

Structure Cristalline, Conformation Moléculaire et Spectroscopie du Pentachlorotoluene

A. Benouattasa, A. Boudjadaa, J. Meinelb.

*a*Laboratoire de Cristallographie, Université des frères Mentouri, Constantine, Algérie.

*b*Institut 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 Cs et d'autre part quasiment la même énergie de formation. Parmi les deux conformations Cs 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.