

Ce mémoire se compose d'une introduction générale, de quatre parties distinctes complémentaires et d'une conclusion générale.

- La première partie décrit la méthode théorique utilisée dans ce travail.

- La seconde partie présente l'étude des complexes octaédriques complètement symétriques. Cette étude permettra de mettre en évidence le rôle de chacun des types de ligand utilisés :  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{CH}_2$ , le rôle du carbène et celui de l'acétylène.

Dans la troisième partie, nous étudierons la conformation des quatre structures limites des complexes de cis-carbène-acétylène ainsi que les barrières de potentiel franchies lors des changements de conformation. Le complexe expérimental utilisé par Katz [33] a été modélisé par  $(\text{CO})_4 \text{W}(=\text{CH}_2)(\text{C}_2\text{H}_2)$ . Afin de tenir compte de la présence stabilisante des substituants méthoxy [26], nous avons également étudié la structure de  $(\text{CO})_4 \text{W}(=\text{CHOH})(\text{C}_2\text{H}_2)$ .

- La quatrième partie sera consacrée à l'étude du métallacycle dans ses conformations plane et gauche et de leur stabilité relative.

- Dans la conclusion générale, nous tenterons de tirer les enseignements de ce travail ainsi que quelques perspectives.