

**Structure cristalline du Bis (4-chloroacetylphenyl)
selenide $C_{16}H_{12}Cl_2O_2Se$ déterminée par la diffraction des rayons X et
comparée à la
conformation moléculaire calculée à partir de la chimie quantique (DFT)**

H. Bouraoui¹, M. Medjani¹, Y. Mechehoud³, J. Meinel²

¹Laboratoire de Cristallographie, Université Mentouri, Constantine, Algérie.

²Institut de chimie, université de Rennes 1, LCSIM UMR 6511, 35042 Rennes, France

³Laboratoire VAREN, Département de Chimie, Faculté des Sciences Exactes, Université Mentouri-
Constantine, 25000 Constantine, Algeria
lehazem@yahoo.fr

Résumé

Ce travail concerne une étude comparative de la géométrie moléculaire de composés halogéno- méthyles aromatiques établie à partir de l'expérience (diffraction des rayons X) dans notre cas il sera question du Bis(4-chloroacetylphenyl) selenide $C_{16}H_{12}Cl_2O_2Se$, et celle calculée par la mécanique quantique en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

La structure cristalline du Bis(4-chloroacetylphenyl) sélénide $C_{16}H_{12}Cl_2O_2Se$ a été déterminée par la diffraction des rayons X à la température ambiante. Ce composé cristallise dans le système monoclinique (P1, Z= 2). L'empilement moléculaire suivant l'axe cristallographique *a* est dicté par les forces d'interaction du type Car-Car...O qui sont les plus importantes. Les distances de contact Car- Car...O sont 3.2656Å comparées à la distance de Van der wall's [3.15 Å].

La conformation moléculaire du Bis(4-chloroacetylphenyl) sélénide a été ainsi calculée par la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) dans le cas de la molécule isolée avec les fonctionnelles MPW1PW91 et B3LYP en s'aidant de la chaîne de programmes GAUSSIAN03. Le calcul de la conformation géométrique optimisée donne un bon accord pour les angles de liaison de l'ordre de 0.79% pour chacune des deux fonctionnelles (MPW1PW91 et B3LYP) avec des bases suffisamment étendues Lanl2DZ et 6-311G avec les résultats expérimentaux. Un écart assez significatif de l'ordre de 4.3% dans les angles de liaison est observé entre les résultats du calcul théorique et de la diffraction des rayons X.

Mots clés : Structure Cristalline ; Diffraction RX ; DFT.