

Structure Cristalline et Conformation Moléculaire du Bromodurène

N. Hamdouni¹, A. Boudjada¹, O. Brihi¹, M. Medjani¹ and J. Meinnel²

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

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

n_hamdouni@yahoo.fr

Abstract

Dans le but de comprendre le comportement du radical méthyle (CH₃) dans des produits benzéniques C₁₀H₁₂X₂ substitués par des méthyles et des halogènes (X= Cl, Br, I) nous avons déterminé d'une part la structure cristalline du 1-bromo-2,3,5,6-tétraméthylebenzène aussi connu comme bromodurène (C₁₀H₁₃ Br) à partir de la diffraction des rayons X à 293K et 100 K et d'autre part la conformation moléculaire de ce composé à partir des calculs de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

La structure cristalline de ce composé a été résolue à partir des méthodes directes grâce au programme WINGX [1], SIR92 [2], puis les affinements des facteurs de structure ont été menés par affinements des moindres carrés avec le programme CRYSTALS [3].

Notre groupe a montré à partir de la diffraction des rayons X à 293K et 100 K que le bromodurène (BD) cristallise dans le même groupe d'espace que l'iododurène (ID) P2₁2₁2₁ du système orthorhombique avec quatre molécules par maille. L'empilement des molécules se fait parallèlement entre elles suivant le plus court axe cristallographique *a* donc suivant la direction [100].

Parallèlement, nous avons fait des calculs basés sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) pour trouver très précisément les conformations moléculaires probables adaptées par la molécule isolée du bromodurène. Les résultats de calcul à partir des deux fonctionnelles B3LYP [3] et MPW1PW91 [4] et le jeu de base DGDZVP ont conduit à deux conformations de symétrie C_{2v} et C_s avec des énergies de formation minimales voisines.

Expérimentalement la structure du BD est beaucoup plus proche de la conformation de symétrie C_{2v} obtenues à partir de la fonctionnelle MPW1PW91 et la base DGDZVP.

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

Références

1- L.J. Furrugia, J. App. Cryst. 32, 837 (1999).

2- G. Cascarano, A. Altomare, C. Giacovazzo, A. Guagliardi, A. G. G. Moliterni, D. Siliqi, M.C. Burla, G. Polidori et M. Camalli, *Acta Cryst.* A52, C-79 (1996).

3- D. J. Watkin, C.K. Prout, J.R. Carruthers, P. W. Betteridge, *CRYSTALS* Issue11.

Chemical Crystallography Laboratory, Oxford, UK (2003).

4- P. J. Stephens, F. J. Devlin, C. F. Chabalowski, and M. J. Frish. *J. Phys. Chem.*, 98 :11623, (1994).

5- C. Lee, W. Yang, and R. G. Parr. *Phys. Rev. B*, 37: 785, (1988).