

Paul Fleurat-Lessard

ENS Lyon

Recherche de mécanismes en chimie théorique

La chimie théorique permet actuellement de modéliser de façon relativement précise les réactions de chimie organique ou organométallique. De ce fait, elle devient un outil d'analyse complémentaires aux techniques expérimentales.

Je présenterai tout d'abord la méthode que nous avons développé pour trouver des mécanismes de réaction chimique, puis je l'appliquerais à deux cas qui posaient problèmes à mes collègues organiciens : les réactions multi-composant de Ugi et Ugi-Smiles, et l'ouverture du furane lors d'une réaction de Heck intramoléculaire.