

Le travail présenté dans ce mémoire a pour but l'étude structurale et la détermination de la densité électronique du composé C₈H₉NOS (4-Methoxy Benzen Carbothio Amide) dans la phase orthorhombique. La technique expérimentale que nous avons utilisée est la diffraction des rayons X par un monocristal (4-MBCA).

Nous avons pu voir que la résolution structurale et la détermination de la densité électronique à partir de la diffraction des rayons X exige tout d'abord un enregistrement de très bonne qualité du spectre de diffraction du matériau étudié, suivi d'un traitement à l'aide de différents programmes. Ainsi, le formalisme de Blessing a été utilisé pour réduire les intensités mesurées par le diffractomètre. Ensuite, en tenant compte des différentes erreurs expérimentales qui ont pu affecter les mesures, pour finalement donner les meilleurs facteurs de structure lesquels qui ont été utilisés dans l'analyse structurale et la densité de la charge électronique.

La résolution structurale est réalisée par les méthodes directes pour obtenir une structure brute, on connaît de manière approchée la position des atomes constituant l'unité asymétrique. Cette structure est rendu plus précise par l'affinement utilisant la méthode des moindres carrés pour ajuster les paramètres positionnels et déterminer les paramètres thermiques.

Depuis l'avènement des diffractomètres, la diffraction des rayons X est passée du stade de l'analyse structurale à celui de l'analyse de la densité de charge des molécules dans le cristal. La description précise de la densité électronique nécessite la connaissance avec la meilleure précision possible des paramètres de position et de vibration des atomes pour illustrer la répartition des charges électroniques sur les atomes et le long des différentes liaisons de la molécule. Nous avons remarquons que l'introduction les paramètres multipolaires, en utilisant le modèle multipolaire de Hansen et Coppens, dans le calcul de la densité électronique de déformation, a pour effet d'augmentation la hauteur des pics de densité et de centrer les maxima sur les liaisons atomiques.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Nous avons observés que l'analyse de la densité électronique de la molécule C_3H_9NOS exige un enregistrement des données à basse température pour minimiser l'effet de l'agitation thermique. Et, le potentiel électrostatique moléculaire et le moment dipolaire peuvent être obtenus à partir de la densité de charges. Leur détermination permet de localiser les groupements donneurs et accepteurs et aussi la direction du transfert de charges au sein de la molécule, et dans notre molécule, la déformation de le potentiel électrostatique montre que le potentiel électronégatif (attractif) se situé du coté des groupes methoxy, et le potentiel électropositif (répulsif) est du coté des groupes carbothioamide.

Donc la diffraction des rayons X qui était une méthode très lente réservée aux structures les plus délicates, est maintenant devenue une méthode de routine, puissante lorsqu'elle est couplée avec logiciels performants, elle fournit une structure définitive et précise.

En perspective, nous tenterons en futur de faire une comparaison entre des résultats obtenus par les calculs expérimentaux et ceux des calculs théoriques en utilisant des méthodes ab initio et semi empiriques.