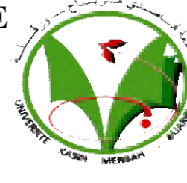




REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE
LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



Université Kasdi Merbah –Ouargla
Faculté des Mathématiques et des Sciences de la Matière
Département de Chimie
Mémoire Présenté pour l'obtention du diplôme de

MASTER

Filière : Chimie

Spécialité : Chimie analytique

-THEME-

**Simulation et évolution du système moléculaire par
modélisation moléculaire**

Présentée par : Bouzidi Fouzia

Soutenue le 20/06/2021

Devant le jury composé de

- *ZENKHERI Louiza* *MCA* *Université kasdi merbah ouargla* *Encadreur*
- *DAKHMOUCH Massaouda* *MCA* *Université kasdi merbah ouargla* *Examineur*
- *Ms DERRADJI HadeF* *MCA* *Université kasdi merbah ouargla* *President*

2020-2021



بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ





الاهداء

اهدي هذه الاطروحة

أهدي ثمرة جهدي هذا الى أعز و أعلى انسانية في حياتي التي انارت دربي
بنصائحها و كانت بحرا صافيا يجري بفيض الحب , و البسمة الى من زينت
حياتي بضياء البدر , و شموع الفرح , الى من منحني القوة و العزيمة
لمواصلة الدرب , و كانت سببا في مواصلة دراستي , الى من علمتني الصبر
و الاجتهاد , الى الغالية على قلبي

أمي

الى من علمني أن الدنيا كفاح سلاحها العلم و المعرفة
الى الذي لم يبخل علي بأي شيء الى من سعي لأجل راحتي و نجاحي
الى أعظم و أعز رجل في الكون

أبي

الى أخي رشيد و أخواتي رقية و نفيسة حفظهم الله
الى كل العائلة الكبيرة الصغير و الكبير
الى صديقاتي منال , نور اليقين , ماريا , بسمة و سهيلة
الى زملاء الدراسة متمنية لهم التوفيق
الى من ساعدني في تقديم هذه الاطروحة و دعمني ماديا و معنويا
الى كل الاشخاص الذين احمل لهم المحبة و التقدير
الى كل من نسيه القلم و حفظه القلب

فوزية



التشكرات

بعد الصلاة و السلام على سيدنا محمد المصطفى الامين

و بعد رحلة بحث و جهد و اجتهاد تكللنا بانجاز هذا البحث , احمد الله عز و جل
حمدا كثيرا الذي اثار دربي في مسيرتي الدراسية و وفقني لاتمام هذه المذكرة
لا يتم شكر الله تعالى الا بشكر عباده الذين كثيرا ما ساعدوني لكي يظهر هذا الشكل ,
اتقدم :

بالشكر الجزيل المليء بالاحترام و التقدير الى الاستاذة المشرفة الدكتورة زنجري
لويزة على ما قدمته لي من معلومات و نصائح و توجيهات طيلة انجاز هذه المذكرة
بخالص شكري للاستاذ المحترم مزوز ميهوب لما قدمه لي من مساعدات في
الصعوبات التي واجهتها في البرامج و كل ما يخص المعلوماتية
اوجه شكري ايضا للاستاذة الفاضلة الدكتورة سمارة و نيسة على استقبالها لي
برحابة صدر و مساعدتها لي و الاجابة عن كل تساؤلاتي
و اخص بالشكر حضرة

الاستاذ الفاضل هادف الدراجي

و الاستاذة الفاضلة دغموش مسعودة

على قبولهم دراسة هذا العمل و بذلهم الجهد و الوقت في التدقيق و اثناء هذا
البحث شكلا و مضمونا

كما يشرفني مناقشتهم مذكرتي

باسمى عبارات الشكر و الامتنان لجميع اساتذة كليتي علوم المادة و قسم
الكيمياء خاصة

اتوجه بالشكر الكبير لكل جنود الخفاء الذين سخرهم الله تعالى لمساعدتي لانجاز
هذه المذكرة -

بشكر والداي العزيزان و جميع عائلتي على تشجيعهم و مساندتهم لي طيلة مشوار
دراستي

رسالة شكر, تقدير, عرفان و امتنان ازفها لكم عبر هذه الدراسة

بوزيدي فوزية

Liste des figures

N°	Figure de	page
1	Diffractomètre STOE IPDS II	27
2	Unité asymétrique de $[\text{Cr}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO})_3]$	28
3	Le réseau cristallin $[\text{Cr}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO})_3]$ avec mercurey	29
4	Le réseau cristallin $[\text{Cr}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO})_3]$ avec diamond	29
5	L'ordinateur portable acer Aspire 3	32
6	Complexe tris (N-methylsalicylaldiminato- $^{-2}_k$ N , O) chrome(III) expérimentale	33
7	Surface de travail et le logo de logiciel ChemSketch	34
8	Surface de travail et le logo de logiciel Mercurey	37
9	Le logo d'Avogadro	38
0	Surface de travail de logiciel Avogadro	38
1	Surface de travail et le logo de logiciel Diamond	40
2	Surface de travail et le logo de logiciel Notepad++	41
3	La molécule (N-methylsalicylaldimine) avons l'optimisation géométrique avec ChemSketch	45
4	La molécule (N-methylsalicylaldimine) après l'optimisation géométrique avec ChemSketch	45
5	La molécule (N-methylsalicylaldimine) avons l'optimisation géométrique avec Avogadro	45
6	La molécule (N-methylsalicylaldimine) après l'optimisation géométrique avec Avogadro	45
7	Propriétés d'énergie de ligand (N-methylsalicylaldimine) avec Avogadro	46
8	La molécule (N-methylsalicylaldimine) après l'optimisation géométrique avec Avogadro	47
9	Le complexe conçu avons l'optimisation géométrique (clean structure)avec logiciel ChemSketch	51
0	Le complexe conçu après l'optimisation géométrique logiciel ChemSketch	51
1	Le complexe avons l'optimisation géométrique avec Avogadro	52
2	Le complexe après l'optimisation géométrique avec Avogadro	52
3	Résultats de l'optimisation énergétique	53
4	Les propretés moléculaires après l'optimisation géométrique du composé du titre	54
5	Les déférents styles de complexe conçu	55
6	Influence sur le diffractogramme	57

Liste des tableaux

N°	Tableau de	Page
01	Les produits chimiques usagés	25
02	Propriétés des atomes dans le ligand (N-methylsalicylaldimine) avec Avogadro	48
03	Propriétés des liaisons dans le ligand (N-methylsalicylaldimine) avec Avogadro	49
04	Propriétés des angles (N-methylsalicylaldimine) avec avogadro	50
05	Propriétés des liaisons chimiques dans le polyédre de coordination	56
06	Propriétés moléculaire de composé calculé et expérimental	58
07	Intervalle de longueur des liaisons avons et après la coordination du ligand	58
08	Pourcentage de la composition quantitative du complexe et du ligand	59

Sommaire

Dédécaces.....	I
Remerciements	II
Liste des figures	III
Liste des tableaux	IV
I. Introduction générale	1
Références biographiques.....	5

Chapitre I : Notions fondamentales et contexte d'étude

I.1. Modélisation moléculaire	7
I.1.1 méthode quantique	7
a- la méthode de Huckel	8
b- les méthodes des champs auto-cohérent (,SCF)	8
1. les méthodes ab-initient.....	8
2. les méthodes semi-empiriques.....	8
c- les méthodes basées sur la (DTF)	8
I.1.2 la mécanique moléculaire.....	8
I.1.3 la dynamique moléculaire.....	9
I.2 Les complexes de coordination	9
I.2.1 définition du complexe de coordination	9
I.2.2 les ligands	9
a- les différents types de ligands	9
I.2.3 structure géométrique des complexes	10
I.2.4 l'utilisation des complexes	11
I.3 Le contexte de l'étude	11
Références biographiques	

Chapitre II : Synthèse bibliographique

II.1 Tris (N-methyl methylsalicylaldiminato-² N,O) chrome(III)

Introduction

II.1.2 produit de synthèse du[Cr (C ₈ H ₈ NO) ₃].....	15
II.1.3 Méthode de synthèse	16
II.1.4 Méthode de caractérisation physicochimique	16
II.1.5 Appareil de mesure.....	16
II.1.6 Résolution de structure cristalline	17
a. Logiciel X-AREA (stoe ,2008).....	17
b-Logiciel SHELX.....	17
c-Logiciel SHELXTL.....	17
d-Logiciel SheLXL 2014.....	17

e-Logiciel SHELXS-97.....	28
f- logiciel Diamond	28
II.1.7 Description de la structure cristalline de [Cr(C₈H₈NO)₃].....	28
II.2 L'unité asymétrique	28
II.3 Le réseau cristallin	28
Conclusion de chapitre	29
Référence biographiques	

Chapitre III : Matériels et méthodes

III.1 Ordinateur portable.....	32
III.2 Molécule tris (N-methylsalicylaldiminato-_k² N,O) chrome(III).....	32
III.3 Fichier (CIF) de molécule et du complexe avec ChemSketch	32
III.4 Les logiciels	33
III.4.1 Logiciel ChemSketch	33
a. Methode de conception du ligand N-methylsalicylaldimine.....	34
b. Conception du tris (N-methylsalicylaldiminato- _k ² N,O) chrome(III	35
c. L'optimisation géométrique du la ligand et le complexe.....	
III.4.2 Logiciel mercurey	36
III.4.3 Logiciel avogadro	37
a. Methode de conception du ligand N-methylsalicylaldimin.....	38
b. conception du tris (N-methylsalicylaldiminato-_k² N,O) chrome(III).....	39
c. L'optimisation géométrique du ligand et du complexe	39
III.4.4 Logiciel diamond	40
III.4.5 Logiciel Notepad++	40
Références biographiques.	

Chapitre IV : résultats et discussions

Modélisation moléculaire	45
IV.1 Modelisation du ligand N-methylsalicylaldimine.....	45
IV.1.1 Conception de ligand N-methylsalicylaldimine avec ChemSketch...	45
IV.1.2 Optimization géométrique de ligand avec ChemSketch.....	45
IV.1.3 Conception de ligand N-methylsalicylaldimine avec Avogadro.....	45
IV.1.4 Optimization géométrique de ligand avec Avogadro	46
IV.1.5 Résultats de l'Optimization géométrique de ligand	47
a. propriété physique de ligand avec ChemSketch.....	47
b. Propriétés énergétique du ligand N-methylsalicylaldimine par Avogadro... 	47
c. Propriétés moléculaire du ligand N-methylsalicylaldimine par Avogadro	48
d. Propriétés des atomes dans le ligand N-methylsalicylaldimine.....	48
e. Propriétés des liaisons dans le ligand N-methylsalicylaldimine.....	49
f. Propriétés des angles dans le ligand N-methylsalicylaldimine.....	50
IV.1.4 Interprétation des résultats obtenue pour N-methylsalicylaldimine ...	51

IV.2 Modélisation du tris(N-methylsalicylaldiminato-κ^2 N, O) chrome....	52
IV.2.1 Conception du complexe avec ChemSketch	52
IV.2.2 Optimisation géométrique du complexe avec ChemSketch.....	53
IV.2.3 Conception du complexe avec Avogadro.....	53
IV.2.4 Optimization géométrique du complexe avec Avogadro.....	53
IV.2.5 Résultats de l'Optimisation géométrique du complexe.....	54
a. . propriété physique de complexe par ChemSketch.....	54
b. Propriétés énergétique du complexe avec Avogadro.....	54
c. . Propriétés moléculaire du complexe avec Avogadro.....	55
d. Présentation de différents formes du complexe par ChemSketch.....	55
e. Propriétés des atomes dans le complexe avec Avogadro.....	56
f. Propriétés des liaisons dans le complexe avec Avogadro.....	57
g. propriétés des liaisons dans le polyèdre de coordination	57
h. Influence sur le diffractogramme	58
i. Propriétés des liaisons chimique dans le ligand après coordination... 	58
j. Propriétés des angles dans le complexe avec Avogadro	58
IV.1.4 Interprétation des résultants obtenue pour le complexe	58
a. Comparaison des propriétés moléculaire de composé expérimentales et calculé.....	58
b. Evolution de système (N-methylsalicylaldimine) avons et après la coordination... 	59
c. Evolution des pourcentages de la composition quantitative	59
Conclusion.....	60
Conclusion générale	
Références biographiques	
ANNEXE	



Introduction

Introduction

La modélisation moléculaire a pris une grande avance ces dernières années, en raison du nouveau développement d'un groupe de programmes informatiques, ces programmes sont devenus très efficaces. Molécules, ions et/ou particules, à commencer par les systèmes chimiques, les petites à grandes molécules biologiques et les agrégats de matériaux [1]. Il est considéré comme l'un des outils (informatiques) contemporains les plus abordables pour concevoir de nouvelles molécules et entités chimiques et ces propriétés basées sur ces structures tridimensionnelles, avec un accès accru aux ressources informatiques et avec le développement d'une modélisation moléculaire plus conviviale [2]. Des études purement théoriques ou en complément de travaux expérimentaux plus courants ou de molécules de simulation prouvent ensuite expérimentalement leur existence à l'aide de divers programmes de modélisation afin de trouver les structures les plus stables avec une étude comparant les propriétés de la molécule théorique et expérimentale.

C'est ce que nous allons faire dans cette recherche en l'appliquant au complexe de coordination hybride comme nous le verrons au chapitre trois Domaines de la chimie, mais s'étendant à la physique, la métallurgie et la biochimie inorganique. De plus, les mécanismes réactionnels peuvent être améliorés grâce aux techniques modernes de spectroscopie et de cinétique. De nombreux complexes utilisés comme précurseurs conduisent, après pyrolyse dans des atmosphères gazeuses adaptées, à des phases solides finement divisées (oxydes, sulfures, nitrures, carbures, etc.)[3]

A l'heure actuelle, l'étude des complexes hybrides constitués de fissures minérales et organiques est devenue très importante, que ce soit de la manière théorique incarnée par la modélisation moléculaire ou de la manière pratique incarnée par les travaux de laboratoire du fait qu'elle a balayé plusieurs domaines tels que la métallurgie, la médecine, la chimie analytique, la photographie et le domaine industriel. Par exemple, l'importance industrielle des complexes réside avant tout dans la catalyse homogène, où l'utilisation de catalyseurs

organométalliques (composés avec liaisons carbone-métal), de sels ou de complexes solubles de métaux de transition offrent des avantages en termes d'efficacité, une plus grande sélectivité et des conditions de réaction plus douces qu'en catalyse hétérogène. De plus, les mécanismes réactionnels peuvent être analysés (et donc améliorés) à l'aide de techniques spectroscopiques et cinétiques modernes. Plus d'une vingtaine de procédés industriels utilisent des complexes métalliques solubles comme catalyseurs dans des réactions d'hydrogénation et d'oxydation d'hydrocarbures, de polymérisation d'oléfinés et de synthèse d'acides, d'aldéhydes et d'alcools (voir catalyse homogène) [3].

Face aux obstacles rencontrés par les chercheurs dans l'application des expériences de laboratoire et la prédiction des phénomènes scientifiques, l'efficacité de la modélisation moléculaire la désigne comme la première pionnière dans le domaine des études théoriques et de la simulation et pour réaliser ce que l'expérience n'a pas réussi à réaliser. Grâce au développement et à l'innovation des programmes informatiques. Les scientifiques sont capables de prédire les conditions d'application de l'expérience dans la réalité, et cet outil exceptionnel et économique permettra également la conception de nouveaux médicaments plus efficaces contre les maladies. Des maladies graves telles que le cancer, le sida, l'arthrite, voire le virus Corona font leur apparition [4].

A partir de là, on peut dire que la modélisation moléculaire a permis à l'étude théorique d'aller en parallèle avec l'étude expérimentale.

Les coûts de calcul des simulations sont souvent un compromis entre précision et efficacité.

Dans ce cadre, l'objet d'un mémoire de fin d'études pour l'obtention d'un master s'inscrit dans le cadre de la préparation d'une modélisation de la molécule tris (N-méthylsalicylaldiminato- κ^2 N,O) chrome (III) et d'une comparaison entre les études expérimentales de celui-ci aux derniers programmes tels que ChemSketch, Avogadro, Diamond, Hyperchem, Mercury

Pour ce faire, nous avons divisé notre recherche en cinq chapitres. Il commence par une introduction générale : dans laquelle nous avons donné un aperçu des

complexes de coordination et de la modélisation moléculaire, et expliqué le but de notre travail.

- Chapitre Un : Nous parlerons des bases et du contexte de l'étude.
- Chapitre Deux : La préparation bibliographique débute par une introduction, puis présente l'appareillage, les matériaux et la méthode de préparation du composé étudié et les programmes utilisés, en plus d'expliquer la méthode de caractérisation physico-chimique et l'unité asymétrique. Nous présenterons également le réseau cristallin du composé à l'aide du programme Marcuri tel que présenté dans l'article Crystal structure of tris (N-methylsalicylaldiminato-k² N, O) chrome (III) de Jessica Hilbert, Sven Kabus, Christian N  ther et Wolfgang Bensch Nous terminons le chapitre par une conclusion.
- Chapitre trois : Appareils et m  thodes Nous l'ouvrons par une introduction au chapitre expliquant le contenu, puis nous presenterons le contenu du chapitre repr  sent   en pr  sentant le type d'appareil utilis   pour r  aliser ce travail, puis les d  finitions des programmes utilis  s et les v  hicules sur lesquels l'  tude sera r  alis  e, en plus de pr  senter le fichier de donn  es du v  hicule.
- Chapitre quatre : Mod  lisation mol  culaire Dans ce chapitre, nous presenterons la conception de la liaison et du compos   en utilisant    la fois le programme ChemSketch et Avogadro et les presenterons avant et apr  s le processus d'optimisation technique, puis en comparant les propri  t  s de la liaison avant et apr  s la liaison et afficher les propri  t  s du compos     tudi   (calcul  es) et les comparer avec les propri  t  s du compos      tester
- Chapitre cinq : Analyser et discuter des r  sultats obtenus gr  ce au travail
- Conclusion g  n  rale : r  sumer le travail

Objectif et problématique du mémoire:

L'objectif de ce mémorandum est de représenter un modèle hypothétique d'une molécule préparée en laboratoire et diagnostiquée de telle sorte que sa formule globale soit $[\text{Cr}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO})_3]$ et porte le nom de tris(N-méthylsalicylaldiminato-k² N,O) chrome(III). Le processus de modélisation est suivi par la comparaison de ses propriétés calculées avec les propriétés expérimentales mentionnées dans l'article intitulé :Structure cristalline du tris(N-méthylsalicylaldiminato-k² N,O)chrome(III) Pour les auteurs : Jessica Hilbert,* Sven Kabus, Christian Naether et Wolfgang Bensch .

Ce procédé permet de simuler la structure cristalline de ce composé, de prédire son efficacité, et de déduire l'évolution instantanée de son système moléculaire grâce à la mécanique moléculaire, afin d'identifier lequel des deux complexes est le plus stable, expérimental ou théorique, c'est-à-dire, effectuer une modélisation moléculaire sur le complexe susmentionné. Cette étude est réalisée sous le terme de modélisation moléculaire, avec différentes techniques de visualisation permettant la représentation de la structure 2D ou 3D de la molécule à l'écran, sa manipulation (rotation, translation, changement de forme, superposition, etc.), sa manipulation, son analyse et identification des structures moléculaires. de manière interactive (au moins dans des terminaux graphiques suffisamment puissants) et d'analyse (calculs de paramètres géométriques tels que distances, angles, surfaces accessibles, etc.).

Comment se passe la conception de la molécule et quels sont les programmes utilisés pour cela ?

Comment décrire l'évolution du système moléculaire ?

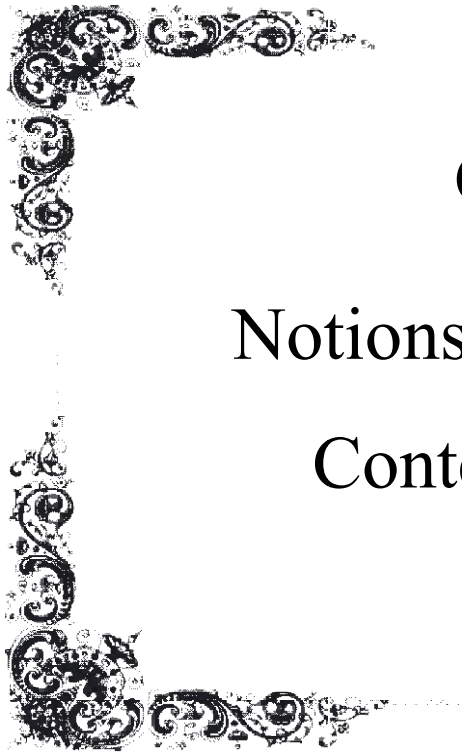
Les references

[1] Modeling-latest research and news/Nature. Journal nature portfolio nature.com/subjects/molecular-modeling

[2] Molecular modeling –an overview/ScienceDirects
<https://www.sciencedirect.com/topics/chemistry/molecular-modeling>

[3] Complexes, chimie, principaux domaines d'application Universalis.fr
<https://www.universalis.fr/encyclopedie/complexes-chimie/3-principaux-domaines-dapplication/>

[4] what is Molecular modeling? - World of molecules. World of molecules.com/txtbk2.htm



Chapitre I

Notions fondamentales et Contexte de l'étude

Dans ce premier chapitre, nous allons présenter quelque notion fondamentale générale sur les complexes de coordination et la modélisation moléculaire ainsi que le contexte de l'étude.

I.1 Modélisation moléculaire :

La recherche et la synthèse de nouveaux composés chimiques sont aujourd'hui souvent associées à une étude par modélisation moléculaire. La modélisation moléculaire est une technique permettant, non seulement de représenter les propriétés et les réactions chimiques mais aussi de manipuler les modèles des structures en deux ou trois dimensions.[1]

La modélisation moléculaire implique l'utilisation des méthodes de calcul théoriques permettant de déterminer la représentation graphique de la géométrie ou de la configuration des atomes d'une molécule et d'évaluer les propriétés physico-chimiques de la molécule étudiée.[4]

La modélisation moléculaire associée à une représentation infographique des stéréochimies permet d'interpréter des phénomènes physico-chimiques, de suggérer des nouvelles expériences et d'analyser ainsi des résultats d'une façon plus critique que les expériences classiquement utilisées, mais ces deux approches purement théoriques ou expérimentales sont complémentaires.[4]

Le comportement des molécules peut être simulé de façon statique ou dynamique. Cette simulation inclut notamment le comportement et la flexibilité des molécules en solution, les mécanismes réactionnels et interactions mises en jeu dans la catalyse enzymatique, la reconnaissance ou la complexation, la prédiction de propriétés et de fonctionnalités à partir d'analogies de structure [4].

I.1.1 Méthodes quantiques :

La mécanique quantique est le prolongement de la théorie des quanta, issue des travaux de Planck, de leur interprétation par Einstein et de leur application à la théorie atomique par Bohr et Sommerfeld. Elle explique la quantification de certaines grandeurs (énergie, moment cinétique) et fait émerger le principe d'exclusion de Pauli. La nouvelle conception des particules qui découle de la dualité onde-corpuscule, explicitée dans les travaux de De Broglie (1923) conduit à la mécanique ondulatoire.[3]

Les méthodes de la mécanique quantique, qui font appel à la distribution des électrons répartis en orbitales autour de la molécule, impliquent des temps de calcul souvent élevés qui limitent leur usage à des petites molécules ou nécessitent le recours à de nombreuses approximations. Elles sont particulièrement adaptées au calcul des charges et des potentiels électrostatiques, à l'approche des mécanismes réactionnels ou à la polarisabilité. L'objectif de la mécanique quantique est principalement de déterminer l'énergie et la distribution électronique. [3]

La modélisation moléculaire a pour but de prévoir la structure et la réactivité des molécules ou des systèmes de molécules. Les méthodes de la modélisation moléculaire comprennent : les méthodes quantiques, la mécanique moléculaire et la dynamique moléculaire. Les méthodes quantiques Ces méthodes sont basées sur le calcul des orbitales moléculaires (OM). Leur complexité augmente rapidement avec le nombre d'électrons. Les principales variantes sont : [2]

a. La méthode de Hückel :

C'est la plus simple de toutes. Elle ne prend en compte que les électrons π et utilise des approximations assez draconiennes. Malgré cela, elle permet d'interpréter une grande part de la réactivité chimique.

b. Les méthodes de champ auto-cohérent (Self Consistent Field, SCF) : Ces méthodes prennent en compte les électrons σ et reposent sur des calculs plus élaborés que la méthode de Hückel. On distingue deux variantes, suivant la manière dont les termes d'énergie électroniques sont calculés :

- **1. Les méthodes ab initio :** Tous les termes énergétiques sont calculés, les temps de calcul étant alors très longs.
- **2. Les méthodes semi-empiriques :** Les termes énergétiques les plus difficiles à calculer sont estimés à partir de données expérimentales. Les temps de calcul sont considérablement raccourcis, mais la méthode est tributaire des composés qui ont servi à l'étalonner. Selon la nature des approximations utilisées, on distingue plusieurs variantes (MNDO, AM1,...). La plus récente est PM6 (logiciel MOPAC).

c. Les méthodes basées sur la fonctionnelle de la densité (Density Functional Theory, DFT) :

Ces méthodes utilisent une expression de l'énergie électronique E en fonction de la densité électronique ρ , elle-même fonction de la position r de l'électron :

$$E = G[\rho(\vec{r})]$$

L'énergie est donc une fonction de fonction, c'est-à-dire une fonctionnelle, de ρ

I.1.2 La mécanique moléculaire :

Cette technique calcule l'énergie des atomes (et non plus des électrons) au moyen d'approximations semi-classiques. La simplification considérable des calculs qui en résulte permet de travailler sur des molécules de grande taille, telles que les macromolécules biologiques (protéines, acides nucléiques), ou sur des systèmes comportant un grand nombre de molécules. [2]

I.1.3 La dynamique moléculaire :

Cette technique a pour but de calculer les mouvements des molécules, le plus souvent à partir des énergies de la mécanique moléculaire, en appliquant les lois de la mécanique classique. Elle permet de simuler l'évolution des systèmes dans le temps.[2]

I.2 Les complexes de coordination

I.2.1 Définition de complexe de coordination :

Un composé de coordination (ou un complexe) est un édifice moléculaire formé d'un centre métallique entouré de groupes donneurs d'électrons appelés ligands. Suivant la nature et la charge de chacun des composants du complexe, celui-ci peut être neutre, chargé positivement ou négativement. Le plus souvent, le métal est chargé positivement (oxydé). Les ligands qui peuvent être soit des ions, des atomes ou des molécules sont soit neutres, soit chargés négativement (ou positivement). On distingue trois zones autour de cet ion (l'exemple est donné pour un cation):[6]

- **La sphère de coordination interne** (ou 1^{ère} sphère de coordination) : les molécules de solvant et, parfois, des anions, sont directement fixés sur le cation. Cette zone peut être souvent bien caractérisée (nombre et position des ligands).

- **La sphère de coordination externe** (ou 2^e sphère de coordination) : les molécules de solvant et les anions sont orientés par le champ électrique du cation, mais ne sont pas directement fixés sur lui. Ils peuvent cependant y être reliés par des ponts hydrogène. Cette zone est difficile à analyser.

- Le solvant, non influencé par le cation.

Des échanges se déroulent continuellement entre le solvant et les sphères de coordination, si bien qu'il faut considérer l'édifice complexe comme étant une structure moyenne. Lorsqu'un cation se déplace au sein d'une solution, il emporte avec lui ses deux sphères de coordination.[6]

I.2.2 Les ligands :

Les ligands sont de différents types ; parmi les plus courants on trouve des molécules comme l'eau H₂O ou l'ammoniac NH₃ ou des anions comme les chlorures Cl⁻, les cyanures CN⁻, les hydroxydes OH⁻ et bien d'autres.[6]

a. Les différents types de ligands :

Les ligands sont classés selon leur structure, et le nombre d'atomes donneurs (leur nombre d'atomes formant des liaisons avec le métal).

- Ligands monodenté : H₂O, OH⁻, NH₃, CH₃OH, Cl⁻, NCS⁻, CN⁻, CO, ...
- Ligands bidentés .

- Ligands polydentés
- Ligands macrocycliques

Les ligands liés à deux ions métalliques sont appelés **pontants**.

I.2.3 Structure géométrique des complexes :

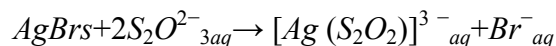
Elle dépend du nombre de doublets qui vont entourer l'ion métallique. Ce dernier se trouve au centre d'une figure géométrique dépendant de ce nombre. Ainsi le complexe sera linéaire s'il comprend deux ligands, il sera triangulaire pour trois doublets, tétraédrique ou carré pour quatre, octaédrique pour six.[6]

I.2.4 L'utilisation des complexes :

- **En métallurgie** : précipitation d'une espèce et maintien de l'autre en solution. Exemple de la séparation Fer/Aluminium dans le traitement des bauxites :

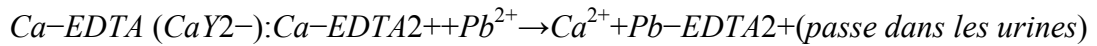


- **En photographie** : La couche sensible contient des halogénures d'argent (AgBr, AgCl),
 - l'image latente résultant de l'exposition est révélée par un réducteur (hydroquinone) : $Ag^{++} e^- \rightarrow Ag$ (noircissement)
 - l'excès d'halogénures d'argent (non exposés et non révélés) est éliminé par complexations (complexe soluble) c'est la fixation :



- **Récupération des métaux nobles** :
En présence d'air ($E_0(O_2/H_2O) = 1.23V \Rightarrow E'_0 = 0.81$ à $pH=8$), les métaux nobles Ag, Au, sont oxydés et complexés par les ions cyanures : Ag
- **Pigments de coloration** : Le ferrocyanure ferrique de potassium ($KFeIII[FeII(CN)_6]$, bleu de Prusse) est utilisé comme pigment.
- **Bains de galvanoplastie** : les métaux à déposer de manière électrochimique sont d'abord maintenus en solution concentrée sous forme de complexes : $Au(CN)^{-2}$, $Ni(CN)^{-4}$
- **Chimie anti-tumorale (cancer)** : Utilisation du complexe *Cis*- $[PtII(NH_3)_2Cl_2]$ (le *Trans* est inactif). Son activité est liée à un échange possible des ligands Cl^- (labiles) avec des atomes d'azote de l'ADN responsable de la reproduction cellulaire.

- **Traitement de l'empoisonnement par l'ingestion de plomb** - saturnisme - (peintures, eau) : peut-être traité par utilisation du complexe

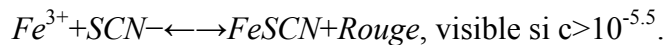


- **Les composés naturels :**

- L'hème combiné à la globine et l'eau forme un complexe octaédrique du fer (hémoglobine) qui est un constituant essentiel du sang. (échanges O_2/CO_2) : $hemoglobine-H_2O + O_2 \rightarrow hemoglobine-O_2 + H_2O$.
L'eau et l'oxygène peuvent être remplacés par CN^- et CO formant des complexes plus stables (rapidement mortels).
- La chlorophylle est un complexe du magnésium.

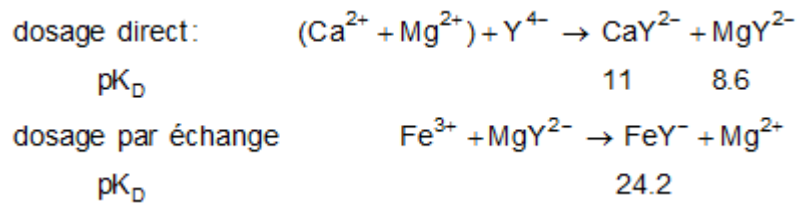
- **Chimie analytique :**

- formation de complexe coloré (on suit la variation de densité optique à la longueur d'onde d'absorption)



- masquage de cation : $Fe^{3+} + 6CN^- \rightleftharpoons Fe(CN)_6^{3-}$ *ion ferricyanure* $pK_D = 31$,
 Fe^{3+} est masqué vis à vis des ions thiocyanates ($pK_D = 3.1$)

- réaction de complexation : utilisation d'agents chélatants (EDTA) pour doser les cations en solution :



Dans chaque cas, il faut trouver un indicateur coloré pour voir la fin de réaction.[5]

I. Le contexte de l'étude

Dans notre travail nous allons réaliser la modélisation moléculaire du complexe tris(N-methylsalicylaldiminato- κ^2 N,O) du chromium (III), formé à partir de N-methylsalicylaldimine et le chrome en utilisant des logiciel de calcul performant destinées à la réalisation de modèle moléculaire et au calcul des propriétés moléculaire, atomique et angulaire.

L'obtention d'un tel modèle géométriquement optimiser, nous permettra par la suite d'en déduire le modèle le plus stable et de réaliser une étude comparative entre les deux modèles, expérimentale et théorique.

Les références :

[1] : ETUDE PAR MODELISAMOLECULAIRE, la modélisation moléculaire.
<https://www.tdx.cat/bitstream/handle/10803/3114/pb02de10.pdf?sequence=2&isAllowed=y>

[2] : Modélisation moléculaire. https://www.unilim.fr/pages_perso/jean.debord/model/model.pdf

[3] Cette thèse est fondée principalement sur le concept de polymère ;cependant, d'autres concepts sont aussi utilisés, chapitre III, les calculs théorique de la modélisation moléculaire,
<http://dspace.univ-tlemcen.dz/bitstream/112/1084/8/chapitre3.pdf>

[5]: les complexes, chimie de coordination, Université du Mains-faculté des sciences,
<http://ressources.univ-lemans.fr/AccesLibre/UM/Pedago/chimie/01/05-Chimie-en-solution/res/complexes.pdf>

[04] : chapitre 2 : méthode de la modélisation moléculaire , dspace.univ-tlemcen.dz

<http://dspace.univ-tlemcen.dz/bitstream/112/987/5/chapitre2-Mostffaoui-Larbi.pdf>

[6] : chimie inorganique- chimie de coordination ,chimie-science.univ-amu.fr

https://chimie-sciences.univ-amu.fr/sites/chimie-sciences.univ-amu.fr/files/resume_inorga_15-16_complet.pdf

A decorative border with intricate floral and scrollwork patterns, framing the central text. The border is composed of four corner pieces and four side pieces, each featuring detailed designs of leaves, flowers, and scrolls.

Chapitre II

Synthèse bibliographique

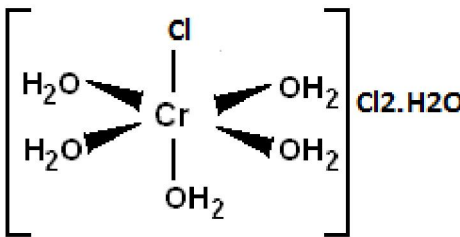
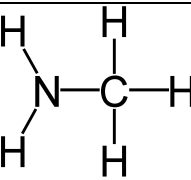
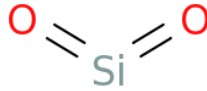
II.1 Tris(N-methylsalicylaldiminato- κ^2 N,O) chrome (III),

Dans ce chapitre, nous présentons une description complète de la molécule $[\text{Cr}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO})_3]$, telle que décrite dans l'article intitulé **crystal structure of tris (N-methylsalicylaldiminato- κ^2 N,O) chromium (III)** de Jessica.H, et al **2015**. Nous expliquons les synthèses et la méthode de caractérisation du composé du titre.

II.1.2 Produit de synthèse du complexe $[\text{Cr}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO})_3]$:

Dans l'élaboration du matériau **tris(N-methylsalicylaldiminato- κ^2 N,O) chromium (III)**, les auteurs (**Jessica Hilbert, Sven Kabus, Christian Nather et Wolfgang Bensch**) ont utilisé les produits chimiques présentés dans le tableau II-.. à une température de 25°C : [1]

Tableau 1 : les produits chimiques usagés

Produits	Formule chimique	Formule développée	Fournisseur
(Chromium trichloride hexahedrate)	$\text{CrCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$		Merck
(Stannum)	Sn		Fluka
(Sulfere)	S		Alfa Aesar
N,N-ethylenbis (salicylimine)	$\text{C}_9\text{H}_{11}\text{NO}$		Alfa Aesar
methyl amine	CH_5N		Abr
Silica gel	SiO_2		

Ethanol	C₂H₆O	$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array} $	
----------------	------------------------------------	---	--

II.1.3 Méthode de synthèse :

Le composé a été obtenu par hasard par le procédé de chimie douce et à des conditions solvothermal. Le détail de la synthèse est présenté ci-dessous.

Chacun de 66,6 mg (0,25 mmol) CrCl₃ 6H₂O, 29,7 mg (0,25 mmol) Sn 24,1 mg (0,75 mmol) de S et 134,2 mg (0,5 mol) de N, N-éthylène-pès (saliclimin) sont mélangés dans un tube en verre (intérieur volume 11 ml) avec 1,5 ml de méthylamine (solution aqueuse précoce à 40%) et 0,5 ml d'eau; la température de réaction est abaissée à 398 K pendant 1 jour. Après refroidissement à température ambiante, le produit cristallin (rouge foncé) ils ont filtré, lavé avec de l'eau et de l'éthanol et séché sur du gel de silice.[1]

II.1.4 Méthode de caractérisation physicochimique :

La caractérisation physicochimique de tris(N-methylsalicylaldiminato-κ² N,O) chromium (III) a été réalisé par la méthode de diffraction des rayons X par le monocristal.

II.1.5 Appareil de mesure :

La collecte a été enregistrée en utilisant un diffractomètre type **STOE IPDS II figure II-..** Diffractomètre de pointe avec technologie de plaque d'imagerie extrêmement sensible, conçue pour répondre à tous les besoins scientifiques : par ex, petites molécules, protéines, mesures de densité électronique.[02]

- Fonctionnalités de l'appareil:

- Un seul instrument pour les petites molécules et les protéines.
- Plage dynamique très élevée (16 bits).
- Arrière-plan extrêmement bas (pas de courant d'obscurité).
- Parfait pour les diffuseurs faibles.
- Intensités faibles de réflexions très faibles et très fortes dans le même cadre.
- Long durée de vie, faibles entretien, faibles couts de possession.



Figure 1 : Diffractometre STOE IPDS II

II.1.6 Résolution de structure cristalline

La résolution de la structure cristalline de tris(N-methylsalicylaldiminato- κ^2 N,O) chromium (III) est réalisé à l'aide des programme de resolution des structure cristalline suivants :

a. X-AREA (stoe, 2008) :

Le nouveau logiciel 32 bits **X-AREA** à été conçu pour fonctionner sur tous les systèmes et détection de plaques d'imagerie. STOE , L'IPDS II L'IPDS 2T et le nouveau STADIVARI équipé du détecteur DECTRIS PILATUS Il comprend les outils logiciels bien connus.[5]

b. SHELX :

Un compte rendu est donné du développement du système **SHELX** de programmes informatique de **SHELX-76**. [4]

c. SHELXL 2014 :

Les développements récents **SHELXL** facilitaient le raffinement par rapport aux données de diffraction neutronique, le traitement des atomes H, la détermination de la structure absolue, l'entrée de facteurs de structure partielle. [3]

d. SHELXTL :

Est un système intégré pour la détermination des structures cristallines à partir des données de diffraction les programmes ont été hautement optimisés pour minimiser les temps de calculs sont valables pour tous les groupes d'espace dans des paramètres conventionnels ou non. SHELXTL

est basé sur le système de programme de domaine public SHELX-97 largement utilisé, il contient un très grand nombre d'améliorations et de facilités supplémentaires.[4]

e. SHELXS-97 :

Programme de solution et de raffinement de la structure cristalline.[7]

f. DIAMOND :

Un logiciel moderne pour la visualisation des structures cristallines au niveau atomique. La nouvelle version 3 a été conçue pour rendre la première étape aussi simple que possible. [6]

II.1.7 Description de la structure cristalline de $[\text{Cr}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO})_3]$

La structure cristalline du composé $[\text{Cr}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO})_3]$, est analogue avec un même composé avec comme atome centrale le vanadium (III).

II.2 L'unité asymétrique

L'unité asymétrique se compose d'un cation Cr^{3+} et de trois anions N-méthylsalicylaldiminate (**Figure 2**). Le cation métallique est octaédriquement coordonné par trois ligands N-méthylsalicylaldiminate bidenté chélatants en N et O (**Figure 2**).

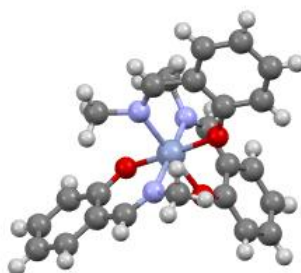


Figure 2 : Unité asymétrique de $[\text{Cr}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO})_3]$ visualisé avec Mercury

II.3 Le réseau cristallin

Dans le réseau cristallin, les unités voisines sont liées via des interactions de liaison hydrogène du type C –H...O suivant des chaînes se propageant parallèlement à l'axe c. (**Figure 3**).

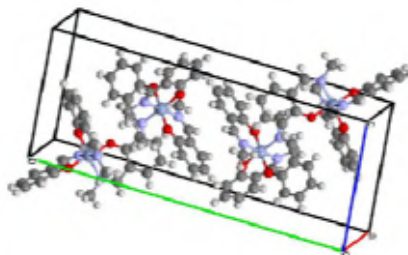


Figure 3 : le réseau cristallin de $[Cr(C_8H_8NO)_3]$

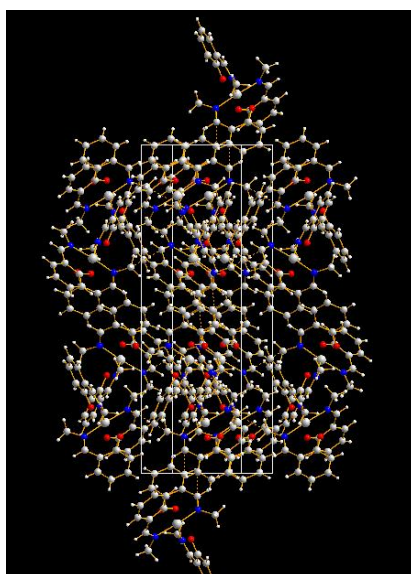


Figure 4: le réseau cristallin de $[Cr(C_8H_8NO)_3]$

Conclusion :

Dans cet article les auteurs ont préparé et caractérisé et décrit la structure cristalline du complexe de coordination **tris(N-methylsalicylidimino- κ^2 N,O) chrome (III)**, de formule générale $[Cr(C_8H_8NO)_3]$. Dans la suite de notre recherche nous allons réaliser une étude théorique sur ce complexe avec différents outils de modélisation y compris l'évolution de ce système moléculaire.

Les références :

[1] :] **Jessica Hilbert, Sven Kabus, Christian Nather et Wolfgang Bensch,**
Crystal structure of tris(N-methylsalicylaldiminato [κ]2N,O)chromium(III)
crystallographic communications acta cryst (2015)

[2]: stoe ipds ii-stoe & cie gmbh state of the art diffractometer with extremely sensitive and reliable imaging plate technology <https://www.stoe.com/product/stoe-ipds-ii/>

[3] : **George M. sheldrick^{a*}** **Crystal structure refinement with *SHELXL***
Acta Crystallographica Section C STRUCTURAL CHEMISTRY

^aDepartment of Structural Chemistry, Georg-August Universität Göttingen,
 Tammannstraße 4, Göttingen 37077, Germany

*Correspondence e-mail: gsheldr@shelx.uni-ac.gwdg.de

<https://journals.iucr.org/c/issues/2015/01/00/fa3356/index.html>

[4]: BRUKER AXS **269-015901 SHELXTL Software Reference Manual. Book**
PART NUMBER269-015901

<https://xray.uky.edu/Resources/manuals/Shelxtl-manual.pdf>

[5] :Software X-AREA **STOE'S AREA DETECTOR SOFTWARE**
<https://www.stoe.com/product/software-x-area/>

[6] : : user manual- crystal impact tutorial.pdf crystalimpact.com

<https://www.crystalimpact.com/download/diamond/tutorial.pdf>

[7] : G. M. Sheldrick, “SHELXS-97 and SHELXL-97, Program for Crystal Structure Solution and Refinement,” University of Gottingen, Gottingen, 1997
[https://www.scirp.org/\(S\(351jmbntvnsjt1aadkposzje\)\)/reference/ReferencesPapers.aspx?ReferenceID=768629](https://www.scirp.org/(S(351jmbntvnsjt1aadkposzje))/reference/ReferencesPapers.aspx?ReferenceID=768629)



Chapitre III

Matériels et méthodes

Dans ce chapitre, nous présenterons le logiciel et le dispositif utilisé pour concevoir et modéliser la molécule de **tris(N-méthylsalicylaldiminato- κ^2 N,O) chrome (III)** avec une brève explication.

III.1 Ordinateur portable :

Pour réaliser la modélisation moléculaire nous avons utilisé un ordinateur portable **Aspire A315-22** avec les caractéristiques suivantes :

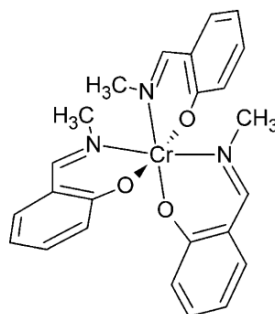
- Nom d'appareil : LAPTOP-JN5MNKQ
- Mémoire RAM installée : 4.00 Go
- Type de système : système d'exploitation 64 bits, processeur $\times 64$
- Disque dur : 500 Go
- Fabricant : Acer
- Edition : WINDOWS 10 famille langue unique
- Version : 1909



Figure 5 : ordinateur portable acer aspire3

III.2 Molécule tris(N-méthylsalicylaldiminato- κ^2 N,O) chrome (III),

Dans ce travail nous avons utilisé la molécule tris(N-méthylsalicylaldiminato- κ^2 N,O) chrome (III), de formule chimique $[\text{Cr}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO})_3]$, d'après les travaux de recherche de Jessica Hilbert, Sven Kabus, Christian Näther et Wolfgang Bensch.



**Figure06 : Complexe (tris(*N*-methyalsicyaldiminato- K^2 N,O) chrome (III)
Expérimental [1]**

III.3 Fichier des donner cristallographique des complexes $[M (C_8H_8NO)_3]$ M=Cr,V

The Crystallographic Information File (CIF), owned by the International Union of Crystallography, is a file structure based on tag–value ASCII pairs with tags defined in machine-readable dictionaries. The crystallographic community publishes and archives large quantities of numeric information generated by crystal structure determinations, and CIF's acceptance was assured by its adoption as the submission format for Acta Crystallographica and by the obvious needs of the community. CIF's strength lies in its dictionaries, which define most of the concepts of crystallography; its weakness is the difficulty of writing software that exploits its full potential.[2]

III.4 Les logiciels :

Afin de concevoir et modéliser le composé à étudier, nous avons installé un ensemble de programmes avancés qui permettent de suivre l'évolution de son système moléculaire, qui sont les suivants :

III.4.1 Logiciel Chems sketch :

Chems sketch est un logiciel dédié à la construction et au dessin de structures chimiques. Ce logiciel technique est particulièrement adapté à l'apprentissage, puisqu'il permet clairement de représenter la composition chimique de chaque élément. Les interactions entre chaque composants sont mises en évidence, de manière à bien comprendre l'état et le degré de stabilité des structures moléculaires. Précis en 2D, comme en 3D, ChemSketch va jusqu'à générer automatiquement le nom d'une molécule et permettre une manipulation interactive à l'aide de la

souris. Dans travail We used Mercury software in the design of the ligand (**N-methylsalicylaldimine**) [3]

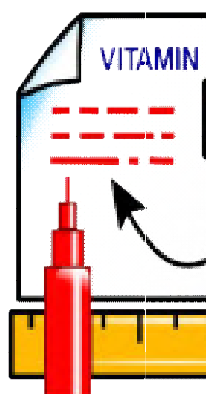
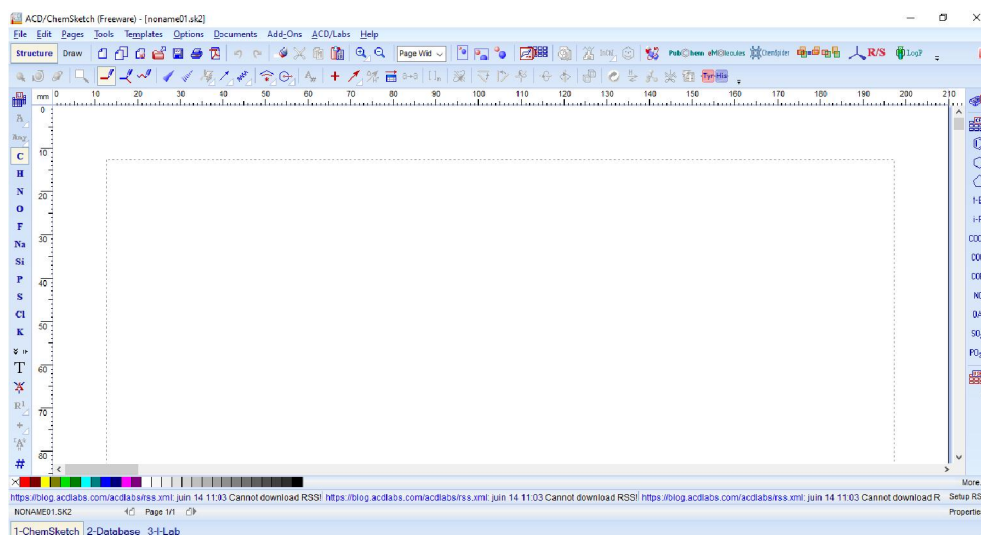


Figure 7 : Surface de travail et le logo de ChemSketch

a. Methode de conception du ligand N-methylsalicylaldimine avec ChemSketch :

Pour concevoir le ligand (**N-méthylsalicylaldimine**) avec **ChemSketch**, nous procédons comme suit :

- Ouvrez le programme **ChemSketch**, puis choisissez le cycle benzénique dans le menu de droite du **-table of radicals-** (tableau des radicaux)
- En cliquant sur le bouton gauche de la souris sur la surface de travail, l'anneau benzénique apparaît

- Dans le menu de gauche du - **periodic table of elements**- tableau périodique, nous sélectionnons l'élément chimique oxygène
- Nous créons un atome d'oxygène lié à un cycle benzénique en position ortho
- Nous créons l'atome de carbone directement connecté à la position Ipso du cycle benzénique après qu'il a été sélectionné dans la liste latérale du tableau périodique.
- En revenant à nouveau à la liste du tableau périodique, nous définissons l'élément azote et le créons et le connectons au carbone.
- connecté à un cycle benzénique de sorte que la liaison c-N est parallèle à la liaison O-C.
- On choisit à nouveau l'élément carbone dans la liste du tableau périodique et on crée un atome de carbone relié à l'azote.
- Pour doubler les liaisons dans la molécule, cliquez une fois sur la liaison que vous souhaitez doubler, et une double liaison est créée.
- Enfin, nous obtenons une molécule (**N-methylsalicylaldimine**), conçue avec le programme **ChemSketch**

b. Methode de conception du complexe avec ChemSketch :

- Ouvrez le programme **ChemSketch**, puis choisissez l'élément chrome dans le menu de gauche Éléments du tableau périodique
- En cliquant sur le bouton gauche de la souris sur la surface de travail, l'atome de chrome central est créé
- Concevoir trois molécules de **N-méthylsalicylaldimine**, dans le programme **ChemSketch** comme mentionné ci-dessus, puis les relier directement à l'atome central au moyen de l'atome final d'oxygène et d'azote pour chacune d'elles.

Enfin, nous obtenons un complexe tri (**N-methylsalicylaldiminato- K^2 N, O**) **chrome (III)** en utilisant le programme **ChemSketch**

c. L'optimisation géométrique de la molécule et le complexe avec ChemSketch :

Après avoir terminé la conception de la molécule et du complexe, on passe au processus d'optimisation de l'ingénierie pour les deux, on clique sur le bouton outils dans la barre supérieure des tâches, un menu (**tools**) apparaît, on clique sur le bouton **clean structure**, puis la molécule apparaît ou s'enchaîne plus

régulièrement, en cliquant sur le bouton (**3d structure optimization**)

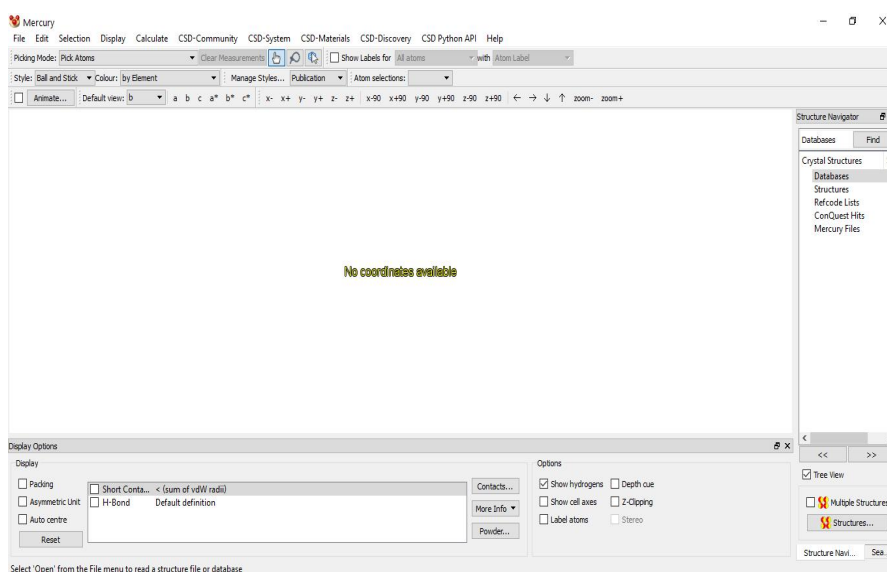
Optimisation de la structure 3D dans la liste des outils parlé Le processus d'amélioration géométrique d'une molécule ou d'un composé comme le montre la figure...

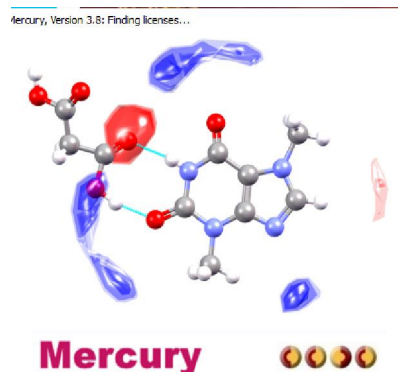
Pour nommer le composé, nous cliquons sur l'option de (**generate**) génération dans une liste, et le nom scientifique de la molécule ou du composé apparaît

Pour afficher toutes les propriétés du composé ou les propriétés de la molécule, on clique sur le bouton **calculate**, depuis le menu outils, apparaît, sélectionnez dans le menu, le menu (**tools**) latéral, choisissez l'option (**all propriétés**), puis toutes les propriétés de la molécule apparaîtront.

III.4.2 Logiciel Mercurey :

Mercurey propose une gamme complète d'outils pour la visualisation de la structure 3D et l'exploration de l'emballage cristallin. Mercurey est capable de charge des données structurales à partir d'une variété de formats et fournit une vaste gamme d'options pour faciliter l'investigation et l'analyse des structures cristallines. Générez des structures de n'importe quelle direction, définissez et visualisez les plans de Mille, et prenez une tranche à travers un cristal dans n'importe quelle direction. Dans travail nous avons utilisé le logiciel Mercurey en prenant une image de l'unité asymétrique et une autre du réseau cristallin de la molécule étudiée. [4]





Figures 08: Surface de travail et le logo de Mercury

III.4.3 Logiciel Avogadro :

- ❖ Avogadro est un logiciel multiplateforme conçu pour l'édition et la visualisation avancée de molécules. Imaginé pour le calcul scientifique, la modélisation moléculaire, la bioinformatique, la science des matériaux ainsi que pour quelques autres activités de recherche connexes, Avogadro se démarque par sa flexibilité et son caractère évolutif de par son robuste système de plugins[5]. Il offre un haut flexible. Un rendu de qualité et une architecture de plugin puissante. Dans travail nous avons utilisé le logiciel **Avogadro** pour :
- ❖ concevoir la molécule $[\text{Cr}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO})_3]$
- ❖ Optimisation géométrique de la molécule
- ❖ Extraire les propriétés de la molécule :
 - Propriétés moléculaire
 - Propriétés atomique
 - Propriétés angulaire
- Propriétés liaison chimique dans le polyèdre de coordination



Figure 09: Le logo d'Avogadro

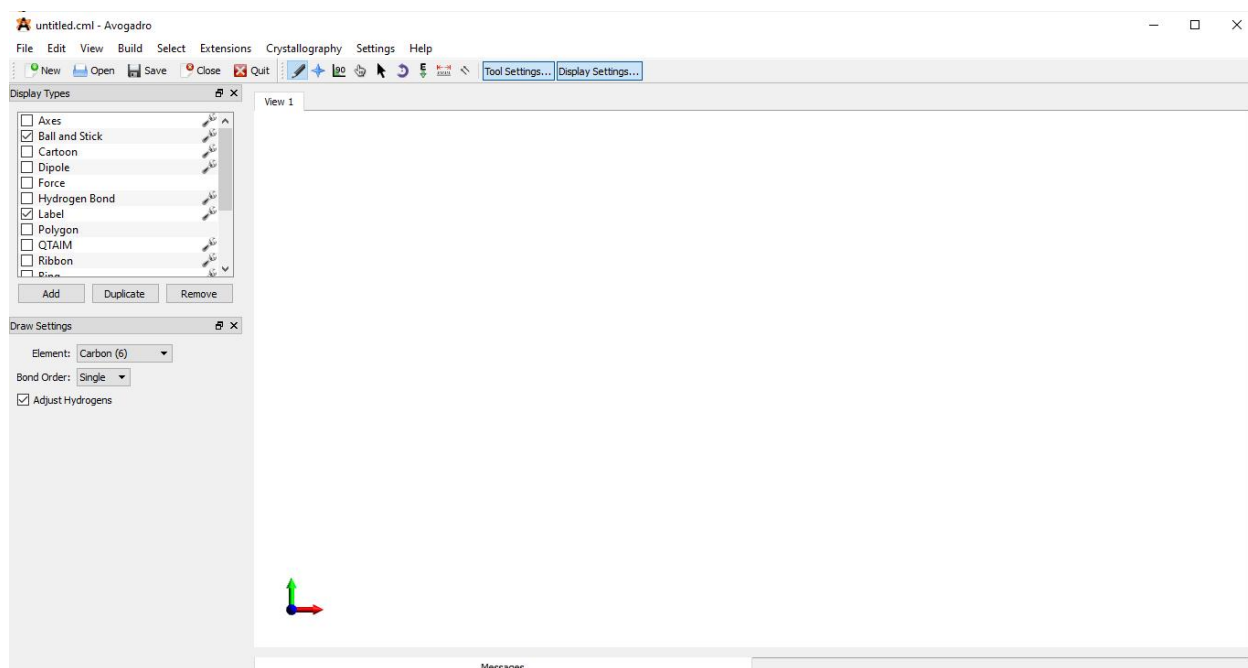


Figure10 : Surface de travail Avogadro

a. Méthode de conception du ligand N-méthylsalicylaldimine avec Avogadro:

Pour concevoir le ligand (N-méthylsalicylaldimine) avec Avogadro, nous procédons comme suit :

- Ouvrez le programme Avogadro et sélectionnez l'élément souhaité et dessiner les atomes de la molécule, qui est le carbone
- Clic gauche pour créer l'atome de carbone et créer un cycle benzénique
- Clic gauche pour créer un atome d'oxygène correspondant à la position Ipso de l'anneau, et on fait glisser vers la position pour former une liaison entre eux.
- On définit la composante oxygène à partir de "Elément" puis en cliquant sur la gauche de la souris on crée un atome d'oxygène correspondant à la position ortho dans le cycle benzénique
- Cliquez avec le bouton gauche de la souris et faites glisser vers la position ortho du cycle benzénique pour créer une liaison entre l'oxygène et le cycle.
- Nous définissons le composant azoté à partir de « élément »
- Clic gauche pour créer l'atome d'azote lié à un atome de carbone et parallèle à l'atome d'oxygène
- On forme une double liaison en pressant la liaison entre le carbone et l'azote
- En cliquant à nouveau sur "élément", nous sélectionnons l'élément de l'atome de carbone

- Clic gauche pour créer l'atome de carbone afin qu'il soit lié verticalement à l'atome d'azote
- Enfin, nous obtenons une molécule (N-méthylsalicylaldimine) en utilisant le programme Avogadro, comme le montre la figure ci-dessous

b. Méthode de conception du tris (N-méthylsalicylaldiminato- K^2 N, O) chromium (III) avec Avogadro :

Pour concevoir la molécule avec Avogadro, nous procédons comme suit :

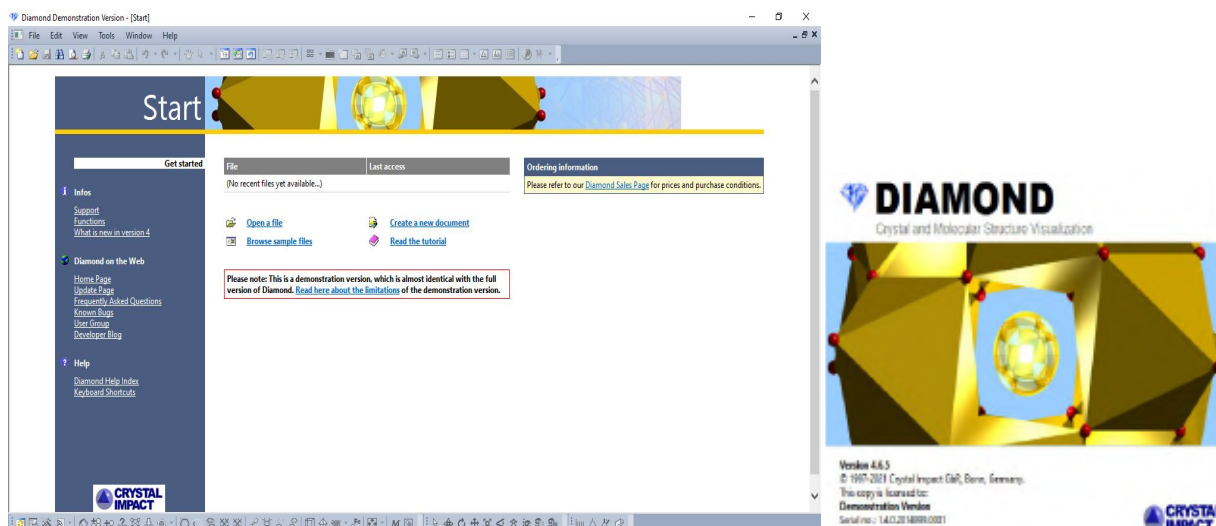
- Ouvrez le programme Avogadro
- Sélectionnez l'élément dont vous souhaitez dessiner les atomes de la molécule, qui est le chrome
- Clic gauche pour créer l'atome de chrome central
- Concevoir trois molécules de N-méthylsalicylaldimine, dans le programme Avogadro comme mentionné ci-dessus, puis les relier directement à l'atome central au moyen de l'atome final d'oxygène et d'azote pour chacune d'elles

c. Méthode de l'Optimisation géométrique du complexe et du ligand avec Avogadro :

Après avoir terminé la conception de la molécule et du complexe, nous sommes passés à l'étape d'optimisation géométrique de la molécule, en cliquant sur le bouton de l'outil d'optimisation automatique son symbole est (E) sur la barre supérieure des tâches, un menu apparaît une liste supplémentaire « paramètres d'optimisation automatique », Nous appuyons sur le bouton de démarrage en bas du menu et le processus d'optimisation technique commence, qui consiste à ajuster les coordonnées des atomes et les longueurs des liaisons entre les atomes et à mesurer les angles en réduisant l'énergie de la molécule, ce qui a été conçu afin d'obtenir des données cristallines pour la molécule qui simule les valeurs expérimentales mentionnées dans l'article

III.4.4 Logiciel Diamond

Diamond est un logiciel de visualisation de la structure moléculaire et cristalline. Il ne dessine que de belles images de structures moléculaires et cristallines, mais offre également un vaste ensemble de fonctions qui vous permettent de modéliser facilement toute partie arbitraire d'une structure cristalline à partir d'un ensemble de paramètres structuraux de base (cellule, groupe spatial, positions atomiques). Nous avons utilisé le programme Diamond en prenant une image du réseau cristallin de la molécule étudiée.[6]



Figures 11 : Surface de travail et le logo de Diamond

III.4.5 Logiciel Notepad++ :

Notepad⁺⁺ est un éditeur de source avec mise en relief de la syntaxe et mise en forme de cette dernière. Ce logiciel vous permet également de colorer les mots définis par l'utilisateur. Vous pouvez ainsi imprimer votre code source en couleur. De plus, **Notepad⁺⁺** possède une fonction multi-vues qui permet à l'utilisateur d'éditer différents documents à la fois et même d'éditer le même document en synchronisant 2 vues différentes. Il supporte entièrement le glisser-déposer: vous pouvez déposer le fichier pour l'ouvrir mais également glisser et visionner un document d'une vue à une autre. Ce logiciel fonctionne aussi vite que le bloc-note fourni par MS Windows.[7]

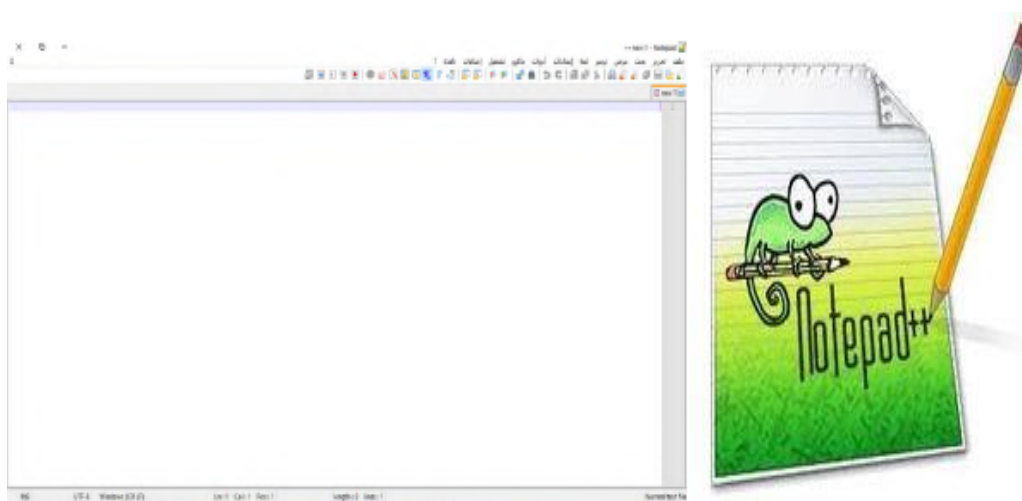


Figure12: Surface de travail et Le logo de Notepad⁺⁺

Références

[1] Jessica Hilbert, Sven Kabus, Christian Nather et Wolfgang Bensch,

Crystal structure of tris(N-methylsalicylaldiminato

[kappa]2N,O)chromium(III) crystallographic communications acta cryst
(2015)

[2] : The crystallographic information file (CIF): a new standard archive file for crystallography
S. R. Hall, F. H. Allen and I. D. Brown *Acta Cryst.* (1991). **A47**, 655-685
<https://doi.org/10.1107/S010876739101067X> **The crystallographic information file (CIF): a
new standard archive file for crystallography**

S. R. Hall, F. H. Allen, I. D. Brown

[3]: Télécharger ChemSketch :determiner des structures .Génération Nouvelles technologies
[https://www.generation-nt.com/chemsketch-editer-determiner-apprendre-formule-structure-
chimie-apprentissage-telecharger-telechargement-1898982.html](https://www.generation-nt.com/chemsketch-editer-determiner-apprendre-formule-structure-chimie-apprentissage-telecharger-telechargement-1898982.html)

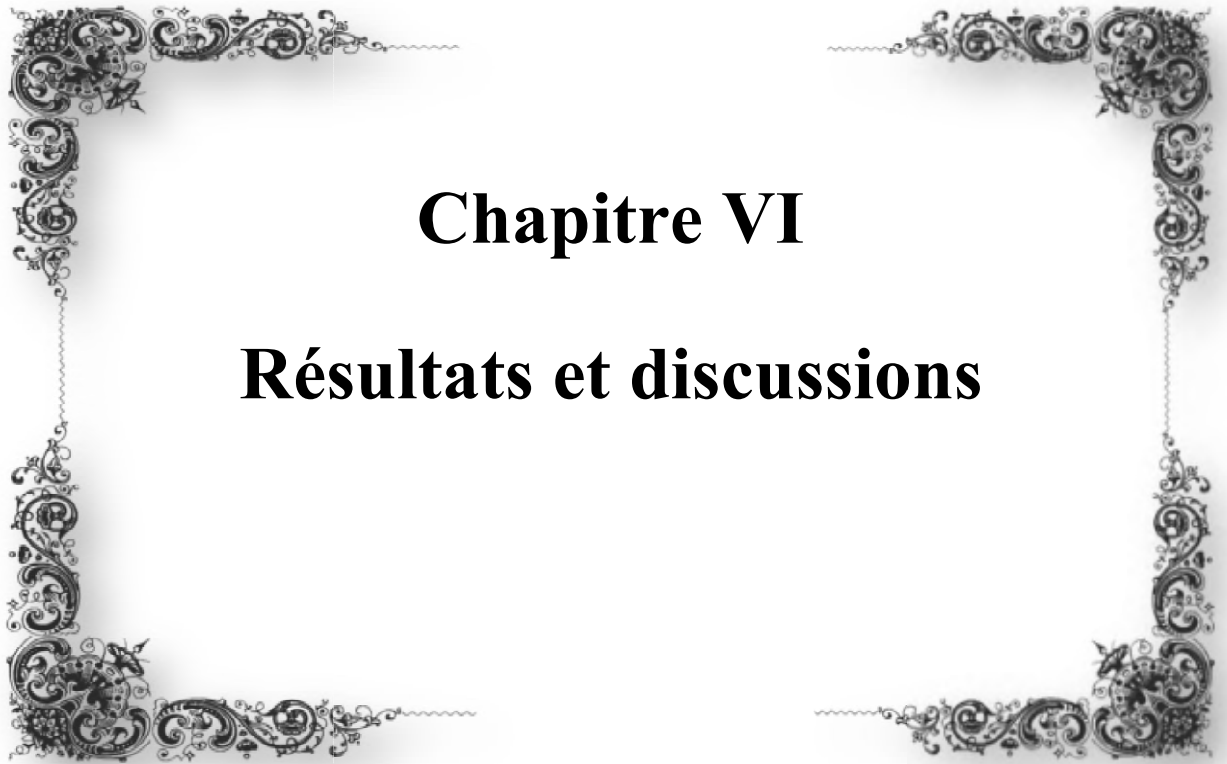
[4] : Mercury ,The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) Mercury -
Crystal Structure Visualisation, Exploration and Analysis Made Easy
<https://www.ccdc.cam.ac.uk/Community/csd-community/freemercury/>

[5]: avogadro/fiche logiciel validé plume projet-plume.org **PROMOUVOIR**
LES LOGICIELS UTILES MAITRISES ET ECONOMIQUES
DANS L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET LA RECHERCHE [https://www.projet-
plume.org/fiche/avogadro](https://www.projet-plume.org/fiche/avogadro)

[6]: crystal impact diamond v 4.02-logiciel de vesualisation des structures moléculaires et
cristallines

[https://www.mediaket.net/logiciels-applications-2/logiciels-scientifiques-71896/1086-crystal-
impact-diamond-v32e-logiciel-de-visualisation-des-structures-moleculaires-et-cristallines.html](https://www.mediaket.net/logiciels-applications-2/logiciels-scientifiques-71896/1086-crystal-impact-diamond-v32e-logiciel-de-visualisation-des-structures-moleculaires-et-cristallines.html)

[7]: télécharger Notepad++ -01net.com-telecharger.com
https://www.01net.com/telecharger/windows/Internet/editeur_de_site/fiches/29119.html



Chapitre VI

Résultats et discussions

Modélisation moléculaire

Dans ce chapitre, nous présenterons la conception du le ligand **N-méthylsalicylaldimine** de la formule chimique C_8H_9NO en raison de l'absence de son fichier des données cristallographique, et effectuerons l'opération de l'optimisation géométrique pour cette molécule en utilisant à la fois les programmes **ChemSketch** et **Avogadro**. Les propriétés de ce ligand seront comparées avant et après sa coordination à l'atome central de chrome par le logiciel **Avogadro**.

De plus, nous démontrerons la conception et la modélisation du complexe de **tris (N-méthylsalicylaldiminato- K^2 N, O) chrome (III)** formé à partir de l'atome central chrome et de trois ligands de **N-méthylsalicylaldimine** avec la formule chimique $[Cr(C_8H_8NO)_3]$ à l'aide des programmes **ChemSketch** et **Avogadro** et déterminé ses propriétés après avoir effectué l'opération de l'optimisation géométrique et les avoir comparées avec les propriétés du complexe expérimental par le programme **Avogadro**, par la suite les déterminé les différents types de présentation du complexe **tris (N-méthylsalicylaldiminato- K^2 N, O) chrome (III)** calculé à l'aide du programme **Mercurey**

Le spectre infrarouge sera également calculé de manière théorique pour le complexe étudié, après avoir constaté que les études précédentes ne traitaient pas expérimentalement le spectre infrarouge. Cela enrichira la littérature de ce complexe avec des bandes de groupes fonctionnels jusqu'à ce qu'il devienne une référence dans les études Cela a été fait en utilisant le programme HyperChem. Ce chapitre se termine par une conclusion.

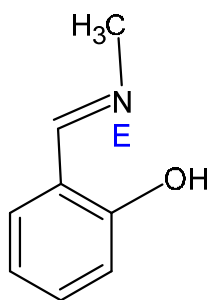
IV.1 Modélisation du ligand N-methylsalicylaldimine

IV.1.1 Conception de ligand N-methylsalicylaldimine avec ChemSketch

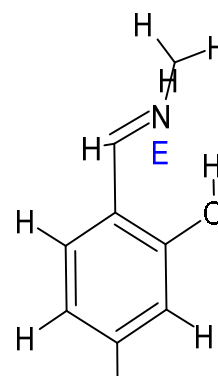
N-methylsalicylaldimine est un amide de formule générale C_8H_9NO et de masse molaire 137 g/mol. Nous avons réalisé la conception de cette molécule en utilisant le logiciel **ChemSketch** pour donner un modèle à cette molécule. Le fichier de conception de molécule obtenue est enregistré sous format *.mol, cette extension peut être utilisé par la suite avec le logiciel **Avogadro**.

IV.1.2 Optimisation géométrique de N-methylsalicylaldimine avec ChemSketch

L'optimisation de la géométrie du ligand **N-methylsalicylaldimine** avec le logiciel **ChemSketch** est présenté par les figures : (9 et 10). La modélisation de cette molécule avec le logiciel **ChemSketch** nous fournit les données qui présente des propriétés physiques pour cette molécule.



2-[(E)-(methylimino)methyl]phenol



2-[(E)-(methylimino)methyl]phenol

*Figure 13: N-methylsalicylaldehyde
avant optimisation géométrique*

*Figure 14: la molécule N-methylsalicylaldehyde
après l'optimisation géométrique*

IV.1.3 Conception de ligand N-methylsalicylaldehyde avec Avogadro :

Le ligand (**N-methylsalicylaldehyde**) vers le programme Avogadro a été conçu selon les étapes décrites précédemment. La figure 15 présente la molécule de N-methylsalicylaldehyde conçu en utilisant le logiciel **Avogadro**.

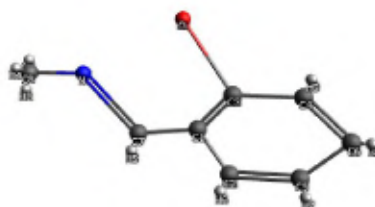


Figure 15: le ligand N-methylsalicylaldehyde avant l'optimisation géométrique

IV.1.4 Optimization géométrique du ligand N-methylsalicylaldehyde

Après avoir conçu le ligand (**N-methylsalicylaldehyde**) dans le programme d'Avogadro et effectué le processus d'optimisation géométrique, il apparaît comme dans la figure 16, et nous obtenons les caractéristiques ci-dessous.

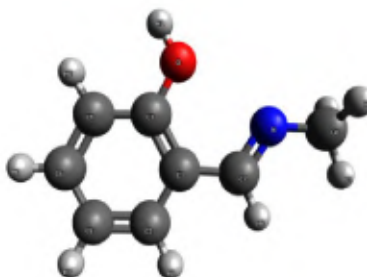


Figure 16: le ligand N-methylsalicylaldimine après l'optimisation géométrique

IV.1.5 Résultat de l'optimisation géométrique du ligand

a. Propriété physique de N-methylsalicylaldimine avec ChemSketsh :

A l'issue de l'optimisation géométrique du ligand sont calculées les propriétés relatives au ligand N-methylsalicylaldimine présenté ci dessous

- Molecular Formula: C₈H₉NO
- Formula Weight: 135.16316
- Composition: C(71.09%) H (6.71%) N(10.36%) O(11.84%)
- Molar Refractivity: 40.58 ± 0.5 cm³
- Molar Volume: 133.7 ± 7.0 cm³
- Parachor: 326.3 ± 8.0 cm³
- Index of Refraction: 1.518 ± 0.05
- Surface Tension: 35.4 ± 7.0 dyne/cm
- Density: 1.01 ± 0.1 g/cm³
- Dielectric Constant: Not available
- Polarizability: 16.08 ± 0.5 10⁻²⁴cm³
- RDBE: 5 Ring Double Bond Equivalents
- Monoisotopic Mass: 135.068414

b. Propriétés d'énergie de N-methylsalicylaldimine avec Avogadro :

L'énergie moléculaire, pour ce ligand considérée comme la somme de trois termes : l'énergie électronique, l'énergie vibrationnelle et l'énergie rotationnelle est fixée à **73,750** kJ/mol et **dE = 0**, on obtient donc la molécule géométriquement optimisé. Comme le montre la figure ci-dessous **Figure : (17)**

AutoOpt: E = 73.75 kJ/mol (dE = 0)

Num Constraints: 0

Figure 17 : Propriétés d'énergie de N-methylsalicylaldimine

c. Propriétés moléculaire de N-methylsalicylaldimine avec Avogadro

Il est montré dans l'image ci-dessous les propriétés moléculaires du ligand (**N-methylsalicylaldimine**) modélisé par le programme **Avogadro** (formule chimique, poids moléculaire, énergie, dipôle estimé, nombre d'atomes, nombre de liaisons).

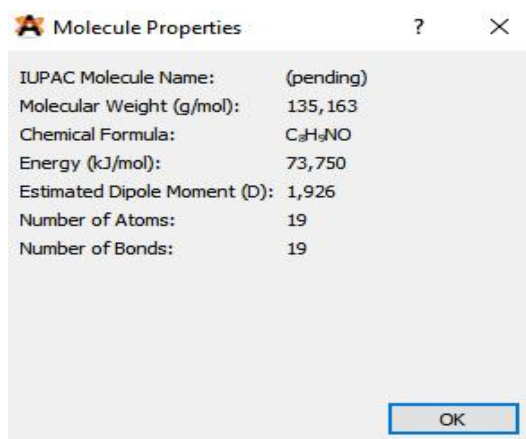


Figure 18: Propriétés moléculaire après l'optimisation géométrique du ligand N-methylsalicylaldimine

d. Propriétés des atomes dans le ligand N-methylsalicylaldimine

Le tableau 2 présente les propriétés des atomes (élément, charge, type, charge partielle, charge formelle et coordonnées des atomes pour le ligand **N-methylsalicylaldimine** à l'aide du programme Avogadro permettant de positionné les atomes du ligand dans le repère cristallographique afin de désigné sa structure cristalline.

Tableau 2 : Propriétés des atomes dans le ligand *N*-methyalsalicyaldimine

Atom Properties								
	Element	Type	Valence	Formal Charge	Partial Charge	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)
Atom 1	C	Car	3	0	0,034	-1,08105	1,64262	0,13994
Atom 2	C	Car	3	0	-0,050	-2,17543	0,77628	-0,03101
Atom 3	C	Car	3	0	0,125	0,21643	1,09033	0,27494
Atom 4	C	Car	3	0	-0,020	0,38721	-0,30353	0,23610
Atom 5	C	Car	3	0	-0,061	-1,99084	-0,60774	-0,06774
Atom 6	C	Car	3	0	-0,058	-0,71172	-1,14681	0,06558
Atom 7	O	O3	2	0	-0,506	1,29253	1,88844	0,44073
Atom 8	H	HO	1	0	0,292	2,18937	1,53687	0,53533
Atom 9	C	C2	3	0	0,032	-1,34438	3,10451	0,17038
Atom 10	N	N2	2	0	-0,294	-0,39341	3,96004	0,32336
Atom 11	C	C3	4	0	0,028	-0,61372	5,38825	0,35762
Atom 12	H	H	1	0	0,047	-0,25645	5,78897	1,32859
Atom 13	H	H	1	0	0,047	-1,68816	5,64922	0,23738
Atom 14	H	H	1	0	0,047	-0,03747	5,86569	-0,46152
Atom 15	H	H	1	0	0,065	1,37491	-0,73542	0,33837
Atom 16	H	H	1	0	0,062	-0,57127	-2,21967	0,03678
Atom 17	H	H	1	0	0,062	-2,84196	-1,26329	-0,19991
Atom 18	H	H	1	0	0,063	-3,17849	1,17180	-0,13673
Atom 19	H	H	1	0	0,083	-2,37050	3,44890	0,05964

e. Propriétés des liaisons dans le ligand *N*-methyalsalicyaldimine avec Avogadro :

Le tableau 03 Il affiche à l'aide du programme Avogadro les valeurs des longueurs des liaisons pour le ligand (***N*-methyalsalicyaldimine**)

Tableau 03. : Propriétés des liaisons dans le ligand N-methylsalicylaldimine

Bond Properties						
	Type	Start Atom	End Atom	Bond Order	Rotatable	Length (Å)
Bond 1	C-C	C4	C6	2	No	1,39566
Bond 2	C-C	C6	C5	1	No	1,39446
Bond 3	C-C	C5	C2	2	No	1,39676
Bond 4	C-C	C2	C1	1	No	1,40621
Bond 5	C-C	C1	C3	2	No	1,41658
Bond 6	C-C	C3	C4	1	No	1,40482
Bond 7	O-C	O	C3	1	No	1,34998
Bond 8	O-H	O	H1	1	No	0,967925
Bond 9	N-C	N	C7	2	No	1,28828
Bond 10	C-C	C7	C1	1	No	1,48573
Bond 11	C-N	C8	N	1	No	1,44551
Bond 12	C-H	C8	H2	1	No	1,10951
Bond 13	C-H	C8	H3	1	No	1,1122
Bond 14	C-H	C8	H4	1	No	1,10951
Bond 15	C-H	C4	H5	1	No	1,08284
Bond 16	C-H	C6	H6	1	No	1,0824
Bond 17	C-H	C5	H7	1	No	1,08242
Bond 18	C-H	C2	H8	1	No	1,0834
Bond 19	C-H	C7	H9	1	No	1,08802

f. Propriétés des angles dans le ligand N-methylsalicylaldimine

Les tableaux 04 montrent les valeurs des angles dans le ligand N-methylsalicylaldimine par l'utilisation du programme Avogadro

Tableaux 04. : Propriétés des angles dans le ligand *N*-methyalsalicyaldimine

Angle	Type	Start Atom	Vertex	End Atom	Angle (°)
Angle 1	CCC	C2	C1	C3	118,9604
Angle 2	CCC	C2	C1	C7	118,0831
Angle 3	CCC	C3	C1	C7	122,9965
Angle 4	CCC	C1	C2	C5	120,7179
Angle 5	CCH	C5	C2	H8	118,7854
Angle 6	CCH	C1	C2	H8	120,4966
Angle 7	CCC	C1	C3	C4	119,7056
Angle 8	CCO	C1	C3	O	120,7517
Angle 9	CCO	C4	C3	O	119,5428
Angle 10	CCC	C3	C4	C6	120,4752
Angle 11	CCH	C6	C4	H5	119,2586
Angle 12	CCH	C3	C4	H5	120,2662
Angle 13	CCC	C2	C5	C6	120,1169
Angle 14	CCH	C6	C5	H7	119,9223
Angle 15	CCH	C2	C5	H7	119,9608
Angle 16	CCC	C4	C6	C5	120,0241
Angle 17	CCH	C4	C6	H6	119,9987
Angle 18	CCH	C5	C6	H6	119,9772
Angle 19	COH	C3	O	H1	122,4024
Angle 20	CCN	C1	C7	N	121,6697
Angle 21	NCH	N	C7	H9	119,8720
Angle 22	CCH	C1	C7	H9	118,4583

IV.1.4 Interprétation des résultants obtenue pour *N*-methyalsalicyaldimine

Après avoir effectué l'optimisation géométrique du ligand (*N*-methyalsalicyaldimine) avec deux logiciels **ChemSketch** et **Avogadro**, nous avons obtenue les dimensions et propriétés associées et les propriétés qui ont été extraites par le programme Avogadro. Nous avons constaté que les longueurs des liaisons liaison sont approximativement : $C = C = 1,417 \text{ \AA}^\circ$,

$$N-C = 1,446 \text{ \AA}^\circ, \quad C-C = 1,486 \text{ \AA}^\circ, \quad C-O = 1,350 \text{ \AA}^\circ, \quad C-H = 1,083 \text{ \AA}^\circ, \quad O-H = 0,968 \text{ \AA}^\circ.$$

Ces valeurs optimisé ne sont pas en accord avec les valeurs expérimentales tels que mentionnés dans les références [01], [02], [03], mais sont en bon accord avec les valeurs habituellement théorique issues des calculs d'optimisation géométrique des molécules. Les valeurs expérimentales sont $C = C = 1,397 \text{ \AA}^\circ$, $N-C = 1,376 \text{ \AA}^\circ$, $C-C = 1,379 \text{ \AA}^\circ$, $C-O = 1,226 \text{ \AA}^\circ$, $C-H = 0,9300 \text{ \AA}^\circ$, $O-H = 0,8200 \text{ \AA}^\circ$.

Il est remarqué que les valeurs des longueurs de liaisons calculées sont inférieures aux longueurs de liaison théorique pour le ligand. Cela veut dire que la conformation expérimentale est plus stable que la conformation théorique.

IV.2 Modélisation du complexe

IV.2.1 Conception du tris (N-methylsalicylaldiminato- K^2 N, O) chrome (III) avec ChemSketch

tris (N-methylsalicylaldiminato- K^2 N, O) chrome (III) est un complexe de formule générale $[Cr(C_8H_8NO)_3]$ et est isotopique avec l'analogue du vanadium(III) .est constitué d'un cation Cr^+ et de trois anions N-méthyl salicylaldimine . Nous avons réalisé la conception de ce complexe en utilisant le logiciel **ChemSketch (figure 19)** pour donner un modèle à cette complexe. Le fichier de conception de complexe obtenue est enregistré sous format *.mol, cette extension peut être utilisé par la suite avec le logiciel Avogadro.

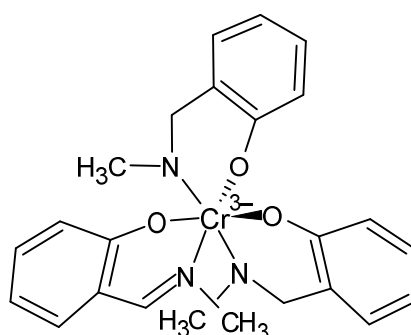


Figure 19:le complexe conçu Avons l'optimisation géométrique (Clean structure)

IV.2.2 Optimisation géométrique du complexe avec ChemSketch

L'optimisation de la géométrie des complexes tris (N-methylsalicylaldiminato- K^2 N, O) chrome (III) avec le logiciel **ChemSketch** est présenté par les (figure20). La modélisation de cette complexe avec le logiciel **ChemSketch** nous fournit les données Qui présente des propriétés physiques pour cette molécule.

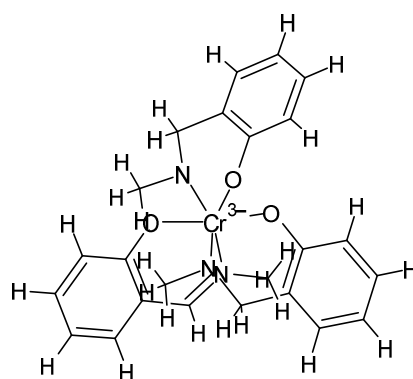


Figure 20: le complexe conçu Après l'optimisation géométrique

IV.2.3 Conception du tris (N-methylsalicylaldiminato- K^2 N, O) chromium (III) avec Avogadro

on obtient la molécule conçu global du complexe tris (N-méthylsalicylaldiminato- K^2 N,O) chrome (III) réalisé avec le programme Avogadro, tel présenté est sur la figure [21] ci-dessous, on peut donc passer à l'optimisation de la géométrie de ce complexe.

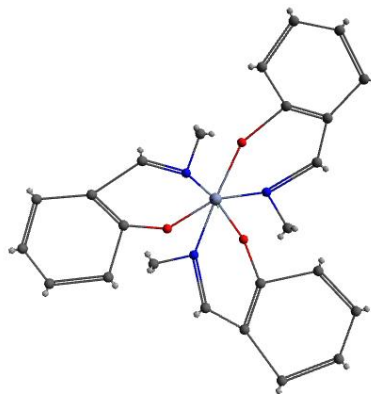
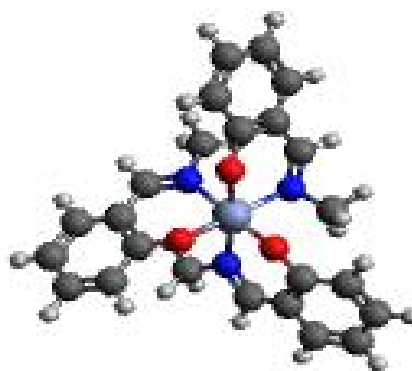


Figure 21 : le complexe avons l' l'Optimisation géométrique

IV.2.4 Optimisation géométrique du complexe avec Avogadro :

Après avoir conçu le composé (N-méthylsalicylaldiminato- K^2 N,O) chrome (III) à l'aide du programme d'Avogadro et effectué le processus d'optimisation géométrique, Nous avons obtenue la géometries la plus faible en energie donc la plus stable comme le montre la figure (22), et nous obtenons les caractéristiques ci-dessous.



la figure 22 :le complexe après l'optimisation géométrique par Avogadro

IV.1.5 Résultat de l'optimisation géométrique du complexe

a. Propriétés physique du complexe par ChemSketch:

A l'issue de l'optimisation géométrique du complexe étudié sont calculé les propriétés relative au complexe **(N-methylsalicylaldiminato- κ^2 N, O) chrome (III)** présenté ci-dessous :

Molecular Formula: $C_{24}H_{26}CrN_3O_3^{3-}$

Formula Weight: 456.4792858

Composition: C(63.15%) H(5.74%) Cr(11.39%) N(9.21%) O(10.51%)

Molar Refractivity: Not available

Molar Volume: Not available

Parachor: Not available

Index of Refraction: Not available

Surface Tension: Not available

Density: Not available

Dielectric Constant: Not available

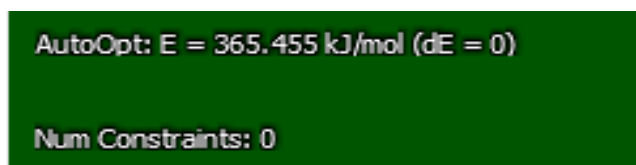
Polarizability: Not available

RDBE: 17.5

Monoisotopic Mass: 456.139575 Da

b. Propriétés d'énergie du complexe par Avogadro :

La valeur énergétique est fixée à **365,455** kJ/mol et **dE = 0**, on obtient donc la molécule géométriquement améliorée. (**figure23**)



AutoOpt: E = 365.455 kJ/mol (dE = 0)
Num Constraints: 0

Figure 23: Résultats de l'optimisation énergétique

c. Propriétés moléculaire du complexe par Avogadro :

la figure ci-dessous montre les propriétés moléculaires du complexe **tri (N-methylsalicylaldiminato- κ^2 N, O) chrome (III)** modélisé par le programme Avogadro (formule chimique, poids moléculaire, énergie, dipôle estimé, nombre d'atomes, nombre de liaisons).

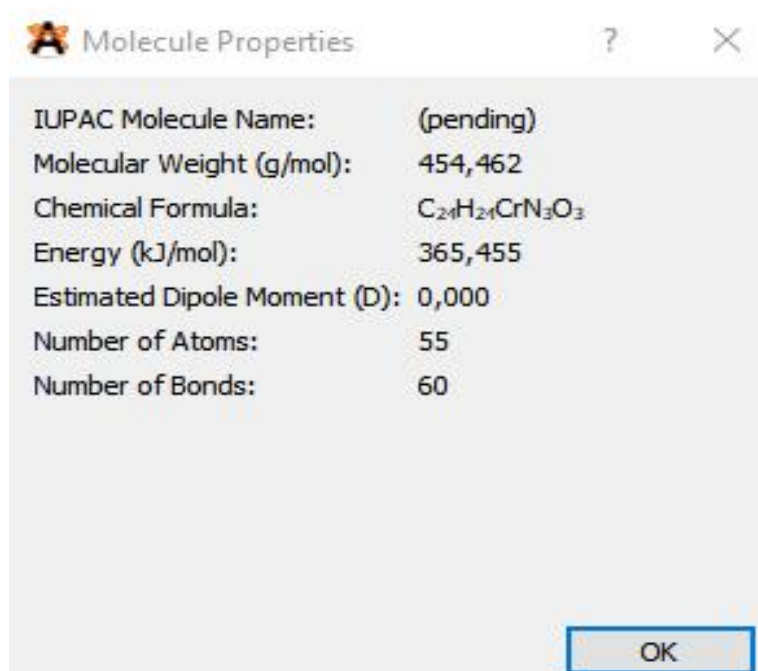
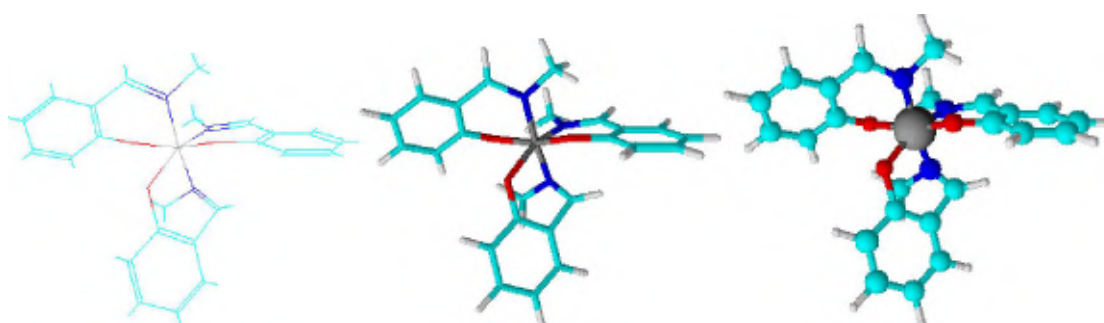


Figure 24: figure Afficher les propriétés moléculaires après l'optimisation géométrique du composé du titre

d. Présentation de différentes formes du complexe avec ChemSketch

Les six formes ci-dessous représentent les différents styles de complexe (N-méthylsalicylaldiminato- κ^2 N,O) chrome (III) utilisant le logiciel Mercury qui sont:

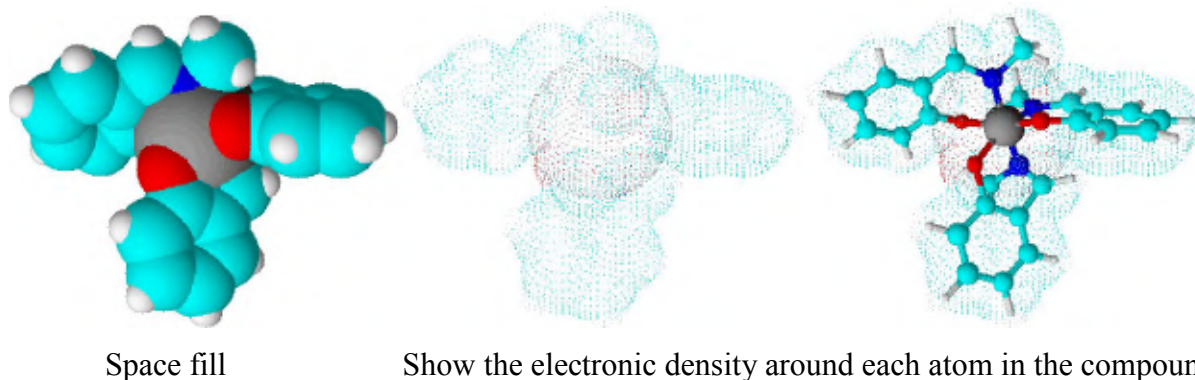
1. Ball and stick
2. Capped sticks
3. Space fill
4. Show the electronic density around each atom in the compound
5. Before engineering optimization



Le molécule avons l'optimisation

Capped sticks

Ball and stick



Figures25: les différents styles de complexe conçu

e. Propriétés des atomes dans le complexe avec Avogadro :

Le tableau de l'annexe **1** regroupe l'ensemble des propriétés atomiques issues de l'optimisation du complexe conçu. Le résultat de ce calcul montre que les trois atomes N et les trois atomes O sont cristallographiquement équivalents et ont accord avec les données de résolution de la structure cristalline de la référence [..]¹ Elucider par le logiciel Mercury.

Notons que :

- le carbone du fragment -CH₃ est désigné dans le tableau par le symbole C3
- Le carbone situé entre le l'azote et le cycle benzénique est désigné par le symbole C2
- le carbone noté C_{ar}, il représente les carbones des trois cycles aromatiques.

La valence des atomes qui apparaissent dans le tableau sont les suivants :

- la valence du Cr est de 6, il est noté dans la littérature qui le chrome peut atteindre ce nombre d'oxydation².
- La valence des atomes de carbone est de 3 sauf pour C3 de méthyle, la valence est de 4.
- La valence des atomes d'oxygène est de 2
- La valence des atomes d'hydrogène est de 1

La charge formale de tous les atomes est nulle.

La charge partielle de tous les atomes est nulle.

Les coordonnées des atomes dans l'axe cristallographique sont indiquées dans le même tableau de l'annexe 1.

¹

²

f. Propriétés des liaisons dans le complexe avec Avogadro :

- Propriété des liaisons chimique dans le polyèdre de coordination

Dans le tableau ci-dessous, les valeurs des longueurs de liaison entre l'atome central (chrome calculé, chrome expérimental, vanadium) et les atomes d'oxygène et d'azote qui lui sont attachés sont présentées.

Tableau 05: Propriété des liaisons chimique dans le polyèdre de coordination

Type de liaison	Longueur de liaison calculé (Å)	Longueur de liaison (Å) dans [Cr]	Type de liaison	Longueur de liaison (Å) dans [V]
O3-Cr	1.87226	1.9318	O3-V	1.9641
O2-Cr	1.87199	1.9563	O2-V	1.9183
O1-Cr	1.87181	1.9337	O1-V	1.9227
N1-Cr	2.03934	2.0557	N1-V	2.1126
N2-Cr	2.04023	2.0752	N2-V	2.1163
N3-Cr	2.03923	2.0705	N3-V	2.1625

Les résultats mentionnés dans le **tableau 05** montre que le changement de l'atome central dans le composé présente des corrélations constantes, car la seule variable ici est le rayon ionique de l'atome central. Le rayon ionique pour l'atome de chrome vaut $0,62 \text{ \AA}$, tandis que le rayon ionique de l'atome de vanadium est égal à $0,54 \text{ \AA}$. Cette différence de $0,08 \text{ \AA}$ conduit à l'appariation de différence dans les longueurs de liaison autour de l'atome central, donc la taille du polyèdre. Les longueurs de liaison entre l'atome central de chrome et ses liaisons sont moins longues que les longueurs de liaison dans le cas de l'atome central de vanadium. Ceci explique le décalage apparent entre les deux diffractogrammes des deux complexes le premier en rouge avec le chrome et le deuxième en bleu avec le vanadium. En comparant ces valeurs avec celles calculées après le processus de modélisation de la molécule, nous remarquons que les longueurs des liaisons autour de l'atome central ont diminué, et cela est dû à la réduction d'énergie due au processus d'amélioration technique jusqu'à ce que le composé devienne plus stable. Nous considérerons la numérotation des atomes dans le modèle théorique en la comparant avec le modèle expérimental comme suit :

- O3 → O21
- O2 → O11
- O1 → O1.

- Influence Sur Le Diffractogramme :

Les diffractogramme en rouge pour le complexe du chrome et en bleu pour le complexe du vanadium sont calculé par le logiciel Mercury en utilisant les fichiers CIF N° 1236932 des deux complexes, téléchargé depuis le site internet de la référence

En annexe,(05) le spectre de diffraction des deux complexes est présenté séparément.

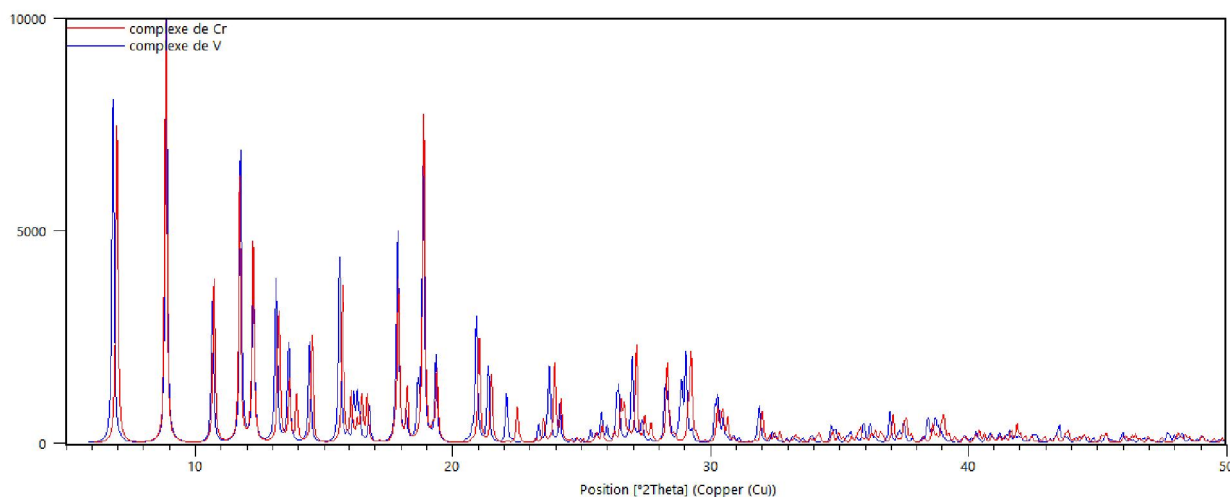


Figure 26 : Influence Sur Le Diffractogramme

g. Propriété des liaisons chimique dans le ligand après coordination :

Les tableau de l'annexe 4 regroupe l'ensemble des propriétés des longueur de liaisin du ligand apres ca coordination avec la'atome cental issues de l'optimisation du complexe conçu avec logiciel avogadro.

h. Propriétés des angles dans le complexe avec Avogadro :

Les tableau de l'annexe 5 regroupe l'ensemble des propriétés anguliere issues de l'optimisation du complexe conçu avec logiciel avogadro.

IV.1.4 Interprétation des résultants obtenue pour le complexe :

a-Comparaison des propriétés moléculaires de composé expérimentales et calculées:

Les propriétés moléculaires de chacun des composés calculés et expérimentaux sont présentées dans le tableau ci-dessous

Tableau 06. : Tableau de propriétés moléculaire de composé expérimentales et calculées

les propriétés moléculaires	le composé calculé	le composé experimental
-----------------------------	--------------------	-------------------------

Masse moléculaire	454.462	454.46
Formule chimique	C ₂₄ H ₂₄ CrN ₃ O ₃	C ₂₄ H ₂₄ CrN ₃ O ₃
Énergie (Kj/mol)	365.455	//

Nous remarquons à partir des résultats ci-dessus que les propriétés de la molécule calculée sont identiques aux propriétés de la molécule expérimentale (la formule chimique, le poids moléculaire) et cela explique que notre calcul est juste puisque les valeurs calculées sont en bon accord avec les valeurs expérimentales.

b-Evolution du système (N-methylsalicylaldimine) avants et après la coordination :

Après la conception et l'optimisation géométrique du ligand (N-methylsalicylaldimine) nous allons présenter dans le **tableau 07** l'évolution des valeurs des longueurs des liaisons et des angles avants et après la coordination des ligands avec l'atome central.

Tableau 07 : tableau d'intervalle des longueurs des liaisons avants et après la coordination du ligand.

Liaison	Intervalle de longueur de liaison avants la coordination	Intervalle de longueur de liaison après la coordination
C-C	[1.394-1.485]	[1.392-1.474]
C=C	1.396-1.416	1.396-1.400-1.394
C-N	1.445	1.460
N=C	1.288	1.298
C-O	1.349	1.337
O-H	0.967	//
C-H	[1.082-1.112]	[1.082-1.112]

Les résultats présentés dans ce tableau montrent une très grande cohérence entre les résultats théoriques et expérimentaux pour les intervalles de longueur de liaison avants et après la coordination du ligand.

c-Evolution des pourcentages de la composition quantitative :

Tableau 08 : Tableau de pourcentage de la composition quantitative du complexe et du ligand

Les compositions	Les pourcentages (%) Dans le complexe	Les pourcentages (%) Dans le ligand
------------------	---------------------------------------	-------------------------------------

C	63.15	71.09
N	9.21	10.36
O	11	11.84
H	5.74	6.71
Cr	11.39	//

Les pourcentage de composition atomique diminue à la formation du complexe et cela est clairement due à l'encrage de l'atome du chrome dans la composition du système pour former le complexe

Conclusion

L'étude théorique de la molécule complexe tris (N-methylsalicylaldiminato- κ_2 N, O) chrome, par la méthode de modélisation moléculaire, avec le logiciel Avogadro nous a permis désigné les propriétés atomiques, de liaisons, et des angles.

A partir de ces valeurs, nous constatons une bonne corrélation entre les valeurs expérimentales et calculés

Références

[1] : organic compounds Acta Crystallographica Section C, Crystal Structure Communications ISSN 0108-2701 The 2:1 complex of maleic acid and 1,4-diazabicyclo[2.2.2]octane: hydrogen-bonded sheets linked by C \cdots H \cdots O hydrogen bonds Cui Rong Suna and Zhi Min Jinb* a Department of Chemistry, Zhejiang University, Hangzhou 310027, People's Republic of China, and b College of Pharmaceutical Science, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310014, People's Republic of China Correspondence e-mail: zhimin-j@163.net

DACO_ACID_Moleique.pdf

[2] : acta crist cristallographic communications su5262.pdf Crystal structure of piperazine-1,4-dium bis(4-aminobenzenesulfonate)K. Sathesh Kumar,a S. Ranjith,a S. Sudhakar,b P. Srinivasanc* and M. N. Ponnuswamyd*a Department of Physics, SRM University, Ramapuram Campus, Chennai 600 089, India, b Department of Physics, Alagappa University, Karaikudi 630 003, India, c Department of Physics, University College of Engineering, Panruti, Cuddalore 607 106, India, and dCentre of Advanced Study in Crystallography and Biophysics, University of Madras, Guindy Campus, Chennai 600 025, India. *Correspondence e-mail: sril35@gmail.com, mnpsy2004@yahoo.com

Edited by H. Stoeckli-Evans, University of Neuchâtel, Switzerland

[3] :dab_hsq_hyd_pdf Journal of Molecular Structure The 1:2:1 adduct of DABCO dication, hydrogen squarate and water molecules studied by X-ray diffraction and FTIR spectroscopy P. Barczynski, Z. Dega-Szafran†, A. Katrusiak, M. Szafran

Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, Grunwaldzka 6, 60-780 Poznań, Poland
journal homepage: www.elsevier.com/locate/molstruc

A decorative rectangular border with intricate floral and scrollwork patterns, framing the central text.

Conclusion générale

Grâce à la modélisation moléculaire et aux améliorations qu'elle a subies ces dernières années, et sur la base des résultats de simulation, il a été conclu que le modèle hypothétique conçu avec les programmes ChemSketch et Avogadro est le modèle le plus stable, par rapport au modèle expérimental.

Ces résultats mettent en évidence l'importance de la modélisation moléculaire en chimie théorique, grâce à son utilisation dans la conception d'un système moléculaire avant la synthèse de cette molécule en laboratoire, il est idéal d'exclure 90% des composés potentiels comme inadaptés à l'utilisation envisagée.

Cette information est très importante, car la préparation d'un composé peut prendre un mois de traitement et de nombreuses matières premières et générer des déchets toxiques et donner un résultat négatif. Par conséquent, la modélisation moléculaire économise des efforts et du temps, préserve l'environnement et donne des résultats précis. à l'heure actuelle, les études computationnelles sont devenues pour tout composé ou interaction, l'une des méthodes de recherche les plus importantes pour cela et connaître la possibilité de l'appliquer et d'obtenir les meilleurs résultats tels qu'ils ont émergé dans cette étude. À la lumière de cela, nous espérons faire ce travail expérimentalement.

A decorative border with intricate floral and scrollwork patterns, forming a rectangular frame around the central text. The border is composed of four corner pieces and four side pieces, each featuring detailed designs of leaves, flowers, and scrolls.

ANNEXE

Annexe 1 : Tableau des coordonnées atomiques des atomes dans le complexe

	Element	Type	valence	Formal charge	Partial charge	X(A°)	Y(A°)	Z(A°)
Atom 1	Cr	Cr	6	0	0.000	-0.27002	1.31707	0.18757
Atom 2	N	N2	3	0	0.000	-1.85420	1.84181	1.35961
Atom 3	N	N2	3	0	0.000	1.03485	2.44629	1.27600
Atom 4	N	N2	3	0	0.000	0.11822	-0.36068	1.27989
Atom 5	O	O3	2	0	0.000	-1.32910	0.23884	-0.91676
Atom 6	O	O3	2	0	0.000	-0.73443	2.75668	-0.91529
Atom 7	O	O3	2	0	0.000	1.14823	0.98448	-0.98858
Atom 8	C	C2	3	0	0.000	-3.07390	1.47731	1.10751
Atom 9	C	Car	3	0	0.000	-2.65114	0.04292	-0.94427
Atom 10	C	Car	3	0	0.000	-3.51703	0.61688	-0.00549
Atom 11	C	C2	3	0	0.000	1.10007	-1.16812	1.01942
Atom 12	C	Car	3	0	0.000	-0.26209	4.00570	-0.97454
Atom 13	C	C2	3	0	0.000	1.30226	3.68512	0.99912
Atom 14	C	Car	3	0	0.000	0.70908	4.48620	-0.08791
Atom 15	H	H	1	0	0.000	-3.86953	1.81918	1.77138
Atom 16	C	Car	1	0	0.000	2.02822	4.21412	1.61859
Atom 17	C	Car	3	0	0.000	3.04956	0.07564	-2.00596
Atom 18	C	Car	3	0	0.000	-3.16051	-0.77588	-1.96202
Atom 19	C	Car	3	0	0.000	-4.89873	0.35341	-0.10994
Atom 20	C	Car	3	0	0.000	-4.52900	-1.02681	-2.5508
Atom 21	C	Car	3	0	0.000	4.06934	-1.93784	-1.16014
Atom 22	C	Car	3	0	0.000	4.04493	-0.89770	-2.08550
Atom 23	C	Car	3	0	0.000	2.07256	-0.1899	-1.00200
Atom 24	C	Car	3	0	0.000	2.08742	-1.02189	-0.6604
Atom 25	H	H	1	0	0.000	1.23412	-2.04857	1.64984
Atom 26	C	Car	3	0	0.000	3.09851	-2.00087	-0.15869
Atom 27	C	Car	3	0	0.000	1.14831	5.81967	-0.22358
Atom 28	C	Car	3	0	0.000	-0.33583	6.15999	-2.09621
Atom 29	C	Car	3	0	0.000	0.63020	6.64853	-1.22054

Atom 30	C	Car	3	0	0.000	-0.77974	4.84396	-1.97206
Atom 31	H	H	1	0	0.000	-0.74085	6.79947	-2.86987
Atom 32	H	H	1	0	0.000	-1.53165	4.47061	-2.65641
Atom 33	H	H	1	0	0.000	0.97753	7.66962	-1.31207
Atom 34	H	H	1	0	0.000	1.89700	6.22641	0.44594
Atom 35	H	H	1	0	0.000	4.79524	-0.84540	-2.86384
Atom 36	H	H	1	0	0.000	3.03602	0.88142	-2.72957
Atom 37	H	H	1	0	0.000	3.14013	-2.82144	0.54767
Atom 38	H	H	1	0	0.000	4.83936	-2.69636	-1.21795
Atom 39	C	C3	4	0	0.000	-0.72745	-0.75436	2.40251
Atom 40	H	H	1	0	0.000	-1.55671	-0.07556	2.60408
Atom 41	H	H	1	0	0.000	-0.12512	-0.81072	3.33544
Atom 42	H	H	1	0	0.000	-1.17656	-1.75258	2.20581
Atom 43	C	C3	4	0	0.000	-1.77184	1.89090	2.40802
Atom 44	H	H	1	0	0.000	1.52347	0.85591	2.64544
Atom 45	H	H	1	0	0.000	1.56274	2.47774	3.32903
Atom 46	H	H	1	0	0.000	2.86436	1.92830	2.20396
Atom 47	C	C3	4	0	0.000	-1.69354	2.70234	2.52729
Atom 48	H	H	1	0	0.000	-0.66630	3.00688	2.72619
Atom 49	H	H	1	0	0.000	-2.05124	2.17881	3.44074
Atom 50	H	H	1	0	0.000	-2.28426	3.63527	2.39483
Atom 51	C	Car	3	0	0.000	-5.39964	-0.46079	-1.12756
Atom 52	H	H	1	0	0.000	-5.59797	0.77843	0.60028
Atom 53	H	H	1	0	0.000	-6.46267	-0.65338	-1.19471
Atom 54	H	H	1	0	0.000	-4.91302	-1.65960	-2.84479
Atom 55	H	H	1	0	0.000	-2.48900	-1.21987	-2.68659

Annexe 02 : des liaisons chimique dans le ligand après coordination

Bond Properties						
	Type	Start Atom	End Atom	Bond Order	Rotatable	Length (Å)
Bond 1	O-Cr	O3	Cr	1	No	1,87226
Bond 2	O-Cr	O2	Cr	1	No	1,87202
Bond 3	O-Cr	O1	Cr	1	No	1,87183
Bond 4	N-Cr	N1	Cr	1	No	2,03935
Bond 5	N-Cr	N2	Cr	1	No	2,04022
Bond 6	N-Cr	N3	Cr	1	No	2,03929
Bond 7	C-C	C1	C3	1	No	1,47496
Bond 8	C-C	C3	C2	2	No	1,40018
Bond 9	C-O	C2	O1	1	No	1,33675
Bond 10	C-O	C5	O2	1	No	1,33665
Bond 11	C-C	C7	C6	1	No	1,47487
Bond 12	C-C	C7	C5	2	No	1,40007
Bond 13	C-N	C6	N2	2	No	1,29726
Bond 14	C-N	C4	N3	2	No	1,29763
Bond 15	C-N	C1	N1	2	No	1,29763
Bond 16	C-H	C1	H1	1	No	1,09116
Bond 17	C-H	C6	H2	1	No	1,09114
Bond 18	C-O	C14	O3	1	No	1,33669
Bond 19	C-C	C14	C15	2	No	1,39988
Bond 20	C-C	C4	C15	1	No	1,47461
Bond 21	C-H	C4	H3	1	No	1,09114
Bond 22	C-C	C15	C16	1	No	1,41042
Bond 23	C-C	C16	C12	2	No	1,39621
Bond 24	C-C	C13	C12	1	No	1,3924
Bond 25	C-C	C13	C8	2	No	1,39444
Bond 26	C-C	C14	C8	1	No	1,40203
Bond 27	C-C	C10	C3	1	No	1,41046
Bond 28	C-C	C11	C9	2	No	1,39442
Bond 29	C-C	C17	C7	1	No	1,41049
Bond 30	C-C	C18	C19	1	No	1,39237
Bond 31	C-C	C19	C17	2	No	1,3962
Bond 32	C-C	C18	C20	2	No	1,39441
Bond 33	C-C	C20	C5	1	No	1,40203
Bond 34	C-H	C18	H4	1	No	1,08237
Bond 35	C-H	C20	H5	1	No	1,08309
Bond 36	C-H	C19	H6	1	No	1,08242
Bond 37	C-H	C17	H7	1	No	1,08351
Bond 38	C-H	C13	H8	1	No	1,08237
Bond 39	C-H	C8	H9	1	No	1,08308
Bond 40	C-H	C16	H10	1	No	1,08351
Bond 41	C-H	C12	H11	1	No	1,08242
Bond 42	C-N	C21	N3	1	No	1,4596
Bond 43	C-H	C21	H12	1	No	1,09045

Annexe 03 : Propriétés des angles dans le complexe avec Avogadro :

Angle Properties					
	Type	Start Atom	Vertex	End Atom	Angle (°)
Angle 1	OCrO	O2	Cr	O3	87,3881
Angle 2	OCrO	O1	Cr	O3	87,4578
Angle 3	NCrO	N1	Cr	O3	174,3885
Angle 4	NCrO	N2	Cr	O3	87,0745
Angle 5	NCrO	N3	Cr	O3	92,6443
Angle 6	OCrO	O1	Cr	O2	87,4228
Angle 7	NCrO	N1	Cr	O2	87,0182
Angle 8	NCrO	N2	Cr	O2	92,7125
Angle 9	NCrO	N3	Cr	O2	174,3396
Angle 10	NCrO	N1	Cr	O1	92,7361
Angle 11	NCrO	N2	Cr	O1	174,5187
Angle 12	NCrO	N3	Cr	O1	87,1237
Angle 13	NCrN	N1	Cr	N2	92,7431
Angle 14	NCrN	N1	Cr	N3	92,9666
Angle 15	NCrN	N2	Cr	N3	92,7424
Angle 16	CNC	Cr	N1	C1	123,1070
Angle 17	CNC	Cr	N1	C23	121,7341
Angle 18	CNC	Cr	N1	C23	115,1261
Angle 19	CNC	Cr	N2	C6	123,1288
Angle 20	CNC	Cr	N2	C22	121,7193
Angle 21	CNC	C6	N2	C22	115,1230

Angle Properties					
	Type	Start Atom	Vertex	End Atom	Angle (°)
Angle 22	CrNC	Cr	N3	C4	123,2613
Angle 23	CrNC	Cr	N3	C21	121,5722
Angle 24	CNC	C4	N3	C21	115,1473
Angle 25	CrOC	Cr	O1	C2	131,0049
Angle 26	CrOC	Cr	O2	C5	131,0742
Angle 27	CrOC	Cr	O3	C14	131,1814
Angle 28	NCC	N1	C1	C3	126,3585
Angle 29	CCH	C3	C1	H1	115,0120
Angle 30	NCH	N1	C1	H1	118,6276
Angle 31	OCC	O1	C2	C3	122,5291
Angle 32	CCC	C3	C2	C9	120,0943
Angle 33	OCC	O1	C2	C9	117,3764
Angle 34	CCC	C1	C3	C2	124,0052
Angle 35	CCC	C1	C3	C10	117,3336
Angle 36	CCC	C2	C3	C10	118,6578
Angle 37	NCC	N3	C4	C15	126,3475
Angle 38	NCH	N3	C4	H3	118,6249
Angle 39	CCH	C15	C4	H3	115,0274
Angle 40	OCC	O2	C5	C7	122,5305
Angle 41	OCC	O2	C5	C20	117,3713
Angle 42	CCC	C7	C5	C20	120,0981

Angle Properties					
	Type	Start Atom	Vertex	End Atom	Angle (°)
Angle 43	NCC	N2	C6	C7	126,3768
Angle 44	CCH	C7	C6	H2	115,0044
Angle 45	NCH	N2	C6	H2	118,6173
Angle 46	CCC	C5	C7	C6	124,0088
Angle 47	CCC	C6	C7	C17	117,3325
Angle 48	CCC	C5	C7	C17	118,6564
Angle 49	CCC	C13	C8	C14	120,6674
Angle 50	CCH	C13	C8	H9	119,3480
Angle 51	CCH	C14	C8	H9	119,9847
Angle 52	CCC	C2	C9	C11	120,6701
Angle 53	CCH	C11	C9	H24	119,3445
Angle 54	CCH	C2	C9	H24	119,9833
Angle 55	CCC	C3	C10	C24	120,9544
Angle 56	CCH	C3	C10	H21	120,6887
Angle 57	CCH	C24	C10	H21	118,3568
Angle 58	CCC	C9	C11	C24	119,7390
Angle 59	CCH	C9	C11	H23	120,1368
Angle 60	CCH	C24	C11	H23	120,1222
Angle 61	CCC	C13	C12	C16	119,8819
Angle 62	CCH	C16	C12	H11	120,0879
Angle 63	CCH	C13	C12	H11	120,0302

Angle Properties					
	Type	Start Atom	Vertex	End Atom	Angle (°)
Angle 64	CCC	C8	C13	C12	119,7379
Angle 65	CCH	C12	C13	H8	120,1225
Angle 66	CCH	C8	C13	H8	120,1396
Angle 67	OCC	O3	C14	C15	122,5269
Angle 68	OCC	O3	C14	C8	117,3783
Angle 69	CCC	C8	C14	C15	120,0946
Angle 70	CCC	C4	C15	C14	123,9720
Angle 71	CCC	C14	C15	C16	118,6711
Angle 72	CCC	C4	C15	C16	117,3561
Angle 73	CCC	C12	C16	C15	120,9471
Angle 74	CCH	C15	C16	H10	120,6887
Angle 75	CCH	C12	C16	H10	118,3642
Angle 76	CCC	C7	C17	C19	120,9549
Angle 77	CCH	C7	C17	H7	120,6900
Angle 78	CCH	C19	C17	H7	118,3550
Angle 79	CCC	C19	C18	C20	119,7377
Angle 80	CCH	C19	C18	H4	120,1227
Angle 81	CCH	C20	C18	H4	120,1396
Angle 82	CCC	C17	C19	C18	119,8833
Angle 83	CCH	C18	C19	H6	120,0291
Angle 84	CCH	C17	C19	H6	120,0876

Angle Properties					
	Type	Start Atom	Vertex	End Atom	Angle (°)
Angle 85	CCC	C5	C20	C18	120,6695
Angle 86	CCH	C18	C20	H5	119,3461
Angle 87	CCH	C5	C20	H5	119,9843
Angle 88	NCH	N3	C21	H12	114,5120
Angle 89	NCH	N3	C21	H13	110,1910
Angle 90	NCH	N3	C21	H14	109,8784
Angle 91	HCH	H12	C21	H13	106,7637
Angle 92	HCH	H12	C21	H14	106,5190
Angle 93	HCH	H13	C21	H14	108,7623
Angle 94	NCH	N2	C22	H15	114,5012
Angle 95	NCH	N2	C22	H16	110,2690
Angle 96	NCH	N2	C22	H17	109,9216
Angle 97	HCH	H15	C22	H16	106,1276
Angle 98	HCH	H15	C22	H17	107,1933
Angle 99	HCH	H16	C22	H17	108,6012
Angle 100	NCH	N1	C23	H18	114,4970
Angle 101	NCH	N1	C23	H19	110,1353
Angle 102	NCH	N1	C23	H20	109,9272
Angle 103	HCH	H18	C23	H19	106,5527
Angle 104	HCH	H18	C23	H20	106,7384
Angle 105	HCH	H19	C23	H20	108,7788
Angle 106	CCC	C10	C24	C11	119,8841
Angle 107	CCH	C10	C24	H22	120,0873
Angle 108	CCH	C11	C24	H22	120,0285

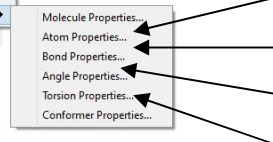
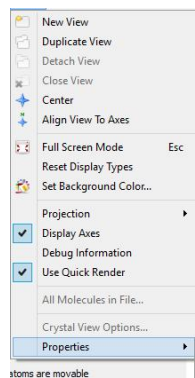
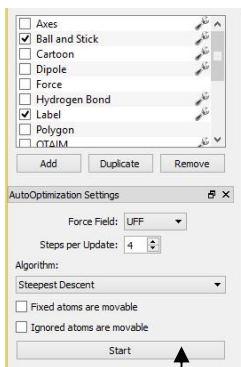
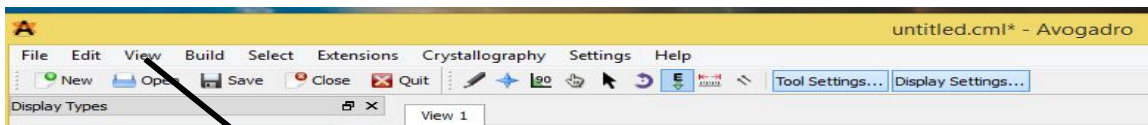
Angle Properties					
	Type	Start Atom	Vertex	End Atom	Angle (°)
Angle 88	NCH	N3	C21	H12	114,5120
Angle 89	NCH	N3	C21	H13	110,1910
Angle 90	NCH	N3	C21	H14	109,8784
Angle 91	HCH	H12	C21	H13	106,7637
Angle 92	HCH	H12	C21	H14	106,5190
Angle 93	HCH	H13	C21	H14	108,7623
Angle 94	NCH	N2	C22	H15	114,5012
Angle 95	NCH	N2	C22	H16	110,2690
Angle 96	NCH	N2	C22	H17	109,9216
Angle 97	HCH	H15	C22	H16	106,1276
Angle 98	HCH	H15	C22	H17	107,1933
Angle 99	HCH	H16	C22	H17	108,6012
Angle 100	NCH	N1	C23	H18	114,4970
Angle 101	NCH	N1	C23	H19	110,1353
Angle 102	NCH	N1	C23	H20	109,9272
Angle 103	HCH	H18	C23	H19	106,5527
Angle 104	HCH	H18	C23	H20	106,7384
Angle 105	HCH	H19	C23	H20	108,7788
Angle 106	CCC	C10	C24	C11	119,8841
Angle 107	CCH	C10	C24	H22	120,0873
Angle 108	CCH	C11	C24	H22	120,0285

*

Annexe 04 : Une image montrant les étapes du processus d'optimisation géométrique et les étapes d'affichage des propriétés de la molécule modélisée à l'aide du programme Avogadro

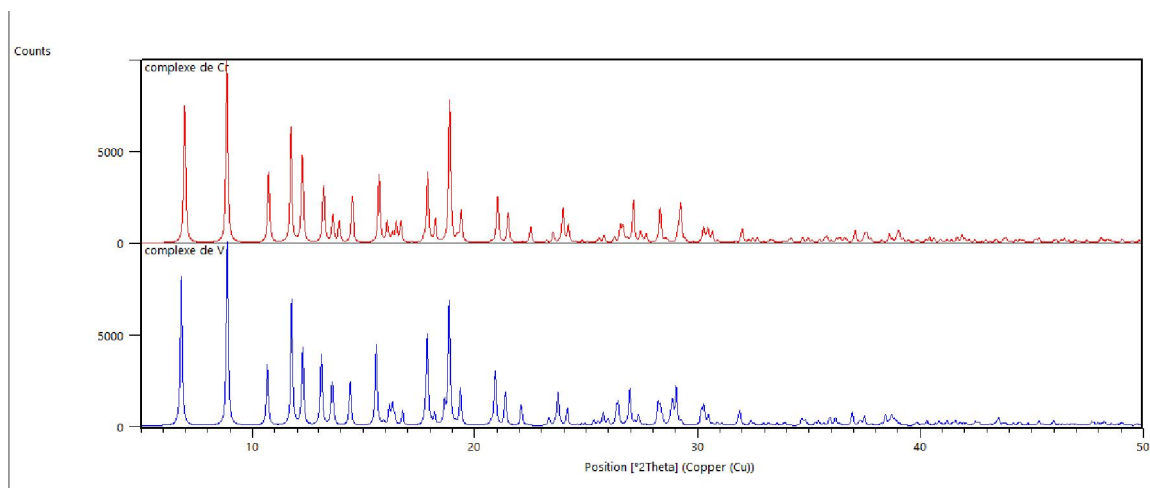
(1)

Auto optimisation tool



(1) Begin the optimization option

Annexe 05: Spectre de diffraction pour les deux complexes séparément.



Résumé

In this study, molecular modeling of the hypothetical model of tris(N-methylsalicylaldiminato-k₂ N,O) chrome(III) molecule designed using ChemSketch and Avogadro programs, and studying the development of this system and its effect on the model and determining which complex is the most stable, by comparing Characteristics of the calculated complex with the experimental complex contained in the carrier labeled with tris(N-methylsalicylaldiminato-k₂ N,O) chrome(III) crystal structure of . By jessica helbert and colleagues.. Through this study, we obtained a complex of tris(N-methylsalicylaldiminato-k₂ N,O) chrome(III) which has a very strong affinity with the molecular system.

Keys word : molecular modeling, ChemSketch and Avogadro programs, complex properties

Abstract

Dans cette étude, la modélisation moléculaire du modèle hypothétique de la molécule tris(N-méthylsalicylaldiminato-k₂ N,O) chrome(III) conçue à l'aide des programmes ChemSketch et Avogadro, et l'étude du développement de ce système et de son effet sur le modèle et la détermination lequel des deux complexes est le plus stable, en comparant les caractéristiques du complexe calculé avec le complexe expérimental contenu dans le support marqué avec la structure cristalline tris(N-méthylsalicylaldiminato-k₂ N,O) chrome(III) de . Par Jessica Helbert et ses collègues.. A travers cette étude, nous avons obtenu un complexe de tris(N-méthylsalicylaldiminato-k₂ N,O) chrome(III) qui a une très forte affinité avec le système moléculaire.

Mots clé : modélisation moléculaire, programmes ChemSketch et Avogadro, propriété du complexe

المخلص

تم في هذه الدراسة تنفيذ النمذجة الجزيئية للنموذج الافتراضي لجزيئة tris(N-methylsalicylaldiminato-k₂ N,O) chrome(III) باستخدام برنامجي ChemSketch et Avogadro, و دراسة تطور هذا النظام و تأثيره على النموذج و تحديد اي المعقدين هو الاكثر استقرارا, بمقارنة خصائص المعقد المحسوب بالمعقد التجريبي الوارد في النقال المعنون ب tris(N-methylsalicylaldiminato-k₂ N,O) chrome(III) crystal structure of . للمؤلفة jessica Helbert و زملائها من خلال هذه الدراسة تحصلنا على معقد tris(N-methylsalicylaldiminato-k₂ N,O) chrome(III) له تماسك قوي جدا مع النظام الجزيئي.

الكلمات المفتاحية: النمذجة الجزيئية، برنامجي ChemSketch et Avogadro، خصائص المعقد