.43	0.23	-0.07	-0.09	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.58	-0.74	-0.96	-0.94	-0.93	-0.91	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.14	1.19	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.55	-0.54	-0.50
P1	0.84	0.83	0.82	0.83	0.81	0.82	0.83	0.84
P2	0.84	0.83	0.82	0.83	0.81	0.82	0.83	0.84
Me ₂ CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.45	0.47	0.72	0.73	0.75	0.61	0.45	0.45
H ₁	-0.50	-0.52	-0.40	0.17	0.23	0.22	0.21	0.22
C	0.59	0.61	0.44	0.13	0.11	0.11	0.10	0.10
O	-0.54	-0.58	-0.76	-0.97	-0.95	-0.92	-0.91	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.13	1.21	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.48	-0.52	-0.50	-0.50
P1	0.84	0.84	0.82	0.82	0.82	0.83	0.84	0.84
P2	0.84	0.83	0.82	0.82	0.82	0.83	0.84	0.84
(R) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.45	0.51	0.72	0.72	0.75	0.68	0.45	0.45
H ₁	-0.50	-0.54	-0.40	0.18	0.23	0.24	0.22	0.22
C	0.57	0.61	0.43	0.12	0.11	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.75	-0.97	-0.94	-0.94	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.00	1.08	1.20	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.54	-0.50	-0.50
P1	0.84	0.83	0.82	0.83	0.82	0.82	0.84	0.84
P2	0.84	0.84	0.82	0.83	0.82	0.82	0.83	0.84
(S) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.45	0.48	0.72	0.73	0.75	0.66	0.57	0.45
H ₁	-0.50	-0.53	-0.40	0.18	0.23	0.23	0.24	0.22
C	0.57	0.60	0.43	0.12	0.10	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.60	-0.75	-0.97	-0.94	-0.93	-0.92	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.02	1.12	1.19	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.54	-0.55	-0.50
P1	0.84	0.83	0.82	0.83	0.82	0.82	0.83	0.84
P2	0.84	0.83	0.82	0.83	0.82	0.82	0.83	0.84

Table 11 – Evolution des charges atomiques le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiPh-H}]$ et le silane SiH_4 .

H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.41	0.51	0.66	0.69	0.70	0.64	0.43	0.41
H ₁	-0.46	-0.47	-0.35	0.16	0.21	0.21	0.20	0.20
C	0.22	0.13	0.00	-0.27	-0.30	-0.30	-0.32	-0.31
O	-0.49	-0.59	-0.74	-0.94	-0.94	-0.94	-0.89	-0.88
Si	-	-	-	0.63	1.04	1.11	1.19	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.48	-0.51	-0.49	-0.46
P1	0.27	0.27	0.27	0.25	0.26	0.26	0.28	0.27
P2	0.27	0.27	0.27	0.26	0.27	0.27	0.27	0.27
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.41	0.43	0.69	0.69	0.70	0.65	0.50	0.41
H ₁	-0.46	-0.49	-0.35	0.18	0.22	0.22	0.21	0.20
C	0.41	0.43	0.20	-0.06	-0.09	-0.09	-0.09	-0.10
O	-0.52	-0.57	-0.76	-0.95	-0.95	-0.94	-0.92	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.03	1.10	1.18	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.51	-0.50	-0.46
P1	0.27	0.25	0.27	0.26	0.26	0.26	0.27	0.27
P2	0.27	0.27	0.27	0.25	0.27	0.27	0.26	0.27
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.41	0.43	0.68	0.69	0.70	0.65	0.50	0.41
H ₁	-0.46	-0.50	-0.35	0.18	0.22	0.22	0.21	0.20
C	0.41	0.43	0.21	-0.06	-0.09	-0.09	-0.09	-0.10
O	-0.52	-0.57	-0.76	-0.95	-0.95	-0.94	-0.92	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.03	1.10	1.18	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.51	-0.50	-0.46
P1	0.27	0.26	0.27	0.26	0.26	0.26	0.27	0.27
P2	0.27	0.27	0.27	0.25	0.27	0.27	0.26	0.27
Me ₂ CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.41	0.43	0.70	0.69	0.68	0.64	0.53	0.41
H ₁	-0.46	-0.50	-0.35	0.18	0.23	0.23	0.22	0.22
C	0.59	0.61	0.40	0.25	0.11	0.11	0.11	0.10
O	-0.54	-0.59	-0.77	-0.95	-0.92	-0.95	-0.93	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.03	1.10	1.18	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.49	-0.51	-0.52	-0.46
P1	0.27	0.25	0.27	0.25	0.26	0.26	0.26	0.27
P2	0.27	0.27	0.27	0.26	0.27	0.27	0.26	0.27
(R) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.41	0.42	0.73	0.70	0.73	0.61	0.45	0.41
H ₁	-0.46	-0.49	-0.35	0.19	0.23	0.23	0.22	0.22
C	0.57	0.59	0.40	0.11	0.10	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.77	-0.95	-0.94	-0.93	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.13	1.20	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.53	-0.49	-0.46
P1	0.27	0.27	0.27	0.25	0.27	0.27	0.27	0.27
P2	0.27	0.25	0.27	0.25	0.26	0.25	0.26	0.27
(S) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.41	0.43	0.72	0.70	0.71	0.60	0.42	0.41
H ₁	-0.46	-0.49	-0.35	0.19	0.24	0.23	0.22	0.22
C	0.57	0.59	0.40	0.11	0.10	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.77	-0.95	-0.94	-0.94	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.12	1.20	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.46	-0.52	-0.47	-0.46
P1	0.27	0.25	0.26	0.26	0.26	0.27	0.27	0.27
P2	0.27	0.27	0.27	0.26	0.27	0.27	0.27	0.27

Table 12 – Evolution des charges atomiques le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiPh-Me}]$ et le silane SiH_4 .

H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.42	0.52	0.60	0.63	0.61	0.62	0.46	0.42
H ₁	-0.49	-0.50	-0.39	0.16	0.20	0.21	0.20	0.20
C	0.22	0.17	0.02	-0.28	-0.30	-0.30	-0.31	-0.31
O	-0.49	-0.58	-0.72	-0.95	-0.95	-0.93	-0.89	-0.88
Si	-	-	-	0.63	1.02	1.12	1.20	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.52	-0.50	-0.49
P1	0.84	0.84	0.82	0.85	0.82	0.84	0.84	0.84
P2	0.84	0.84	0.82	0.84	0.82	0.83	0.83	0.84
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.42	0.46	0.68	0.63	0.73	0.63	0.48	0.42
H ₁	-0.49	-0.51	-0.38	0.17	0.20	0.21	0.20	0.20
C	0.41	0.42	0.22	-0.07	-0.09	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.57	-0.74	-0.95	-0.94	-0.93	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.12	1.19	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.46	-0.52	-0.51	-0.49
P1	0.84	0.83	0.83	0.84	0.83	0.83	0.84	0.84
P2	0.84	0.84	0.83	0.85	0.82	0.83	0.83	0.84
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.42	0.46	0.61	0.63	0.73	0.63	0.48	0.42
H ₁	-0.49	-0.52	-0.39	0.17	0.20	0.21	0.20	0.20
C	0.41	0.43	0.23	-0.07	-0.09	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.57	-0.75	-0.95	-0.94	-0.93	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.12	1.19	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.46	-0.52	-0.51	-0.49
P1	0.84	0.83	0.82	0.84	0.83	0.83	0.84	0.84
P2	0.84	0.83	0.82	0.85	0.82	0.83	0.83	0.84
Me ₂ CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.42	0.46	0.67	0.67	0.72	0.64	0.44	0.42
H ₁	-0.49	-0.51	-0.38	0.19	0.22	0.22	0.23	0.22
C	0.59	0.61	0.42	0.13	0.11	0.11	0.10	0.10
O	-0.54	-0.59	-0.76	-0.95	-0.95	-0.94	-0.91	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.03	1.10	1.19	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.51	-0.50	-0.49
P1	0.84	0.83	0.83	0.83	0.83	0.84	0.84	0.84
P2	0.84	0.83	0.82	0.83	0.82	0.83	0.83	0.84
(R) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.42	0.46	0.71	0.67	0.75	0.62	0.44	0.42
H ₁	-0.49	-0.50	-0.38	0.19	0.23	0.23	0.22	0.22
C	0.57	0.60	0.42	0.12	0.10	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.60	-0.75	-0.97	-0.94	-0.92	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.00	1.12	1.21	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.46	-0.52	-0.49	-0.49
P1	0.84	0.83	0.83	0.82	0.82	0.83	0.84	0.84
P2	0.84	0.83	0.82	0.81	0.82	0.82	0.83	0.84
(S) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.42	0.41	0.70	0.72	0.74	0.63	0.46	0.42
H ₁	-0.49	-0.52	-0.36	0.18	0.25	0.24	0.22	0.22
C	0.57	0.60	0.41	0.12	0.10	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.58	-0.75	-0.95	-0.94	-0.93	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	0.99	1.11	1.20	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.45	-0.52	-0.50	-0.49
P1	0.84	0.83	0.84	0.80	0.82	0.82	0.83	0.84
P2	0.84	0.83	0.83	0.82	0.82	0.83	0.84	0.84

Table 13 – Evolution des charges atomiques le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiPh-Ph}]$ et le silane SiH_4 .

H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.46	0.58	0.70	0.73	0.75	0.66	0.54	0.46
H ₁	-0.50	-0.50	-0.41	0.16	0.19	0.20	0.21	0.20
C	0.22	0.15	0.02	-0.28	-0.30	-0.31	-0.31	-0.31
O	-0.49	-0.60	-0.72	-0.96	-0.94	-0.92	-0.90	-0.88
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.13	1.20	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.55	-0.53	-0.50
P1	0.85	0.85	0.85	0.84	0.84	0.84	0.84	0.85
P2	0.85	0.84	0.84	0.83	0.84	0.84	0.85	0.85
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.46	0.52	0.67	0.73	0.75	0.63	0.48	0.46
H ₁	-0.50	-0.53	-0.41	0.16	0.20	0.21	0.20	0.20
C	0.41	0.42	0.24	-0.07	-0.09	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.58	-0.74	-0.97	-0.94	-0.92	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.13	1.21	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.53	-0.51	-0.50
P1	0.85	0.84	0.84	0.84	0.84	0.85	0.85	0.85
P2	0.85	0.85	0.85	0.83	0.84	0.85	0.85	0.85
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.46	0.52	0.69	0.73	0.75	0.63	0.48	0.46
H ₁	-0.50	-0.54	-0.41	0.16	0.20	0.21	0.20	0.20
C	0.41	0.43	0.24	-0.07	-0.09	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.58	-0.74	-0.97	-0.94	-0.92	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.13	1.21	1.22
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.53	-0.51	-0.50
P1	0.85	0.85	0.84	0.84	0.84	0.85	0.85	0.85
P2	0.85	0.84	0.85	0.83	0.84	0.85	0.85	0.85
Me ₂ CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.46	0.51	0.68	0.73	0.75	0.64	0.48	0.46
H ₁	-0.50	-0.54	-0.40	0.17	0.23	0.22	0.21	0.22
C	0.59	0.62	0.44	0.13	0.11	0.11	0.10	0.10
O	-0.54	-0.60	-0.76	-0.97	-0.95	-0.93	-0.91	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.13	1.21	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.48	-0.55	-0.51	-0.50
P1	0.85	0.85	0.85	0.84	0.84	0.84	0.85	0.85
P2	0.85	0.86	0.84	0.83	0.83	0.84	0.85	0.85
(R) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.46	0.48	0.72	0.74	0.74	0.67	0.48	0.46
H ₁	-0.50	-0.52	-0.40	0.19	0.23	0.24	0.24	0.22
C	0.57	0.61	0.45	0.12	0.10	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.75	-0.97	-0.94	-0.93	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.09	1.20	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.48	-0.53	-0.51	-0.50
P1	0.85	0.84	0.84	0.84	0.84	0.84	0.85	0.85
P2	0.85	0.85	0.85	0.83	0.84	0.84	0.85	0.85
(S) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.46	0.50	0.65	0.74	0.75	0.65	0.47	0.46
H ₁	-0.50	-0.53	-0.40	0.18	0.21	0.23	0.22	0.22
C	0.57	0.60	0.44	0.11	0.11	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.60	-0.76	-0.96	-0.94	-0.92	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.02	1.11	1.21	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.54	-0.51	-0.50
P1	0.85	0.84	0.84	0.84	0.84	0.84	0.85	0.85
P2	0.85	0.85	0.85	0.83	0.84	0.84	0.85	0.85

Table 14 – Evolution des charges atomiques le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiEt-H}]\cdot\text{PH}_3$ et le silane SiH_4 .

H_2CO	Réactifs	VDW	TS tetra	TS trig	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.55	0.57	0.64	0.68	0.75	0.68	0.63	0.54	0.55
H_1	-0.53	-0.53	-0.41	-0.36	0.17	0.20	0.20	0.20	0.20
C	0.22	0.21	0.07	-0.01	-0.27	-0.29	-0.30	-0.31	-0.31
O	-0.49	-0.57	-0.69	-0.74	-0.95	-0.94	-0.94	-0.89	-0.88
Si	-	-	-	-	0.63	1.04	1.10	1.21	1.22
H_2	-	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.51	-0.53	-0.53
P1	0.24	0.24	0.23	0.28	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24
P2	0.24	0.23	0.25	0.25	0.24	0.25	0.25	0.23	0.24
P3	-0.06	-0.06	-0.05	-0.03	-0.06	-0.02	-0.01	-0.06	-0.06
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS tetra	TS trig	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.55	0.54	0.64	0.70	0.74	0.68	0.62	0.54	0.55
H_1	-0.53	-0.55	-0.39	-0.36	0.18	0.22	0.21	0.20	0.20
C	0.41	0.43	0.25	0.20	-0.06	-0.09	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.58	-0.71	-0.76	-0.96	-0.95	-0.94	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	-	0.63	1.03	1.10	1.21	1.22
H_2	-	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.51	-0.53	-0.53
P1	0.24	0.23	0.22	0.25	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24
P2	0.24	0.23	0.24	0.25	0.25	0.25	0.25	0.23	0.24
P3	-0.06	-0.06	-0.04	-0.03	-0.05	-0.02	-0.01	-0.07	-0.06
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS tetra	TS trig	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.55	0.54	0.64	0.70	0.74	0.68	0.62	0.54	0.55
H_1	-0.53	-0.55	-0.39	-0.37	0.18	0.22	0.21	0.20	0.20
C	0.41	-0.43	0.25	0.20	-0.06	-0.09	-0.09	-0.10	-0.10
O	-0.52	-0.58	-0.71	-0.76	-0.96	-0.95	-0.94	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	-	0.63	1.03	1.10	1.21	1.22
H_2	-	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.51	-0.53	-0.53
P1	0.24	0.23	0.22	0.25	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24
P2	0.24	0.24	0.24	0.24	0.25	0.25	0.25	0.23	0.24
P3	-0.06	-0.06	-0.04	-0.01	-0.05	-0.02	-0.01	-0.07	-0.06
Me_2CO	Réactifs	VDW	TS tetra	TS trig	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.55	0.53	0.65	0.71	0.73	0.69	0.63	0.54	0.55
H_1	-0.53	-0.55	-0.37	-0.36	0.19	0.23	0.23	0.21	0.22
C	0.59	0.61	0.45	0.40	0.13	0.11	0.11	0.10	0.10
O	-0.54	-0.58	-0.73	-0.77	-0.96	-0.95	-0.95	-0.91	-0.90
Si	-	-	-	-	0.63	1.03	1.10	1.21	1.21
H_2	-	-	-	-	-0.16	-0.48	-0.52	-0.51	-0.53
P1	0.24	0.24	0.23	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24
P2	0.24	0.22	0.25	0.24	0.24	0.24	0.24	0.23	0.24
P3	-0.06	-0.06	-0.05	-0.03	-0.05	-0.01	0.00	-0.07	-0.06

Table 15 – Evolution des charges atomiques en fonction du catalyseur le long du cycle catalytique lors de la formation du R-PhMeHCOSiH₃.

BiEt-H.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.55	0.55	0.73	0.75	0.70	0.64	0.49	0.55
H ₁	-0.53	-0.54	-0.35	0.18	0.25	0.24	0.23	0.22
C	0.57	0.59	0.40	0.12	0.10	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.77	-0.96	-0.95	-0.94	-0.91	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.02	1.08	1.18	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.50	-0.51	-0.53
P1	0.24	0.23	0.25	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24
P2	0.24	0.24	0.25	0.24	0.24	0.24	0.25	0.24
P3	-0.06	-0.06	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.06
BiEt-Me.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.55	0.55	0.64	0.76	0.64	0.57	0.44	0.55
H ₁	-0.54	-0.56	-0.37	0.17	0.25	0.24	0.23	0.22
C	0.57	0.59	0.42	0.12	0.11	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.57	-0.76	-0.96	-0.95	-0.93	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.00	1.11	1.20	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.52	-0.50	-0.54
P1	0.80	0.80	0.81	0.80	0.79	0.80	0.82	0.80
P2	0.80	0.80	0.80	0.80	0.79	0.81	0.82	0.80
P3	-0.07	-0.06	-0.01	-0.04	0.02	-0.01	-0.03	-0.07
BiEt-Ph.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.59	0.49	0.72	0.79	0.75	0.67	0.48	0.59
H ₁	-0.55	-0.54	-0.40	0.18	0.23	0.25	0.25	0.22
C	0.57	0.61	0.44	0.12	0.10	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.60	-0.76	-0.98	-0.94	-0.94	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.00	1.10	1.19	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.55	-0.52	-0.55
P1	0.83	0.83	0.82	0.82	0.82	0.82	0.84	0.83
P2	0.83	0.83	0.82	0.83	0.82	0.82	0.83	0.83
P3	-0.05	0.00	-0.02	-0.05	0.00	0.01	-0.04	-0.05
BiPh-H.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.55	0.46	0.72	0.74	0.72	0.66	0.42	0.55
H ₁	-0.51	-0.52	-0.34	0.17	0.25	0.23	0.23	0.22
C	0.57	0.60	0.40	0.11	0.10	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.77	-0.96	-0.95	-0.94	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.08	1.19	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.46	-0.50	-0.48	-0.51
P1	0.26	0.28	0.27	0.25	0.26	0.26	0.27	0.26
P2	0.25	0.27	0.27	0.26	0.27	0.27	0.27	0.25
P3	-0.06	-0.02	-0.02	-0.05	-0.01	0.00	-0.05	-0.06
BiPh-Me.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.55	0.58	0.59	0.66	0.72	0.65	0.70	0.55
H ₁	-0.54	-0.55	-0.39	0.18	0.23	0.24	0.24	0.22
C	0.57	0.60	0.43	0.11	0.10	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.77	-0.99	-0.94	-0.94	-0.94	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.09	1.02	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.46	-0.52	-0.47	-0.54
P1	0.81	0.82	0.81	0.81	0.82	0.82	0.82	0.81
P2	0.82	0.82	0.81	0.81	0.82	0.83	0.83	0.82
P3	-0.06	-0.06	0.00	-0.05	-0.01	0.00	-0.03	-0.06

BiPhPhH.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.60	0.50	0.64	0.78	0.75	0.68	0.49	0.60
H ₁	-0.56	-0.53	-0.41	0.17	0.23	0.24	0.24	0.22
C	0.57	0.60	0.45	0.12	0.10	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.79	-0.76	-0.99	-0.94	-0.94	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.03	1.11	1.20	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.49	-0.54	-0.52	-0.56
P1	0.85	0.85	0.83	0.84	0.85	0.85	0.85	0.85
P2	0.83	0.86	0.84	0.84	0.84	0.84	0.85	0.83
P3	-0.07	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.01	-0.04	-0.07

Table 16 – Evolution des charges atomiques en fonction du catalyseur le long du cycle catalytique lors de la formation du S-PhMeHCOSiH₃.

BiEt-H.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.55	0.55	0.72	0.75	0.68	0.63	0.44	0.55
H ₁	-0.53	-0.54	-0.35	0.18	0.24	0.24	0.22	0.22
C	0.57	0.59	0.40	0.12	0.10	0.01	0.10	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.77	-0.96	-0.95	-0.94	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.03	1.09	1.20	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.51	-0.50	-0.53
P1	0.24	0.23	0.25	0.24	0.24	0.24	0.25	0.24
P2	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24	0.25	0.24
P3	-0.06	-0.06	-0.03	-0.05	-0.02	-0.01	-0.03	-0.06
BiEt-Me.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.55	0.54	0.65	0.76	0.56	0.63	0.57	0.55
H ₁	-0.54	-0.56	-0.38	0.17	0.25	0.23	0.22	0.22
C	0.57	0.59	0.42	0.12	0.11	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.76	0.97	-0.96	-0.93	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.11	1.20	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.53	-0.55	-0.54
P1	0.80	0.80	0.81	0.80	0.78	0.81	0.81	0.80
P2	0.80	0.80	0.81	0.81	0.79	0.81	0.81	0.80
P3	-0.07	-0.06	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.06	-0.07
BiEt-Ph.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.59	0.49	0.72	0.79	0.75	0.65	0.47	0.59
H ₁	-0.55	-0.53	-0.39	0.18	0.22	0.24	0.25	0.22
C	0.57	0.61	0.43	0.12	0.11	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.60	-0.76	-0.98	-0.94	-0.92	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.02	1.10	1.20	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.54	-0.51	-0.55
P1	0.83	0.83	0.82	0.83	0.82	0.82	0.83	0.83
P2	0.83	0.83	0.82	0.81	0.82	0.82	0.84	0.83
P3	-0.05	0.00	-0.02	-0.06	0.00	-0.01	-0.01	-0.05

BiPh-H.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.55	0.56	0.71	0.76	0.69	0.63	0.49	0.55
H ₁	-0.51	-0.54	-0.34	0.17	0.23	0.23	0.25	0.22
C	0.57	0.60	0.39	0.11	0.11	0.11	0.10	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.77	-0.96	-0.95	-0.94	-0.92	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.03	1.10	1.17	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.48	-0.51	-0.51	-0.51
P1	0.26	0.24	0.27	0.26	0.27	0.26	0.26	0.26
P2	0.25	0.26	0.26	0.26	0.26	0.27	0.28	0.25
P3	-0.06	-0.06	-0.03	-0.05	0.00	0.00	-0.02	-0.06
BiPh-Me.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.55	0.57	0.70	0.77	0.72	0.65	0.38	0.55
H ₁	-0.54	-0.55	-0.36	0.17	0.22	0.24	0.22	0.22
C	0.57	0.60	0.41	0.12	0.11	0.10	0.10	0.10
O	-0.55	-0.59	-0.76	-0.96	-0.94	-0.94	-0.90	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.02	1.08	1.20	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.46	-0.51	-0.48	-0.54
P1	0.81	0.82	0.83	0.82	0.82	0.82	0.86	0.81
P2	0.82	0.83	0.82	0.81	0.82	0.83	0.85	0.82
P3	-0.06	-0.64	-0.01	-0.04	-0.02	0.00	-0.03	-0.06
BiPhPhH.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.60	0.51	0.69	0.76	0.75	0.68	0.50	0.60
H ₁	-0.56	-0.54	-0.40	0.18	0.22	0.23	0.25	0.22
C	0.57	0.60	0.43	0.11	0.11	0.11	0.09	0.10
O	-0.55	-0.60	-0.76	-0.99	-0.94	-0.92	-0.91	-0.90
Si	-	-	-	0.63	1.01	1.09	1.21	1.21
H ₂	-	-	-	-0.16	-0.47	-0.54	-0.52	-0.56
P1	0.85	0.84	0.83	0.84	0.84	0.83	0.85	0.85
P2	0.83	0.85	0.84	0.83	0.84	0.84	0.85	0.83
P3	-0.07	0.00	-0.01	-0.06	-0.01	0.00	-0.01	-0.07

Table 17 – Evolution des charges atomiques le long de la seconde étape du cycle catalytique lors de la réduction du H_2CO et du Me_2CO par HSiMe_3 .

H ₂ CO						Me ₂ CO					
BiEt-H	Int	VDW	TS2	VDW	Produits	BiEt-H	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.69	0.70	0.78	0.43	0.40	Cu	0.66	0.68	0.78	0.40	0.40
H ₁	0.17	0.18	0.20	0.20	0.19	H ₁	0.20	0.20	0.21	0.22	0.20
C	-0.28	-0.28	-0.29	-0.31	-0.30	C	0.12	0.12	0.11	0.11	0.11
O	-0.94	-0.95	-0.94	-0.92	-0.91	O	-0.95	-0.95	-0.95	-0.94	-0.93
Si	1.51	1.54	1.70	2.03	2.03	Si	1.51	1.53	1.69	2.02	2.03
H ₂	-0.22	-0.25	-0.36	-0.47	-0.45	H ₂	-0.22	-0.25	-0.36	-0.47	-0.45
P1	0.23	0.23	0.24	0.27	0.25	P1	0.24	0.24	0.24	0.23	0.25
P2	0.24	0.24	0.24	0.25	0.25	P2	0.24	0.24	0.24	0.25	0.25
BiEt-Me	Int	VDW	TS2	VDW	Produits	BiEt-Me	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.72	0.72	0.78	0.43	0.40	Cu	0.67	0.70	0.79	0.43	0.40
H ₁	0.16	0.17	0.20	0.20	0.19	H ₁	0.19	0.19	0.21	0.22	0.20
C	-0.27	-0.28	-0.29	-0.30	-0.30	C	0.13	0.13	0.12	0.11	0.11
O	-0.94	-0.96	-0.94	-0.92	-0.91	O	-0.95	-0.96	-0.95	-0.93	-0.93
Si	1.51	1.53	1.71	2.03	2.03	Si	1.51	1.53	1.70	2.03	2.03
H ₂	-0.22	-0.24	-0.36	-0.49	-0.48	H ₂	-0.22	-0.24	-0.36	-0.49	-0.48
P1	0.80	0.80	0.80	0.82	0.82	P1	0.81	0.81	0.80	0.82	0.82
P2	0.81	0.80	0.80	0.82	0.81	P2	0.81	0.80	0.80	0.82	0.81
BiEt-Ph	Int	VDW	TS2	VDW	Produits	BiEt-Ph	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.73	0.80	0.80	0.58	0.45	Cu	0.73	0.72	0.81	0.53	0.45
H ₁	0.17	0.17	0.19	0.20	0.19	H ₁	0.17	0.19	0.20	0.22	0.20
C	-0.27	-0.28	-0.30	-0.30	-0.30	C	0.13	0.13	0.12	0.12	0.11
O	-0.96	-0.97	0.94	-0.92	-0.91	O	-0.97	-0.97	-0.95	-0.93	-0.93
Si	1.51	1.58	1.72	2.04	2.03	Si	1.51	1.52	1.70	2.03	2.03
H ₂	-0.22	-0.29	-0.37	-0.55	-0.50	H ₂	-0.22	-0.23	-0.37	-0.52	-0.50
P1	0.82	0.81	0.81	0.83	0.84	P1	0.82	0.82	0.81	0.83	0.84
P2	0.82	0.83	0.81	0.81	0.84	P2	0.82	0.82	0.81	0.82	0.84

Table 18 – Evolution des charges atomiques le long de la seconde étape du cycle catalytique lors de la réduction du H_2CO et du Me_2CO par $\text{HSi}(\text{OMe})_3$.

H ₂ CO						Me ₂ CO					
BiEt-H	Int	VDW	TS2	VDW	Produits	BiEt-H	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.69	0.73	0.65	0.52	0.40	Cu	0.66	0.73	0.65	0.45	0.40
H ₁	0.17	0.19	0.20	0.21	0.20	H ₁	0.20	0.25	0.25	0.23	0.23
C	-0.28	-0.29	-0.30	-0.30	-0.31	C	0.12	0.11	0.11	0.10	0.10
O	-0.94	-0.99	-0.98	-0.96	-0.94	O	-0.95	-0.99	-0.99	-0.95	-0.94
Si	2.10	2.29	2.42	2.48	2.47	Si	2.10	2.28	2.43	2.48	2.47
H ₂	-0.27	-0.49	-0.54	-0.52	-0.45	H ₂	-0.27	-0.49	-0.55	-0.48	-0.45
P1	0.23	0.24	0.25	0.25	0.25	P1	0.24	0.24	0.24	0.25	0.25
P2	0.24	0.24	0.24	0.24	0.25	P2	0.24	0.24	0.24	0.24	0.25
BiEt-Me	Int	VDW	TS2	VDW	Produits	BiEt-Me	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.72	0.74	0.65	0.42	0.40	Cu	0.67	0.75	0.66	0.43	0.40
H ₁	0.16	0.19	0.21	0.20	0.20	H ₁	0.19	0.25	0.24	0.22	0.23
C	-0.27	-0.29	-0.30	-0.31	-0.31	C	0.13	0.11	0.11	0.11	0.10
O	-0.94	-0.98	-0.98	-0.94	-0.94	O	-0.95	-0.99	-0.98	-0.96	-0.94
Si	2.10	2.27	2.43	2.47	2.47	Si	2.10	2.27	2.44	2.48	2.47
H ₂	-0.27	-0.49	-0.56	-0.49	-0.48	H ₂	-0.27	-0.48	-0.56	-0.49	-0.48
P1	0.80	0.81	0.81	0.82	0.82	P1	0.81	0.80	0.80	0.82	0.82
P2	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	P2	0.81	0.80	0.81	0.81	0.81
BiEt-Ph	Int	VDW	TS2	VDW	Produits	BiEt-Ph	Int	VDW	TS2	VDW	Produits
Cu	0.73	0.59	0.68	0.76	0.45	Cu	0.73	0.77	0.69	0.47	0.45
H ₁	0.17	0.21	0.21	0.22	0.20	H ₁	0.17	0.24	0.22	0.23	0.23
C	-0.27	-0.31	0.30	-0.30	-0.31	C	0.13	0.11	0.11	0.11	0.10
O	-0.96	-0.93	-0.98	-0.98	-0.94	O	-0.97	-0.99	-0.99	-0.95	-0.94
Si	2.10	2.48	2.44	2.27	2.47	Si	2.10	2.27	2.43	2.48	2.47
H ₂	-0.27	-0.55	-0.56	-0.49	-0.50	H ₂	-0.27	-0.49	-0.56	-0.52	-0.50
P1	0.82	0.83	0.83	0.82	0.84	P1	0.82	0.81	0.83	0.85	0.84
P2	0.82	0.81	0.82	0.82	0.84	P2	0.82	0.82	0.82	0.85	0.84