

Structure Cristalline, Conformation Moléculaire et Spectroscopie du Pentachlorotoluene

A. Benouattas^a, A. Boudjada^a, J. Meinel^b.

^aLaboratoire de Cristallographie, Université des frères Mentouri, Constantine, Algérie.

^bInstitut de chimie, université de Rennes 1, LCSIM UMR 6511, 35042 Rennes,
Franceassia.benouattas@yahoo.fr

Résumé

Dans le cadre de ce travail, nous avons déterminé d'une part la structure cristalline du pentachlorotoluene (PCT) à partir de la diffraction des rayons X à 293K et d'autre part la conformation moléculaire de ce composé à partir des calculs de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Dans ce composé les substituants sont affectés d'une forte agitation thermique à cause du désordre. La détermination de la structure par les rayons X a montré quel était ce désordre et sa nature.

Les calculs, à partir de la fonctionnelle B3LYP et MPW1PW91 et le jeu de base DGDZVP, proposent, après optimisation géométrique, d'une part des conformations de symétrie C_s et d'autre part quasiment la même énergie de formation. Parmi les deux conformations C_s prédites par les calculs de la mécanique quantique, la conformation qui donne des résultats très proches de ceux obtenus à partir de l'expérience est la conformation obtenue à partir de la fonctionnelle B3LYP et le jeu de base/6311G.

Mots clés : Structure Cristalline ; Pentachlorotoluene ; Diffraction des rayons X ; DFT.