

CHIMIE THEORIQUE**Analyse orbitale de la réactivité**

Notions d'orbitales frontières Théorème de Fukui

Exemples (vus en cours) de l'utilisation d'orbitales frontières dans l'analyse de la réactivité
: Régiosélectivité selon Markovnikov, stéréospécificité de la SN2

Chimie organométallique théorique

1/ Rappels sur les complexes : ligand, géométrie, hapticité, décompte électronique (Sidgwick)

2/ Etude théorique de ML_6 par la méthode des fragments (théorie du champ de ligands)

Diagramme des OM et forme des OM

Passage à ML_4 plan carré

Retour sur la théorie du champ cristallin

3/Ligands σ donateurs puis π donateurs ou accepteurs.

Etude particulière du ligand CO. Donation et rétrodonation

Etude particulière de l'éthylène. Modèle de Dewar-Chat-Duncanson

4/ Activité catalytique des composés organométalliques

Addition oxydante. Elimination réductrice. Substitution et insertion de ligands

Cycles catalytiques étudiés : catalyseur Wilkinson, synthèse OXO et réaction de Heck

CHIMIE ORGANIQUE**Spectroscopies d'absorption moléculaire**

1. Spectroscopie IR

2. Spectroscopie UV-visible

Spectroscopie RMN du proton

Détermination de structures moléculaires à partir des spectres IR, RMN et UV-visible

Un zeste de RMN du ^{13}C n'est pas interdit !