

Structure cristalline du Diaminomesitylene (DAM) obtenue a partir de la diffraction des rayons X comparee a la conformation moleculaire calculee (DFT)

O. Brihia, M. Medjanian, N. Hamdounia, S. Meskaljdib, A. Boudjadaa, J. Meinnelc.

aLaboratoire de Cristallographie, Université Mentouri, Constantine, Algérie.

bLaboratoire de chimie théorique et modélisation de l'Unité de Recherche Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale (URCHEMS),

cSciences Chimiques, Université de Rennes 1, UMR CNRS 6226, 35042

Rennes, France

ouardabrihi@yahoo.fr

Résumé

La structure du 2,4,6-triméthylbenzène-1,3-diamine aussi connu comme diaminomésitylène (DAM) résolue à la température ambiante à partir de la diffraction des rayons X en utilisant un monocristal, cristallise dans le groupe d'espace P21/C avec quatre molécules par maille à la différence des produits isotypes le 1,3,5-triméthyl-2,4-dinitrobenzène (DNM) [1] qui appartient au groupe d'espace P212121. L'empilement moléculaire se fait suivant l'axe *a*. La répétition de l'empilement moléculaire suivant l'axe *b* se fait en zig zag avec une inclinaison le long de cet axe. L'inclinaison des plans moléculaires les uns par rapport aux autres le long de cet axe est 70.70°. La cohésion moléculaire intra et inter couches est dictée par la force de contact avec trois types d'interaction (N2—H22...N6i), (N6—H61...Cgii) et C—H... π (C11—H112...Cgiii) g le centre de gravité du cycle benzénique (C1...C6), (codes de symétrie: (i) $-x, y-1/2, -z+3/2$; (ii) $x, -y+1/2, z+1/2$; (iii) $-x, -y, -z+2$). Le groupement méthyle compris entre les deux amines ne présente aucune liaison éclipsée ce qui donne une position « frustrée » par rapport aux autres méthyles qui ont chacun une liaison CMe-H contenue dans le plan et orientée vers Car-H la liaison (C31-H311) et (C51-H513).

Des calculs d'optimisation de la conformation moléculaire en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) en s'aidant de la chaîne de programme ADF, ont conduit à des résultats très proches de l'expérience pour les longueurs et angles de liaison avec un accord moyen de l'ordre de 0.48% et de 0.28% respectivement. Les résultats de calcul à partir de la fonctionnelle (B3LYP) et la base (TZP)

trouvent que la conformation moléculaire du Diaminomesityléne est proche de la symétrie Cs. Les calculs confirment la planéité de la molécule obtenue expérimentalement.

Mots clés : Diffraction, DFT, Conformation.

Référence

[1]- O. Brihi, a N. Hamdouni a, A. Boudjadaa and J. MeinelC Acta Crystallographica Section E
Acta Crystallographica Section E71, o670–o671 (2015).