

**Etude théorique structurale et spectroscopique infrarouge et Raman de
4,6-Dichloro-2-Methylpyrimidine**

M. Medjana, O. Brihia, N. Hamdounia, 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,
France

medjanimeriem@yahoo.fr

Abstract

Dans le cadre de ce travail nous présentons les résultats des calculs pour la détermination de la conformation moléculaire dans le produit 4,6-dichloro-2-methylpyrimidine obtenu à partir du calcul théorique basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT. Ces résultats de calcul, pour déterminer la conformation moléculaire de la molécule isolée est obtenu en s'aidant de la chaîne de programmes GAUSSIAN en utilisant la fonctionnelles d'échange-corrélation B3LYP et des bases suffisamment étendues adaptées aux produits organiques pour conduire à des évaluations très précises pour les longueurs et angles de liaison, très proches des résultats expérimentaux répertoriés dans la littérature. Les modes internes moléculaires sont calculés en utilisant comme dans l'optimisation géométrique la fonctionnelle B3LYP et les jeux de bases 6-311 et DGTZVP.

Nous terminons l'exposé de ce travail par la comparaison des résultats de calcul théorique des modes de vibrations obtenus à partir de ces deux fonctionnelles avec les fréquences expérimentales de la spectroscopie infra – rouge et raman.

Mots clés : DFT, Conformation, spectroscopie.