RÉSUMÉ

يهدف هذا العمل التجريبي والنظري إلى دراسة ثلاثة خصائص، الهيكلية و الإلكترونية و الاهتزازية للمركب العضوي المانثول (C10H20O). تم القيام بحسابات التحسين الهندسي اعتمادا على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) ، باستخدام برنامج (Gaussien) و الوظيفة RB3LYP والقاعدة 6-31G تمت دراسة الخصائص الاهتزازية باستخدام تقنية الأشعة تحت الحمراء.

الكلمات المفتاحية مانثول C10H20O . حسابات DFT . طيف الأشعة تحت الحمراء

Ce travail consiste à étudier les propriétés structurales, électroniques, vibrationnelles de composante organique menthol (C10H20O)

Les calculs d'optimisation géométrique ont été effectués par la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT en utilisant le programme Gaussien avec la fonctionnelle RB3LYP et la base Gaussien 6-31G.

Les propriétés vibrationnelles ont été étudiées par la technique spectroscopie infrarouge

Les mots clé : menthol C10H20 O . calcul DFT . spectroscopie IR .

This work consist in studying the structural, electronic and vibrational properties of the organic component "menthol".

The geometric optimization calculations were done based on density functional theory (DFT).

using the gaussien program , with the functional RB3LYP and the Gaussian basis 6-31G.

vibrational proprities were studied using infrared technology

KeyWord : menthol C10H20 O , DFT calculations , IR spectroscopy.

Dédicaces

نحن سعداء جدا لاتمام هذا العمل وهذا بفضل الله تعالى الذي اعاننا على تعبه اولا ثم الذين من حولنا الذين لم يدخرو اي جهد لمدنا بكل ما نحتاجه في طريقنا من نصائح و ارشادات طوال مسيرة حياتنا الجامعية .

الى ابوي العزيزين انا عبد العزيز مطالي و اخوتي و اخواتي الى روح خالي المتوفي مؤخرا.

ال سائر افراد عائلتي انا محمد الهاشمي قرطبي اتمنى الصحة والعافية والعمر الطويل للابوين العزيزين.

Remerciements

Nous voulons remercier Dieu Tout-Puissant de nous avoir donné la patience Et du courage durant ces longues années d'études, qui nous ont donné de la force Et de la patience pour terminer cet humble travail.

Tout d'abord, nous tenons à exprimer nos sincères remerciements A notre promoteur M. Boukaoud Abdelali d'avoir Assuré la supervision, la direction, l'assistance et les conseils car nous avons grandement bénéficié de son expérience.

nous tenons à remercier les membres du jury d'avoir accepté d'examiner et de juger notre travail.

nous tenons également à remercier les professeurs du Département de Physique de l'Université de Médéa.

nous tenons aussi à remercier la directrice du Computer L'abs, Mme Luz Khadija.

Table des matières

1 Spectroscopie IR **13**

1.1 Introduction 13

1.2 Définition la spectroscopie 13

1.3 La spectroscopie IR : 13

1.4 Onde électromagnétique 14

1.5 Principe de travaille le spectrometre 15

1.6 Oscillateurs harmonique classique 15

1.7 Conservation de l'énergie 16

1.8 Oscillateurs harmonique quantique 16

1.9 Méthode des opérateurs a 1D 17

1.10 Quantification d'un oscillateurs Harmonique 17

1.11 Déterminer les fonctions de l'oscillateur harmonique 19

1.12 Conclusion 19

A Les fonction d'ondes de OH extrait par mathematica **20**

2 La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité DFT **22**

2.1 Bref historique 22

2.2 Principe générale 23

2.3 La densité 23

2.4 Formalisme de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité 23

2.4.1 Les théorèmes de Hohenberg-Kohn 23

2.4.1.1 théorème 1 24

2.4.1.2 théorème 2 24

2.4.2 Les equations de kohn-sham 25
2.5 Approximation de la fonctionnelle d'échange et corrélation 26
2.5.1 Approximation locale de la densité LDA 26
2.5.2 Approximation de la densité locale spin 27
2.5.3 Approximation du gradient généralisé GGA 27
2.5.4 Approximation hybride 27
2.5.5 Le cycle auto-cohérent SCF 28

3 Technique expérimentale 31
3.1 Introduction 31
3.2 Spectromètre à transformée de Fourier (FT-IR) : 31
3.3 Spectromètre utilisé 32
3.4 Matériels utilisés 33
3.5 Produits utilisés 34
3.6 Méthode de préparation 34
3.6.1 Première étape 34
3.6.2 deuxième étape 35
3.6.3 Troisième étape 36
3.7 Conclusion 36

4 Résultats et discussion 38
4.1 Le logiciel gaussien 38
4.2 Optimisation géométrique 39
4.3 Propriétés géométrique 39
4.3.1 Les distances et les angles et les angles de torsion calculer par le programme gaussien : 39
4.4 Propriétés électroniques 42
4.4.1 L'energie de gap 42
4.5 Représentation du Potentiel électrostatique moléculaire (MEP) 47
4.6 Les propriétés vibrationnelle 48
4.6.1 Spectre IR expérimentale 48

4.7 Attribution des modes de vibration 48
4.8 Les fréquences et les intensités calculés par gaussien 49
4.9 conclusion 57

Table des figures

1.1 propagation d'un onde électromagnétique 14

A.1 La fonction d'onde de l'etat fondamentale de OH 20

A.2 La fonction d'onde pour n=1 20

2.1 système réelle et fictif 25

3.1 Système de interféromètre de Michelson 32

3.2 Le spectromètre utilisé dans notre travail 32

3.3 Matériels utilisé 33

3.4 échantillons utilisés 34

3.5 Le spectromètre utilisé dans notre travail 35

3.6 Le spectromètre utilisé dans notre travail 36

4.1 molécule de menthol 39

4.2 orbitales LUMO HOMO et leur énergies 43

4.3 HOMO+1 44

4.4 HOMO+2 45

4.5 HOMO+3 45

4.6 HOMO+4 45

4.7 LUMO+1 46

4.8 LUMO+2 46

4.9 LUMO+3 46

4.10 LUMO+4 47

4.11 Potentiel électrostatique moléculaire (MEP) a)Région vert : neutre b)Région rouge : Le site contient un nombre important des électrons , c) Région bleu : Le site contient un petit nombre d'électrons, d) Région jaune : le site est médiocre en électrons 47
4.12 2eme part de spectre 48
4.13 Vibration O-H 52
4.14 Vibration C-H 53
4.15 Vibration C_{sp3}-H 53
4.16 Vibration déformation C_{sp3}-H 54
4.17 Vibration C-O-H 54
4.18 Vibration C-C-O 55
4.19 vibration C-C-H 55
4.20 Vibration C-C-C 56

Liste des tableaux

4.1 Longueurs de liaison (Å) calculées par la DFT et de l'expérience. 40
4.2 Les angles de liaison (°) calculées par la DFT et de l'expérience. 41
4.3 Les angles de torsion calculées par la DFT et de l'expérience 42
4.4 Les énergies relatives au orbitales atomiue 44
4.5 Les Attribution des modes de vibration 49
4.6 Les fréquences et les intensités calculés par Gaussien. 51

Introduction générale

Une branche importante de la chimie vise à explorer la matière pour atteindre des résultats importants pour des applications dans des domaines tels que la médecine, l'industrie alimentaire, etc. Les matériaux étudiés sont en général des composés organiques carboniques qui contiennent des carbones ou inorganiques comme l'eau et les selle[1].
Le travail présenté dans ce mémoire porte sur l'étude des propriétés structurales, électroniques vibrationnelles d'un composé organique, il s'agit de la molécule du menthol. Nous avons choisi cette molécule en raison de sa grande importance biologique, car elle joue un rôle vital comme un anesthésique local pour soulager des maux et douleurs mineures telles que des crampes musculaires, entorses, migraines et soulagement à de la gorge endolorie.
Il peut également être ajouté dans les sodas et les produits de beauté [2].

Dans ce travail, nous avons étudié cette molécule théoriquement et expérimentalement .Les calculs théoriques par la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) ont été effectué à l'aide du code gaussien, et la partie expérimentale a été effectué par la spectroscopie infrarouge.
Trois principales études ont été effectués par la combinaison des calculs DFT et l'expérimentale

— Etude de la propriété structurale.

— Etude de la propriété électronique.

— Etude de la propriété vibrationnelle.

Ce travaille est divisé en quatre chapitres :

•Dans le premier chapitre, nous avons présenté toutes les théories et hypothèses qui sous-tendent la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT).

• Dans le deuxième chapitre : nous avons présenté les notions théoriques des ondes électromagnétiques. Nous avons, aussi parlé de la technique expérimentale utilisée dans

l'étude, qui est la spectroscopie infrarouge IR.

• Dans le troisième chapitre : nous avons définir les différents appareils, instruments et les produits utilisés dans notre travail, et on a présenté en détail les différentes étapes expérimentales pour enregistrer le spectre IR de menthol.

• Dans le quatrième chapitre , nous avons présenté les différents résultats théoriques et expérimentaux qui concernent les propriétés structurales électroniques, vibrationnelles de menthol.

• Enfin, Nous avons terminé ce travaille par une conclusion générale résumera les principaux résultats obtenus.

Bibliographie

[1] Mihoubi .I, ≪Étude des propriétés spectroscopiques, électroniques et mécaniques du L-Acide glutamique ≫, Mémoire de Master, université de Médéa,2021.

[2] ://www.techno-science.net/glossaire-definition/Menthol.html

Chapitre 1

Spectroscopie IR

1.1 Introduction

La spectroscopie infrarouge est une technique très utilisée dans les domaines académique et Industrielle et aussi pour caractériser des matériaux micro-électronique, semi conducteurs et les composantes organiques .dans ce chapitre on va voir les principes théorique sur lesquelles la théorie de l'IR est construite.

1.2 Définition la spectroscopie

La spectroscopie moléculaire est basée sur le traitement des rayonnements électromagnétique émit ou absorbées après l'interaction avec la matière [1].

1.3 La spectroscopie IR :

Lorsque les rayons infrarouges sont projetés sur une molécule, le champ électrique des rayons IR interagi avec le champ électrique généré par un moment dipolaire. L'énergie absorbée est quantifie comme ça se montre dans l'équation.

$$E_n = (n + \frac{1}{2})h\nu_0 \tag{1.1}$$

— n :nombre entier

— h : constante de Planck. h = 6.62.10-34J.s.

— ν_0 : la fréquence caractéristique d'un mode normal particulier.

Après la molécule absorbe l'´energie absorbée va transformer l'´energie de la molécule d'un niveau vibratoire inferieur 'a un niveau vibratoire supérieur [2].

$$E_n = |h\nu_{inc} - h\nu_{emit}| \tag{1.2}$$

— ν_{inc} :La fréquence de photon absorbée

— ν_{emit} :La fréquence de photon émis

l'énergie émise peut être enregistré par un détecteur sensible. Ces donnée sont ensuite enregistrer sur un le spectromètre qui donne une image du spectre infrarouge. Le spectre enregistrer sera traitée par les physiciens, chimiste ou biologiste.

1.4 Onde électromagnétique

Une onde électromagnétique est consisté d'un champ et d'un champ magnétique oscillant à la même fréquence. Les deux champs sont perpendiculaires l'un par rapport a l'autre et se propagent dans un milieu selon une direction orthogonale.

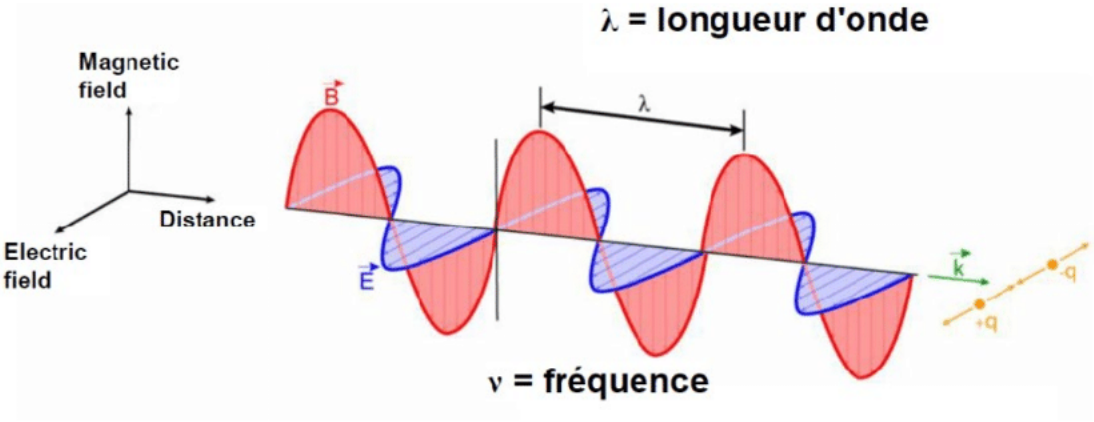


FIGURE 1.1 – propagation d'un onde électromagnétique

le champ électrique et magnétique a une forme sinusoïdale [3].

le champ électrique

$$\vec{E} = E_0 \sin(2\pi\nu t - Kx) \tag{1.3}$$

le champ magnétique

$$\vec{B} = B_0 \sin(2\pi\nu t - Kx) \tag{1.4}$$

— E_0 et B_0 sont des amplitudes

1.5 Principe de travaille le spectrometre

le spectromètre peut mesuré les intensité des rayonnement absorbée ou transmise qui transverse un échantillon dans n'importe état physiques. n'obtient une graphe présente absorbance ou transmittance de rayonnement en fonction du la fréquence [4] L'absorbante mesure la capacité d'un milieu a absorber la lumière qui le traverse. On traduit ce dessin avec cette relation :

$$A(\lambda) = \ln(\frac{I_0(\lambda)}{I(\lambda)}) = -\ln(T) \tag{1.5}$$

— A : l'absorbante.

— T : transmittance.

— I : intensité du faisceau transmis.

— I_0 :intensité du faisceau incident.

1.6 Oscillateurs harmonique classique

Le oscillateur harmonique (OH) est un système tr‘es important car l'hamiltonien de l'´equation intervient dans presque tout les problèmes de la physique. un exemple peut être donnée c'est les oscillations tels que les vibrations moléculaire dans le cristal [5].

$$V_{Epe}(x) = \frac{1}{2}kx^2 \tag{1.6}$$

$$F = -kx \tag{1.7}$$

$$F = ma \tag{1.8}$$

$$\ddot{x} + \frac{k}{m}x = 0 et w = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{1.9}$$

donc :

$$\ddot{x} + w^2 x = 0 \tag{1.10}$$

la solution de cette equation :

$$x = x_{\max} \sin(wt + \varphi) \tag{1.11}$$

1.7 Conservation de l'énergie

$$T = \frac{p^2}{2m} = mv = m\frac{dx}{dt} \tag{1.12}$$

Hamiltonien est :

$$H = T + V_{Epe} \tag{1.13}$$

après simplification nous obtenons :

$$H = E = \frac{m}{2}X^2\omega^2 \tag{1.14}$$

L'énergie totale est indépendante du temp donc le système de oscillateurs harmonique Classique est conservatif.

1.8 Oscillateurs harmonique quantique

Hamiltonien en mécanique quantique est :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{1.15}$$

avec $p = ik\frac{\partial}{\partial x}$

x et p sont des observables de la position et l'impulsion.

1.9 Méthode des opérateurs a 1D

En utilisant l'opérateur réduit :

$\hat{\hat{p}} =$: opérateur de l' impulsion

$$\hat{\hat{p}} = \frac{p}{\sqrt{m\hbar}} \rightarrow p = \hat{\hat{p}}\sqrt{m\hbar w} \tag{1.16}$$

$\hat{\hat{\varphi}}$: opérateur de déplacement.

$$\hat{\hat{\varphi}} = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}}x \rightarrow x = \sqrt{\frac{\hbar}{mw}}\hat{\hat{\varphi}} \tag{1.17}$$

et $[\hat{\hat{\varphi}}, \hat{\hat{p}}] = i$ On remplace p et x dans Hamiltonien après simplification nous obtenons :

$$H = \frac{\hbar w}{2}(\hat{\hat{p}}^2 + \hat{\hat{\varphi}}^2) \tag{1.18}$$

1.10 Quantification d'un oscillateurs Harmonique

On introduit les opérateur a et a^+ :

— a : opérateur d'annulation

$$a = \frac{\hat{\hat{\varphi}} + i\hat{\hat{p}}}{\sqrt{2}} \tag{1.19}$$

— a^+ :opérateur de création

$$a^+ = \frac{\hat{\hat{\varphi}} - i\hat{\hat{p}}}{\sqrt{2}} \tag{1.20}$$

La relation de commutation fondamentale : [a,a^+] = 1

N=le nombre quanta

$$N = a.a^+ \tag{1.21}$$

$$= \frac{1}{2}(\hat{\hat{\varphi}} - i\hat{\hat{p}})(\hat{\hat{\varphi}} + i\hat{\hat{p}}) \tag{1.22}$$

$$= \frac{1}{2}\{\hat{\hat{\varphi}}^2 - i\hat{\hat{p}}\hat{\hat{\varphi}} + i\hat{\hat{\varphi}}\hat{\hat{p}} - i^2\hat{\hat{p}}^2\}$$

$$= \frac{1}{2}\{\hat{\varphi}^2 + \hat{p}^2 + i(\hat{\varphi}\hat{p} - \hat{p}\hat{\varphi})\}$$

$$= \frac{1}{2}\{\hat{\varphi}^2 + \hat{p}^2 - 1\}$$

$$= \frac{1}{2}\{\hat{\varphi}^2 + \hat{p}^2\} - \frac{1}{2} \tag{1.23}$$

$$\frac{H}{\hbar w} = N + \frac{1}{2} \tag{1.24}$$

$$H = (N + \frac{1}{2})\hbar w \tag{1.25}$$

Les valeurs propre de N

$H\,|\phi_n\rangle = E_n\,|\phi_n\rangle$

N$|\phi_n\rangle = n\,|\phi_n\rangle\, etn \succeq 0$

H$|\phi_n\rangle$ =(n+$\frac{1}{2}$)$\hbar w\,|\phi_n\rangle$

E$|\phi_n\rangle$ =(n+$\frac{1}{2}$)$\hbar w\,|\phi_n\rangle$

Donc le spectre d'enegie de OH 'a 1 D donn´e par :

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \tag{1.26}$$

Détermination des fonctions de l'oscillateur harmonique

$E_0 = \frac{\hbar w}{2}$

$E_1 = \frac{3\hbar w}{2}$

$E_{2=}\ \frac{5\hbar w}{2}$

$\phi_n(x) = \langle x|\ \phi_n\rangle$

a$|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$

$a^+\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$

les opérateur a et a^+ sont appelées opérateurs d'échelle car ils permettent de descendre et monter les états

1.11 Déterminer les fonctions de l'oscillateur harmonique

$$|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}(a^+)^n|\phi_n\rangle \tag{1.27}$$

La fonction d'onde de l'état fondamentale de OH pour n=0 est

$$\phi_0(x) = (\frac{mw}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}} Exp(-\frac{mw}{2\hbar}x^2) \tag{1.28}$$

La fonction d'onde normalisée de l'état fondamentale cette fonction représente une fonction gaussienne

pour n=1

$\phi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{1!}}a^+\phi_0(x)$

$\phi_1(x) = \frac{-mw}{\hbar}xExp(-\frac{mw}{2\hbar}x^2)$

1.12 Conclusion

Ce chapitre présente la base des notions de théorique de la spectroscopie infrarouge On déduire que cette technique est tr'es utilisé pour étudie les caractéristique vibrationnelle et d'identifier les types moléculaire et ses liaisons .

Annexe A

Les fonction d'ondes de OH extrait par mathematica

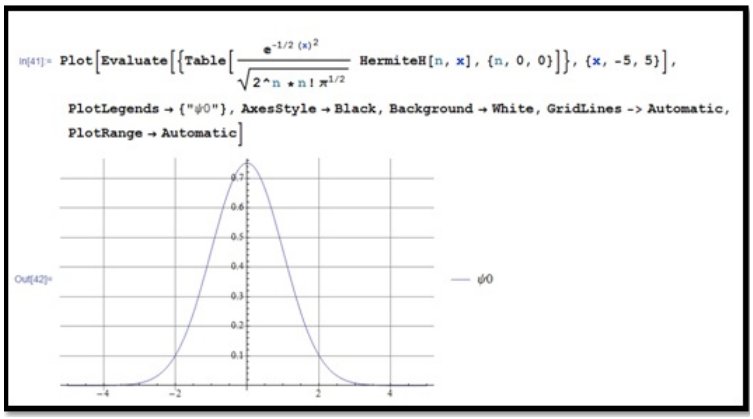


FIGURE A.1 – La fonction d'onde de l'etat fondamentale de OH

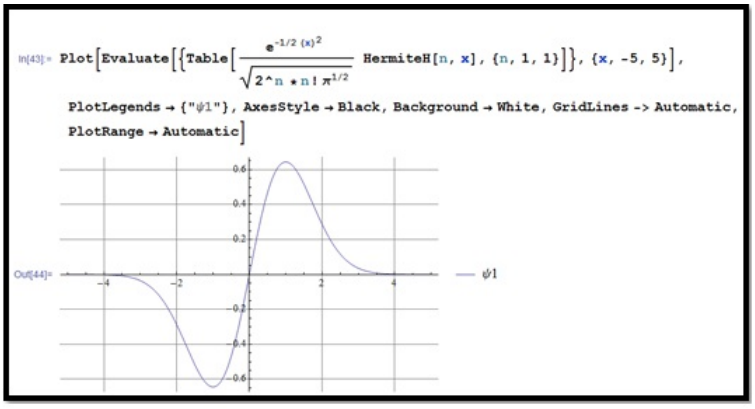


FIGURE A.2 – La fonction d'onde pour n=1

Bibliographie

[1] GHORZI. W, « Elaboration d'un réseau de polymère acrylique par photo polymérisation UV : caractérisation par spectroscopie infrarouge, et suivi de la cinétique de gonflement dans des solvants », Mémoire de Master, Université de Tlemcen, (2014).

[2] dehbaoui .mourad , « nano matériaux et nano technologie ,cour » ,université de Médéa.

[3] .M, « Applicateurs destinés aux études d'effets biologiques des ondes électromagnétiques sub-nanosecondes », Thèse de doctorat, Université de Limoges ,2015.

[4] Mihoubi .I, «Étude des propriétés spectroscopiques, électroniques et mécaniques du L-Acide glutamique », Mémoire de Master, université de Médéa,2021.

[5] zagho.N , « mécanique quantique 2 ,cour et exercices » , université de Médéa.

Chapitre 2

La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité DFT

La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité ou DFT forme aujourd'hui l'une des méthodes les plus utilisées dans les calculs quantiques , du fait que la théorie est base sur le concept de la densité électronique. C est une théorie efficace pour calculer la structure électronique des atomes, des molécules et des solides. D'une façon générale son objectif est la compréhension quantitative des propriétés des matériaux à partir des lois fondamentales de la mécanique quantique.

2.1 Bref historique

Le modèle développé par Llewellyn Thomas et Enrico Fermi à la fin des années 1920 est l'origine de La DFT .Cependant il faudra attendre les travaux de Hohenberg, walter kohn et Lu Sham pour établi le formalisme théorique sur lequel repose la méthode actuelle.[2] il y a trois contributions importantes et approximations qui ont eu lieu dans cadre de cette théorie

— Approximation de Oppenheimer.

— La contribution de l'énergie de Hartree .

— Le terme d'échange correctif par Hartree Fock .

2.2 Principe générale

En principe la DFT remplace la fonction d'onde électronique par la densité électronique en tant que quantité de base pour les calculs. Dans ce cas, la fonction d'onde multiélectronique dépend de 3N variables sera remplacée par la densité électronique qui est en fonction de trois variables. Cette quantité peut être traitée mathématiquement plus facilement afin de résoudre l'équation de Schrödinger .

2.3 La densité

La densité est le nombre d'électron par unité de volume elle est décrite par trois variables, et elle est positif et on peut la mesurer expérimentalement par rayon X .

$$\rho(\vec{r}) = N \int \cdots \int |\psi(\vec{x_1}.....\vec{x_N})|^2 d\sigma_1\sigma_2 dr_1.....dr_N \tag{2.1}$$

— $\psi(\vec{x})$: la fonction d'onde électronique .

— $d\sigma$: les coordonnées de spin .

— dr : les coordonnées de l'espace .

2.4 Formalisme de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité

2.4.1 Les théorèmes de Hohenberg-Kohn

Tout les propriétés d'un system dans un état fondamental sont déterminés par sa densité .

2.4.1.1 théorème 1

:

« L'énergie totale d'un inhomogène en interaction gaz d'électrons en présence d'un le potentiel Vext(r) est une fonctionnelle de la densité »[1] .

Le premier théorème de hohenburg et kohn poser que le potentiel Vext [1] est complètement déterminé par la données de densité de l'état fondamental.

$$\rho(r) \leftrightarrow V_{ext}$$

2.4.1.2 théorème 2

:

Minimisation de l'énergie totale c'est a dire la fonction E(ρ) atteint sa valeur minimale lorsque la densité correspond a la $\rho_0(r)$ exacte.

$$\left.\frac{\partial E[\rho]}{\partial \psi}\right|_{\rho_0(\vec{r})} = 0 \tag{2.2}$$

Donc l'équation de l'énergie ressemblera à ceci :

$$E[\rho(\vec{r})] = F_{HK}[\rho(\vec{r})] + \int V_{ext}\rho(\vec{r})dr \tag{2.3}$$

F_{HK} : Fonctionnelle universelle de hohenburg et kohn

$$F_{HK}[\rho(\vec{r})] =< \psi|T + V_ext|\psi > \tag{2.4}$$

Cette fonction est imaginaire et pas pratique car il est impossible de le résoudre ou de trouver un moyen de le savoir [2].

1. V_{ext} : champ créé par les noyaux.

2.4.2 Les equations de kohn-sham

Une autre approximation a lieu sur le chemin , kohn et sham remplaçe le système interactif par un système fictif, ce qui signifie que les électrons agissent comme du gaz (modele de thomas et fermi)[3].

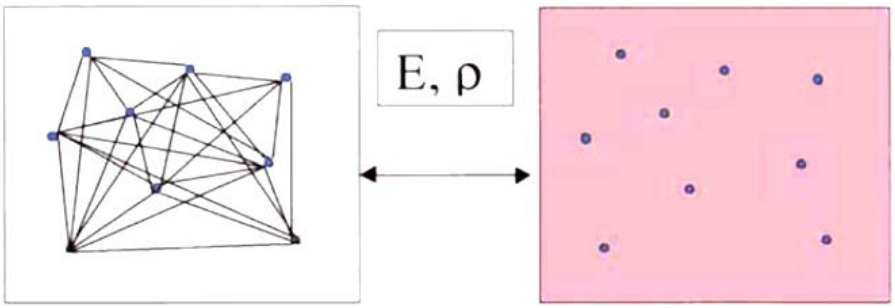


FIGURE 2.1 – système réelle et fictif

donc l'équation de l'énergie devrait être comme ça :

$$E[\rho(\vec{r})] = T_0[\rho(\vec{r})] + [V_{e-e}{}^{\text{classique}}[\rho(\vec{r})] + V_{ext}[\rho(\vec{r})]] + E_{XC}[\rho(\vec{r})]] \tag{2.5}$$

— T_0 : énergie cinétique des particules nom interagissant.

— $V_{e-e}{}^{\text{classique}}$: potentiel de hartree .

$$V_{e-e} = \frac{1}{2}\int\int \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r'})}{|\vec{r}-\vec{r'}|}drdr'$$

— E_{xc} : fonctionnelle d'échange et de corrélation .

$$E_{xc} = T[f(\vec{r})] - T_0[f(\vec{r})] + \left[V_{e-e}[f(\vec{r})] - \frac{1}{2}\int\int \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r'})}{|\vec{r}-\vec{r'}|}drdr'\right]$$

On peut exporter le potentiel correctif de la fonctionnelle

$$V_{XC} = \frac{\partial E_{xc}[f(\vec{r})]}{\partial f(\vec{r})} \tag{2.6}$$

L'équation de Schrödinger :

$$(H_{KS}(\vec{r}) - \xi_0)\,\phi_i(\vec{r}) = 0 \tag{2.7}$$

l'hamiltonien est composé de l'énergie cinétique classique et le V_{eff}

$$H_{KS}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{n} \frac{{\nabla_i}^2}{2} + V_{eff}(\vec{r}) \tag{2.8}$$

Et V_{eff} c'est la somme de :

$$V_{eff} = V_{ext} + V_H + V_{XC} \tag{2.9}$$

2.5 Approximation de la fonctionnelle d'échange et corrélation

2.5.1 Approximation locale de la densité LDA

Quand on dit qu'on est dans un système fictif on considère la densité comme elle d'un gaz d'électrons[3].
souvent la densité varie lentement en fonction de position donc on peut juger la densité par addition du facteur d'homogénéité [4].

$$E_{XC} = \int \rho(\vec{r})\xi_{XC}[\rho(\vec{r})]d\vec{r} \tag{2.10}$$

ξ_{XC} : Densité d'énergie (échange et corrélation) par particule d'un gaz d'électron homogène [5]

$$\xi_{XC}[n]^{\text{hom}} = \xi_X[n]^{\text{hom}} + \xi_C[n]^{\text{hom}} \tag{2.11}$$

— $\xi_C[\rho(\vec{r})] = \frac{-3}{4}(\frac{3}{\pi})^{\frac{1}{3}}[\rho(\vec{r})]^{\frac{1}{3}}$

— ξ_X : Estimer avec les calculés de Monte-Carlo.

Dans cette approximation, la nom localité de la densité est ne pas négligeable dans certains

cas ,et ce modèle reste déficient dans les systèmes inhomogènes .

2.5.2 Approximation de la densité locale spin

Cette approximation est Semblable à LDA, mais il est utilisé pour les systèmes magnétiques [].

$$E_{XC}{}^{\mathrm{lsda}}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r})\xi_{XC}{}^{\mathrm{hom}}[\rho_{\uparrow}(\vec{r}), \rho_{\downarrow}(\vec{r})]d^3\vec{r} \tag{2.12}$$

2.5.3 Approximation du gradient généralisé GGA

GGA prend on considération l'inhomogénéité de la densité [5]$\rho(\vec{r})$ a travers un gradient de $\rho(\vec{r})$

$$E_{xc}^{GGA}[\rho, \nabla\rho] = \int \xi_{xc}^{GGA}(\rho(r), \nabla\rho(r)) \tag{2.13}$$

ξ_{xc}^{GGA} paramétrée par :

perdew-burke-ernzerhof PBE

PBE échange :

$$E_x{}^{PBE} = \int \rho(\vec{r})\xi_x{}^{unif}[\rho]F_x(s)d\vec{r} \tag{2.14}$$

$F_x(s)$: facteur d'augmentation corrigeant la LDA dans limites densités

PBE corrélation :

$$E_c{}^{PBE} = \int \rho(\vec{r})[\xi_c{}^{unif}[\rho] + H]d\vec{r} \tag{2.15}$$

Le désavantage de cette approximation est la prédiction de l'énergie du gap est n'est pas précise et conduit à des erreurs importantes (supérieures à 1ev) [2].

2.5.4 Approximation hybride

Cette approximation est composé de approximation de HF et DFT

$$E_{xc}{}^{hyb} = E_{xc}{}^{LDA} + a_0(E_x{}^{HF} - E_x{}^{LDA}) + a_x(E_x{}^{GGA} - E_x{}^{LDA}) + a_c(E_c{}^{GGA} - E_c{}^{LDA}) \tag{2.16}$$

2.5.5 Le cycle auto-cohérent SCF

On peut résumer les étapes SCF comme suit :

1. densité d'essai (initiale).
2. calcule V_{xc}.
3. calcule le potentiel effectif KS.
4. résoudre l'équation de kohn sham.
5. calculer la nouvelle densité.
6. comparent la densité initiale avec la nouvelle densité.
7. exporter l'énergie minimale.

conclusion

dans ce chapitre on a essayé de faire un résumer sur la méthode de calcul ab initio la théorie de la fonctionnelle de la densité et bien précisé que cette méthode est le plus utiliser dans nos jour dans tout les domaines pars-qu'il la simplification de la complexité que autres méthodes comme il resoudre "the many body problem" , et des résultats clair et s'approche a les résultats expérimentales , et le temps de faire le calcul est limité.

Bibliographie

[1] HOHENBERG, P. et KOHN, W. J. P. R. Density functional theory (DFT). Phys. Rev, 1964, vol. 136, p. B864.

[2] SHOLL, David et STECKEL, Janice A. Density functional theory : a practical introduction. John Wiley & Sons, 2011.

[3] PARR, Robert G. Density functional theory. Annual Review of Physical Chemistry, 1983, vol. 34, no 1, p. 631-656.

[4] GROSS, Eberhard KU et DREIZLER, Reiner M. (ed.). Density functional theory. Springer Science & Business Media, 2013.

[5] PERDEW, John P., BURKE, Kieron, et ERNZERHOF, Matthias. Generalized gradient approximation made simple. Physical review letters, 1996, vol. 77, no 18, p. 3865.

Chapitre 3

Technique expérimentale

3.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est de préparer un échantillon pour étudier et expliquer toutes les procédures expérimentales et aussi de définir le matériel utilisé dans le travail.

3.2 Spectromètre à transformée de Fourier (FT-IR) :

Le spectromètre est un appareil utilisé pour collecter les données spectrales sur un spectre en mesurant l'intensité dans une gamme de fréquence ou nombre d'onde pour un échantillon préparée pour la mesure [1].

Le spectromètre consiste un système optique de deux miroirs M1 et M2 et un séparateur appelé interféromètre de Michelson.

Principe de travaille interféromètre : Michelson a utilisé un séparateur de faisceau, dans lequel une source lumineuse émet un faisceau (d'intensité I) vers le séparateur. Ce faisceau est divisé en deux faisceaux d'intensité I / 2. M1' représente l'image miroir M1 ; La ligne pointillée bleue représente un chemin hypothétique équivalent au vrai chemin de la lumière vers le miroir M1. La différence de longueur d des bras de l'interféromètre provoque une différence de marche entre les deux faisceaux de 2d.

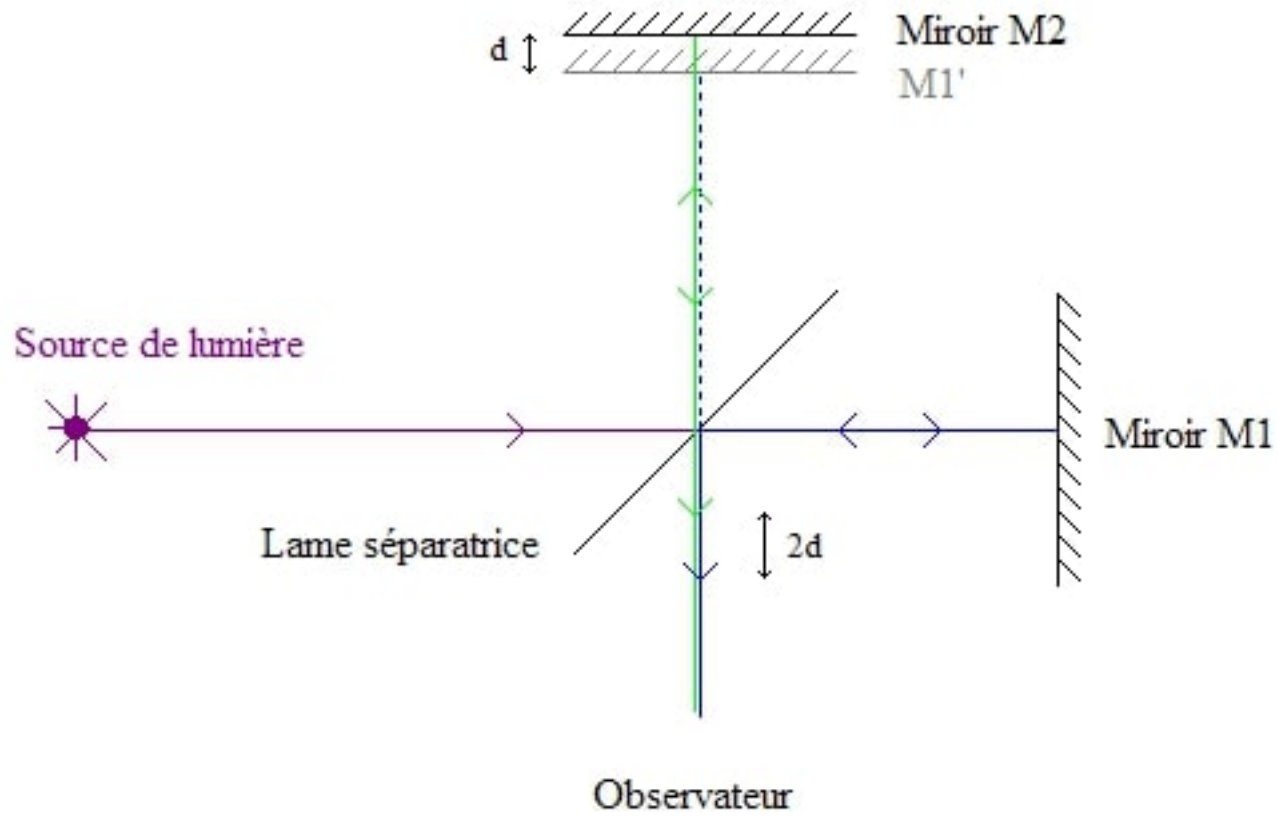


FIGURE 3.1 – Système de interféromètre de Michelson

3.3 Spectromètre utilisé

Nous avons utilisé dans notre expérience un spectromètre de type SHIMADZU- FTIR 8400. voir (figure3.2)



FIGURE 3.2 – Le spectromètre utilisé dans notre travail

3.4 Matériels utilisés

les outil utilisé dans notre travail sont représenter dans la figure3.3



FIGURE 3.3 – Matériels utilisé

(a) spatules

(b) Balance électronique

(c) mortier et pilon

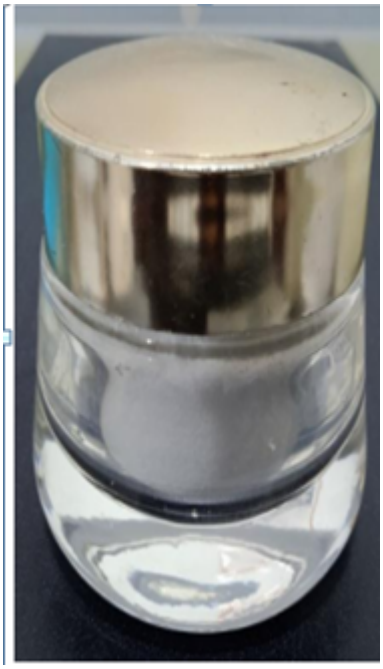
(d) Moules de pastillage

(e) porte d'échantillon

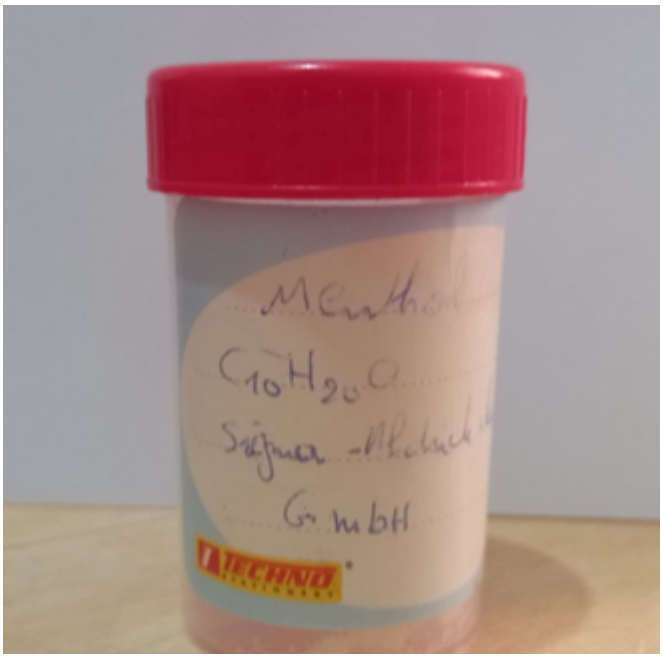
(f) un manomètre

3.5 Produits utilisés

Le produit que nous avons utilisé est le Menthol. (Voir la figure)3.4a3.4b



(a)



(b)

FIGURE 3.4 – échantillons utilisés

Menthol C10H20O sa masse molaire 156,265 2 ± 0,009 7 g/mol[2]. le bromure de potassium (KB r), sa masse molaire est 119.002 0.001 g/mol [Br 67.14%, K 32.86%][3].

3.6 Méthode de préparation

La préparation de l'échantillon est passée sur les étapes suivantes

3.6.1 Première étape

On met une quantité de 1% de Menthol solide dans un mortier et puis nous avons broyé cette quantité avec 99 du bromure de potassium (KBr) qui est connu pour sa transparence dans la gamme IR.

3.6.2 deuxième étape

Pour réaliser une bonne mesure, nous avons fabriqué une pastille. Cette dernière est mélangé et puis nous appliqué une pression de 60N pour réaliser une pastille voir la figure 3.5.

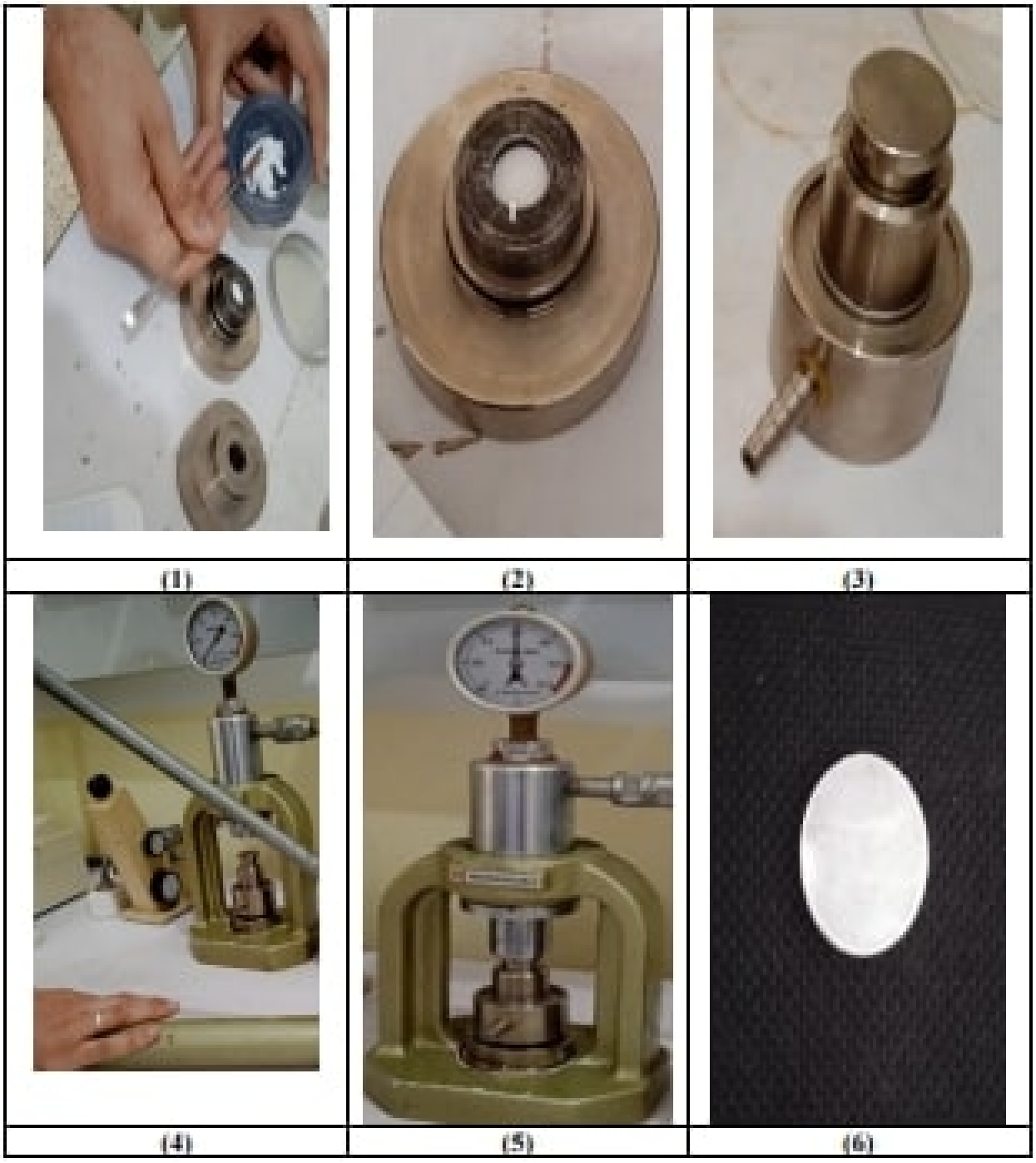


FIGURE 3.5 – Le spectromètre utilisé dans notre travail

3.6.3 Troisième étape

La pastille est placée dans le spectromètre pour enregistrer le spectre IR de l' échantillon 3.6



FIGURE 3.6 – Le spectromètre utilisé dans notre travail

3.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous résumé tous les procédures et les méthodes expérimentales suivies ainsi que le matériel utilisé pour préparer notre échantillon. Nous avons montré le principe de fonctionnement de spectromètre afin d'étudier notre molécules (étude des modes de vibrations). (Voir chapitre suivant Appendix 4).

Bibliographie

[1] MENET, Marie-Claude. Principes de la spectrométrie de masse. Revue francophone des laboratoires, 2011, vol. 2011, no 437, p. 41-53.

[2] WIESER, M. E. Atomic weights of the elements 2005. Journal of physical and chemical reference data, 2007, vol. 36, no 2, p. 485-496.

[3] BENALI. A, YKHELEF. K, « Spectroscopie vibrationnelle et propriétés optiques du D-fructose », Mémoire de master, Université de Médéa, (2020).

Chapitre 4

Résultats et discussion

Dans ce chapitre, on va présenter et discuter les résultats obtenus expérimentalement par la spectroscopie IR afin d'étudier les mode de vibration de la molécule menthol ($C_{10}H_{20}O$). [1], et on présentera aussi tous les résultats de calculs obtenu par les calcules DFT.ces résultats sont :

— Les distances entre les atomes de la molécule.

— Les angles et les angles de torsion entre les atomes de la molécule.

— Les énergies des orbitales atomique.

— Le spectre infrarouge capturé par le Spectromètre.

— Les résultats théorique de la fréquence et l'intensité par la DFT.

4.1 Le logiciel gaussien

Basé sur les lois fondamentales de la mécanique quantique, le programme Gaussian permet de prédire les énergies, les structures moléculaires optimisées et les fréquences vibrationnelles de systèmes moléculaires simples et complexes, et d'anticiper leurs propriétés physico-chimiques. Les molécules et les réactions peuvent être étudiées dans différentes conditions , non seulement pour des espèces stables ou des composés complexes, mais aussi pour des expériences non réalisable expérimentalement.[6]

4.2 Optimisation géométrique

L'optimisation géométrique est le processus de modification de la géométrie du system (les coordonnes atomiques et potentiellement, les vecteurs de réseau) pour minimiser l'énergie totale des systèmes[2], la structure moléculaire optimisée par la fonctionnelle RB3LYP et la base Gaussien 6-31G est représentée sur la figure 4.1

4.3 Propriétés géométrique

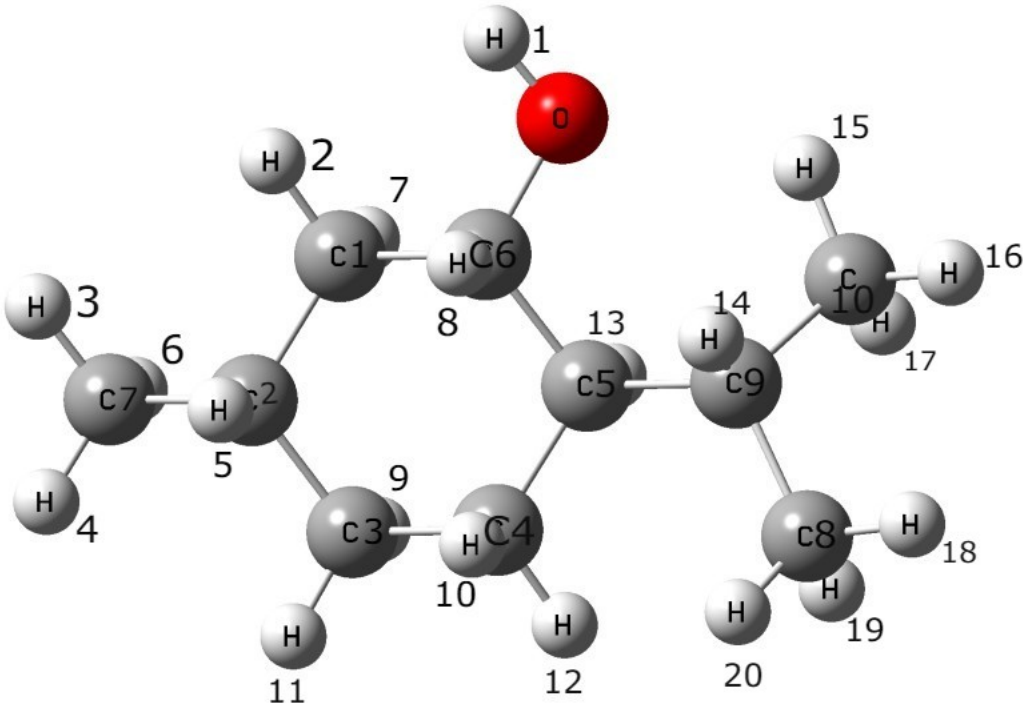


FIGURE 4.1 – molécule de menthol

4.3.1 Les distances et les angles et les angles de torsion calculer par le programme gaussien :

N	Distance (A°)	expérimental[3]	Calculs DFT (A°)	error relative %
1	C1-C2	1.523	1.534	1.15
2	C2-C3	1.527	1.534	0.45

N	Distance (A°)	expérimental[3]	Calculs DFT (A°)	error relative %
3	C3-C4	1.491	1.533	2.89
4	C4-C5	1.525	1.544	1.24
5	C5-C6	1.521	1.540	1.24
6	C6-O	1.434	1.432	0.13
7	C1-H2	1.013	1.098	8.39
8	C6-H6	1.061	1.103	3.95
9	C1-H7	0.886	1.097	23.81
10	C7-H3	1.070	1.094	2.24
11	C7-H4	1.070	1.094	2.24
12	C2-H5	0.984	1.099	11.68
13	C7-H6	1.070	1.095	2.33
14	C3-H9	1.011	1.098	8.6
15	C3-H11	1.103	1.095	0.72
16	C4-H10	0.928	1.098	18.31
17	O-H1	0.839	0.962	14.66

TABLE 4.1 – Longueurs de liaison (Å) calculées par la DFT et de l'expérience.

Nous pouvons voir la différence entre le calcul dft et l'expérience et cela se fait par une valeur relative appelée erreur relative qui est

$$Error\ relative = 100 \times \frac{valeurEx - valeurTh}{valeurEx}$$

À partir du tableau, nous pouvons trouver ces valeurs

— Une erreur relative moyenne de 5.24.

— Une erreur relative maximale est remarquer pour la longueur de liaison C1-H7 par 23.81.

— L'erreur relative la plus basse que nous avons calculée est 0.13 appartient à la liaison C6-O

De même , nous avons accomplir une comparaison entre les valeurs DFT des angles de liaison et des angles de torsion avec celles trouvées par l'expérience.

N	Angle(°)	expérimental [3]	Calculs DFT (°)	error relative

1	C1-C2-C3	108.174	109.017	0.77
2	C2-C3-C4	111.908	112.292	0.34
3	C3-C4-C5	112.885	113.178	0.25
4	C4-C5-C6	109.574	107.867	1.55
5	C5-C6-C1	111.992	112.465	0.42
6	C6-O-H1	109.407	107.593	1.65
7	H2-C1-C6	105.182	108.850	3.84
8	H7-C1-H2	101.775	106.594	4.73
9	H3-C7-H4	125.893	107.765	14.39
10	H4-C7-H6	95.551	107.707	12.72
11	C7-C2-H5	115.728	107.975	6.71
12	H9-C3-H11	100.882	106.444	5.51
13	H10-C4-H12	115.499	106.259	7.97
14	C5-C9-C10	112.937	111.837	0.97

TABLE 4.2 – Les angles de liaison (°) calculées par la DFT et de l'expérience.

ce tableau contient les valeurs des angles de liaison , on a constatée aussi que les résultats obtenus expérimentalement et ceux calculés par la DFT sont proches pour la plupart principalement , avec :

— Une erreur relative moyenne de 4.41 qui est le plus basse entre les trois mesures.

— Une erreur relative maximale est constatée pour l'angle de liaison H3-C7-H4 14.39.

— l'erreur relative la plus bas que nous avons calculée est 0.25 appartient à l'angle C3-C4-C5.

N	Angle de torsion(°)	expérimental[3]	Calculs DFT (°)	error relative
1	C1-C6-O-H1	63.127	56.187	10.99
2	H14-C9-C10-H15	-71.623	-62.542	12.67
3	H16-C10-C9-H14	174.580	177.194	1.49
4	H17-C10-C9-H14	65.493	58.596	10.53

5	H18-C8-C9-H14	177.298	177.927	0.35
6	H19-C8-C9-H14	-41.757	-63.594	1.53
7	H20-C8-C9-H14	72.114	56.188	22.08
8	H11-C3-C4-H12	64.165	58.125	9.41
9	H2-C1-C6-O	-65.268	-58.677	10.09

TABLE 4.3 – Les angles de torsion calculées par la DFT et de l'expérience

Les angles de torsion calcules par Gaussien sont proches de ceux extrait de l'expérience. avec :

— Une erreur relative moyenne de 8.79 qui est le plus élevé entre les trois mesures.

— erreur relative maximale de 22.08 correspond à l'angle de torsion H20-C8-C9-H14.

— l'erreur relative la plus bas que nous avons calculée est 0.35 appartient à l'angle H18-C8-C9-H14.

4.4 Propriétés électroniques

Dans cette partie et pour obtenir les propriétés électroniques on doit faire une simulation par le programme gaussien sur la molécule du menthol avec la méthode de la DFT. Pour ces calculs, on obtenu dans le fichier output l'énergie minimale de l'ordre de -462.6291 a.u (Hartree) ou -12588.78503 eV.

4.4.1 L'energie de gap

Le programme gaussien est capable de calculer les énergies des orbitales moléculaires, en particulier les orbitales HOMO et LUMO.

HOMO est la plus haute orbitale occupe d'un composé.

LUMO est les plus basses orbitales moléculaires inoccupées. Les énergies calculés sont :

EH= (44 : -0.36410 Hartree) ou (- 9.9076649 eV)

EL = (45 :-0.04125 Hartree) ou (-1.122469589 eV)

nous avons trouvé une énergie de gap

Eg= EH-EL= 0.322849999. (Hartree) ou 8,785195311 eV .

Ces orbitales moléculaires ainsi que l'énergie de gap sont représentés dans la figure 4.2.

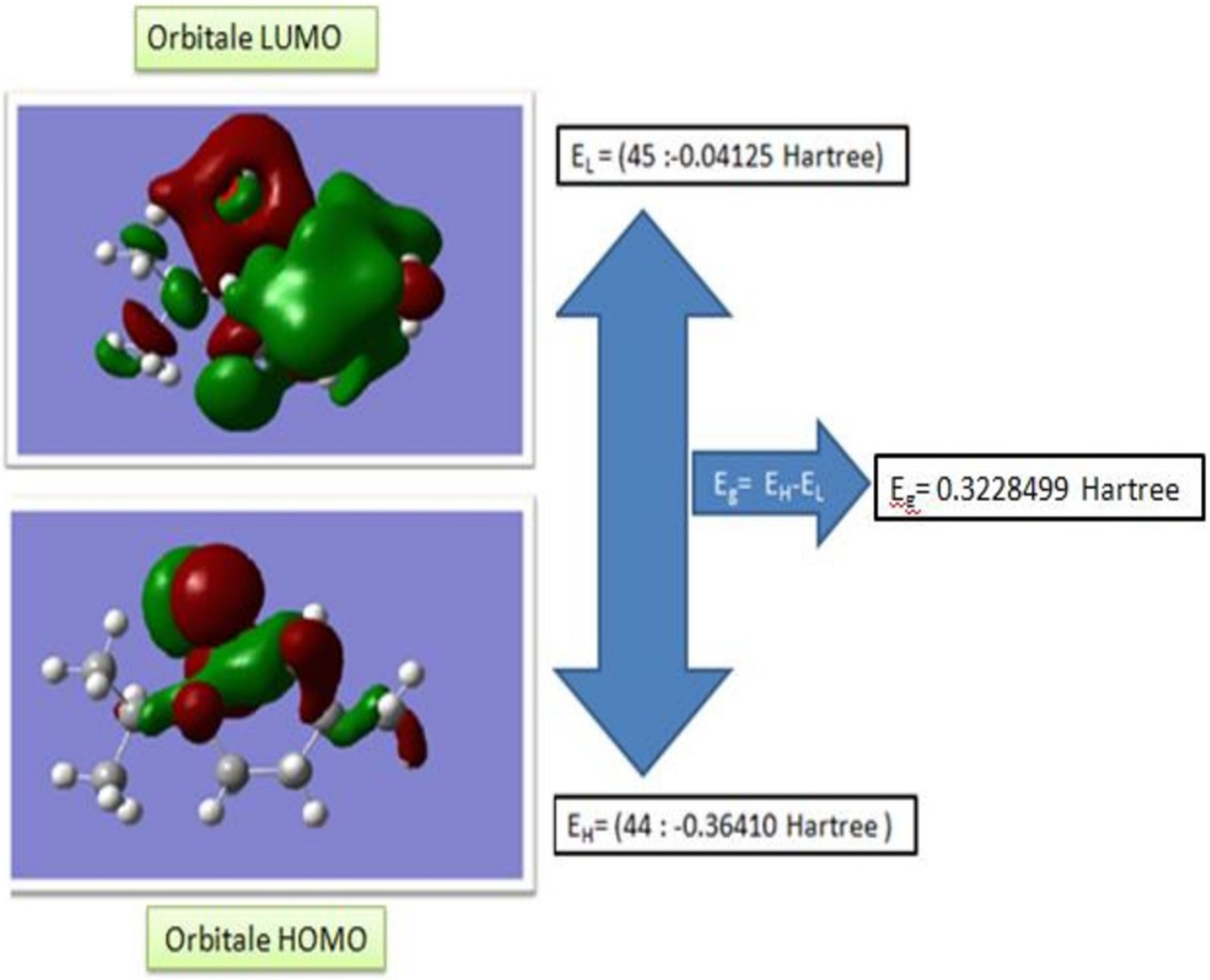


FIGURE 4.2 – orbitales LUMO HOMO et leur énergies

Le programme GAUSSIAN09 peut aussi calculés les énergies d'un très grand nombre des orbitales moléculaires ; comme montrer dans le tabeau suivant :

niveau	enegie(hartree)
49	0.00073

48	-0.01472
47	-0.02572
46	-0.03343
45	-0.04125
44	-0.36410
43	-0.40626
42	-0.42058
41	-0.42504
40	-0.42936

TABLE 4.4 – Les énergies relatives au orbitales atomiue

Les représentations de ces orbitales avec leurs énergies sont représentés dans les figure suivant :

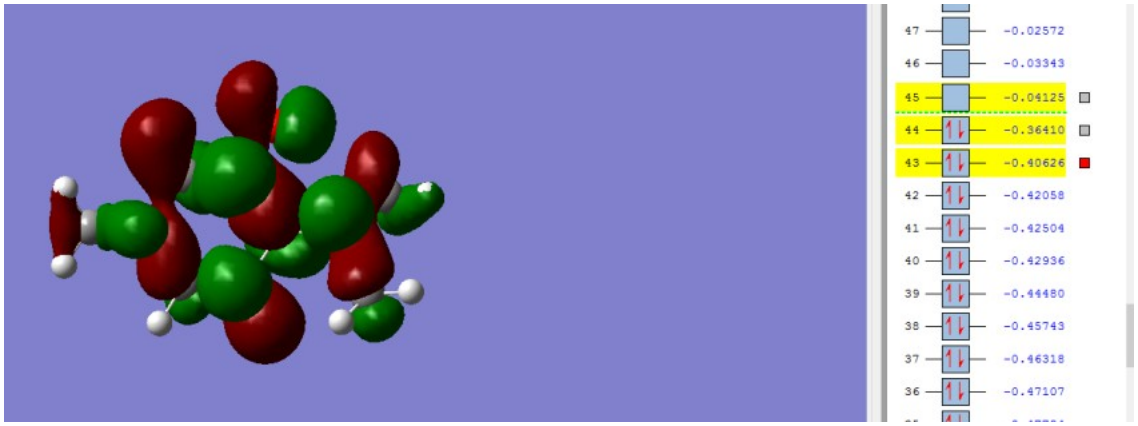


FIGURE 4.3 – HOMO+1

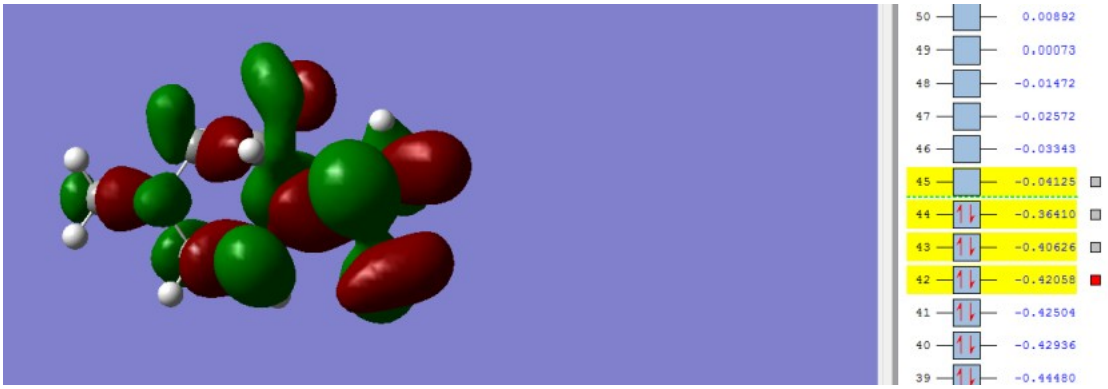


FIGURE 4.4 – HOMO+2

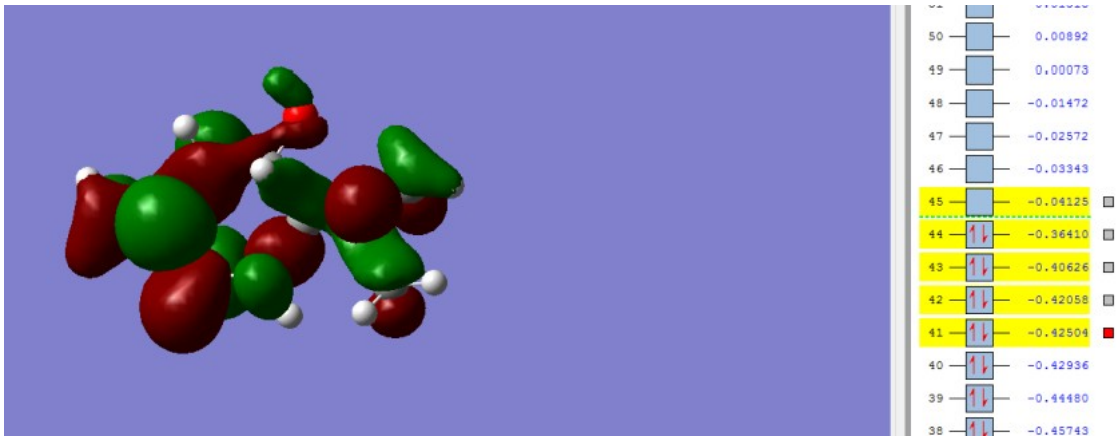


FIGURE 4.5 – HOMO+3

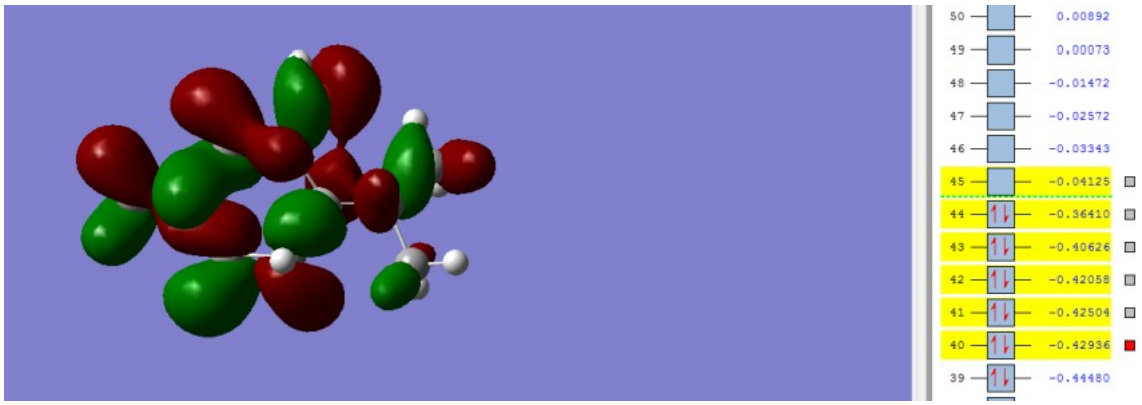


FIGURE 4.6 – HOMO+4

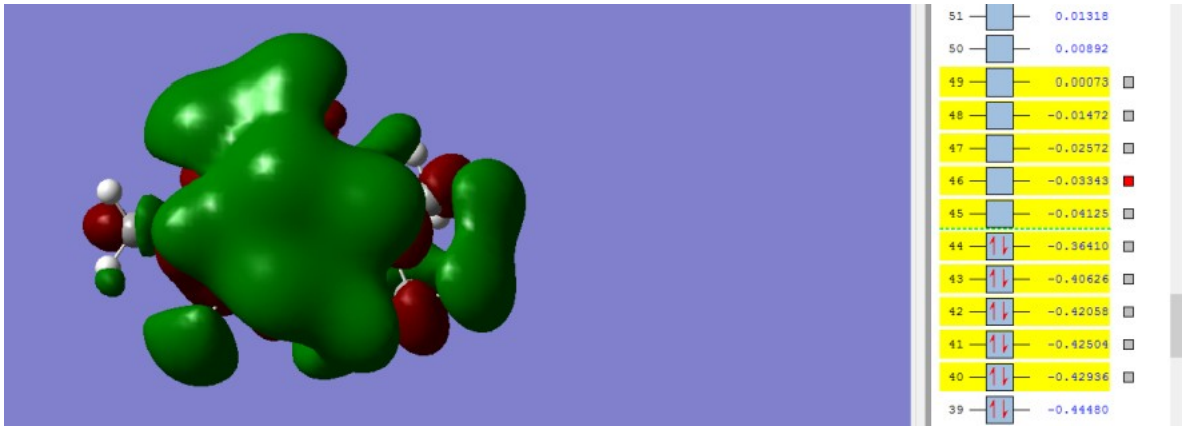


FIGURE 4.7 – LUMO+1

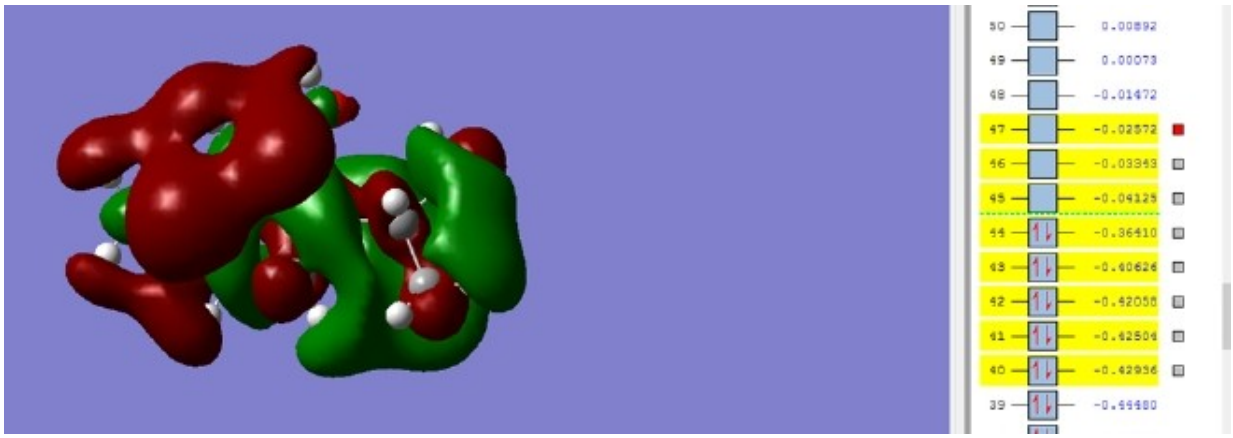


FIGURE 4.8 – LUMO+2

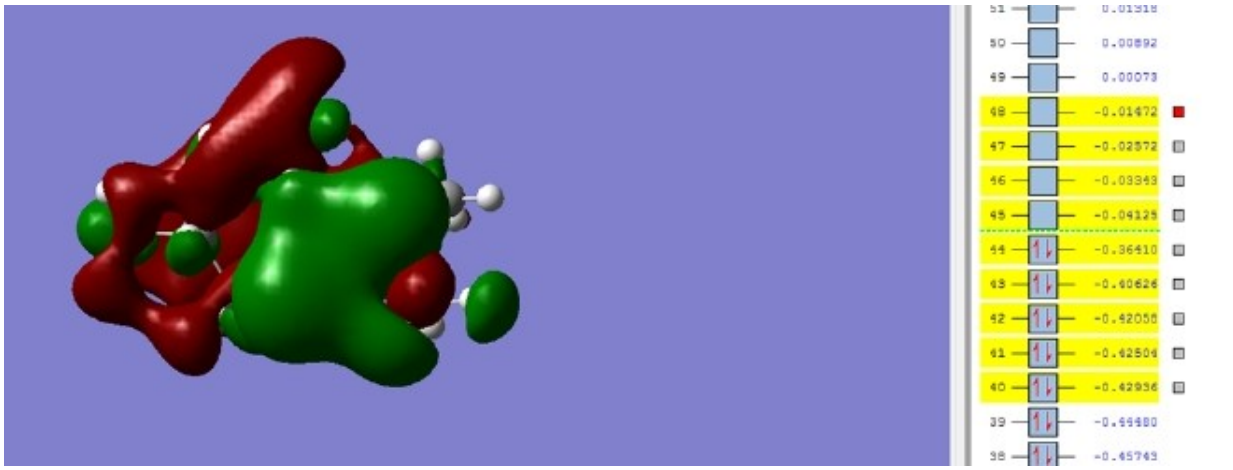


FIGURE 4.9 – LUMO+3

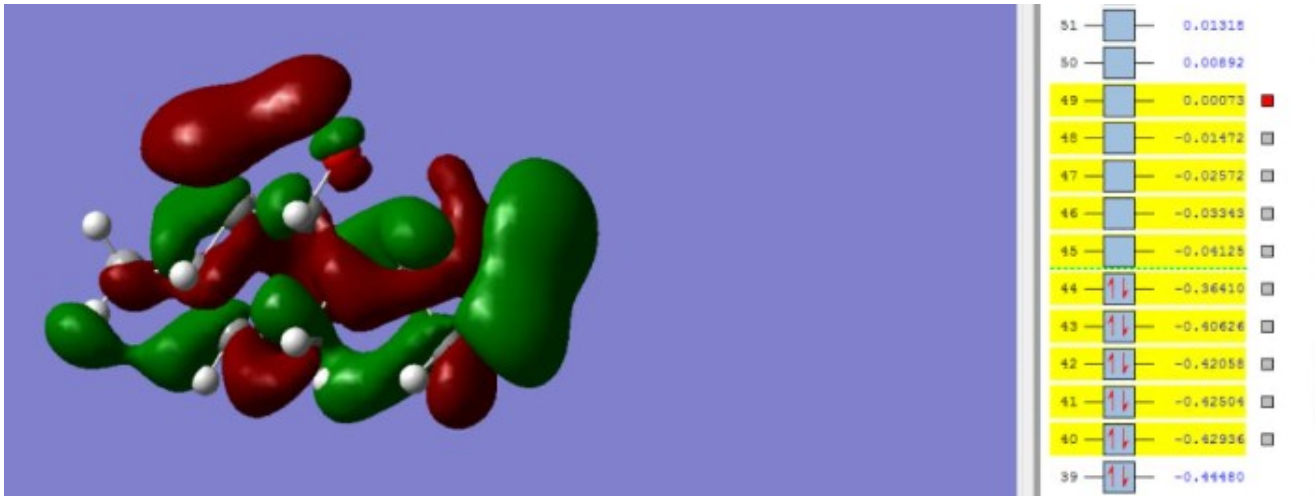


FIGURE 4.10 – LUMO+4

4.5 Représentation du Potentiel électrostatique moléculaire (MEP)

Le MEP et la densité électronique joue le même rôle Quand cela vient à la identification et la détection des sites pour des réactions des composés chimique , comme les interactions de liaison hydrogène par exemple [4]. Le potentiel électrostatique moléculaire a été apprécier en utilisant la méthode B3LYP 6-31G figure 4.11

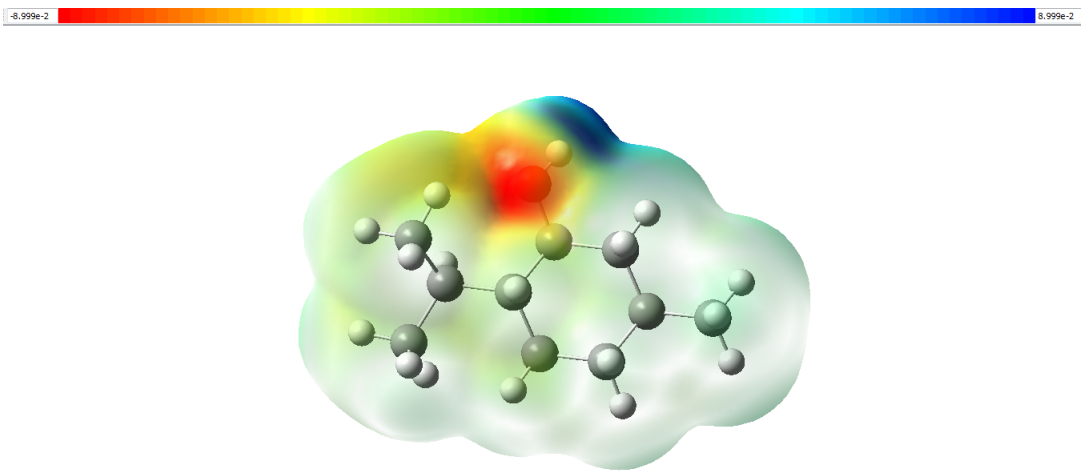


FIGURE 4.11 – Potentiel électrostatique moléculaire (MEP) a)Région vert : neutre b)Région rouge : Le site contient un nombre important des électrons , c) Région bleu : Le site contient un petit nombre d'électrons, d) Région jaune : le site est médiocre en électrons

4.6 Les propriétés vibrationnelle

4.6.1 Spectre IR expérimentale

la molécule de Menthol a été introduit dans le spectromètre de type (FTIR- 8400) pour enregistrer un spectre infrarouge a la température ambiante dans la région 400cm-1 4000cm-1 . le spectre du l'absorbance en fonction du nombre d'onde est représenté dans la figure (54).

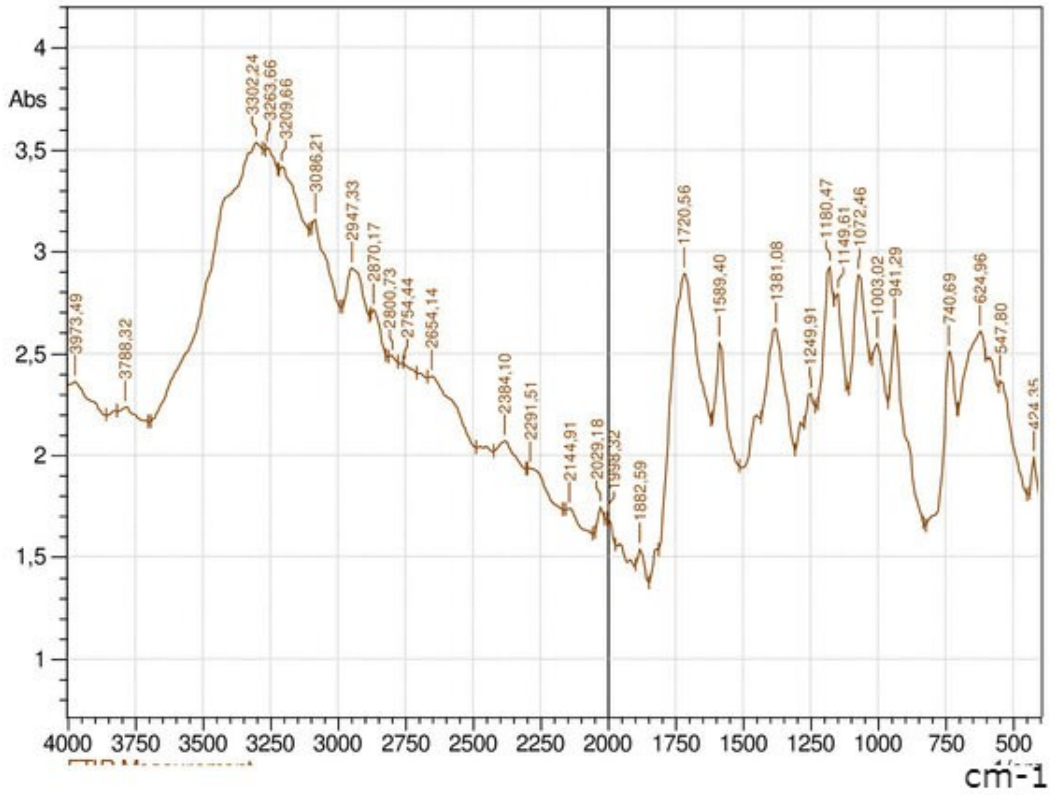


FIGURE 4.12 – 2eme part de spectre

4.7 Attribution des modes de vibration

la molécule de menthol est non linaire et possède de 31atomes, ce qui donne 3n-6=3*31-6=87, donc87 modes de vibration .Dans le spectre : on ne peut pas observer tous les modes car ils sont regroupés dans des bandes larges. On va interpréter le spectre en utilisant les résultats des calculs DFT.

N	Fréquences Exp (cm^{-1})	AMV[5]	AMV [5]
1	3302.24	3370	d'élongation (O-H)
2	3263.66	3369	d'élongation (O-H)
3	3209.66	3369	d'élongation (O-H)
4	2947.33	2954	d'élongation (C_{sp3}-H)
5	2870.17	2871	d'élongation (C-H)
6	2800.73	2857	d'élongation (C_{sp2}-H)
7	1720.56	1714	déformation β (C-O-H)
8	1589.40	1470	déformation (CH_3)
9	1381.08	1381	déformation $\alpha(CH_3)$ déformation β (C-C-H)
10	1249.91	1244	déformation β (C-C-H)
11	1180.47	1185	déformation β (C-C-H)
12	1149.61	1144	déformation β (C-C-H)
13	1072.46	1073	déformation β (C-C-H)
14	1003.02	997	déformation β (C-C-H)
15	941.29	953	déformation β (C-C-H) déformation αCH_3
16	740.69	768	déformation β (C-C-H)
17	547.80	559	déformation γ (C-C-C) déformation γ (C-C-O)
18	424.35	417	déformation γ (C-C-C)

TABLE 4.5 – Les Attribution des modes de vibration

— α vibrations de déformation des angles H-C-H.

— β vibrations de déformation des angles C-C-H, C-O-H.

— γ vibrations de déformation des angles C-C-C, C-C-O.

4.8 Les fréquences et les intensités calculés par gaussien

.	fréquence ($cm^{-}1$)	IR intensité	.	fréquence	IR intensité
1	34.32	0.0447	47	1322.6062	14.8697
2	74.89	0.1090	48	1343.0039	0.5933
3	146.6354	0.7031	49	1346.4703	1.1336

4	196.9976	0.5719	50	1365.0906	4.0350
5	212.8065	1.1642	51	1374.7121	3.6060
6	228.7563	0.3498	52	1375.4162	0.3577
7	239.1358	0.1006	53	1386.1390	16.6314
8	270.6450	13.7022	54	1395.8609	5.6898
9	284.6147	1.5259	55	1400.7785	4.6573
10	293.7656	65.0292	56	1413.0313	1.8451
11	307.5782	21.7414	57	1421.9095	7.3312
12	328.6705	2.3586	58	1434.7919	6.5364
13	343.4989	4.7273	59	1483.0474	0.3931
14	405.6974	1.2137	60	1490.1203	9.9450
15	426.0861	0.3790	61	1491.3141	4.6413
16	455.7965	0.1661	62	1495.8732	0.8234
17	467.0783	2.4360	63	1501.2174	10.8196
18	494.1777	5.9715	64	1502.1102	3.9073
19	522.4177	5.7815	65	1505.0459	1.5119
20	565.6095	2.4800	66	1510.1091	2.3750
21	778.4481	0.6237	67	1524.4549	11.6169
22	829.9678	0.8790	68	2934.1093	29.3859
23	850.2337	2.8759	69	2978.1925	10.5955
24	884.9478	6.4034	70	2981.2593	0.8093
25	927.0915	0.6103	71	2989.8751	20.1412
26	932.4994	2.2458	72	2993.8430	41.2950
27	935.5136	0.4275	73	2996.3812	3.2048
28	961.4318	2.0532	74	3004.5369	61.8582
29	972.7245	0.9586	75	3013.2237	31.6984
30	990.7681	6.5498	76	3016.3764	48.9260
31	1009.1336	9.5610	77	3020.4820	47.0615

32	1033.6704	37.6103	78	3035.9027	38.1236
33	1062.7451	27.5439	79	3044.3411	60.2103
34	1071.5501	2.7997	80	3065.3241	20.2007
35	1082.3135	4.4832	81	3076.7061	65.9780
36	1103.3252	0.6039	82	3077.2845	49.1449
37	1126.6040	12.7173	83	3081.5306	50.4573
38	1148.9508	1.2997	84	3081.7370	46.0520
39	1177.2809	1.9279	85	3096.5641	37.3161
40	1188.5299	19.5248	86	3148.9816	5.4561
41	1196.2918	5.9224	87	3824.5580	16.0853
42	1240.0814	20.9344	.	.	.
43	1266.1721	3.4897	.	.	.
44	1282.0739	13.2625	.	.	.
45	1301.5696	2.5459	.	.	.
46	1319.4624	4.6544	.	.	.

TABLE 4.6 – Les fréquences et les intensités calculés par Gaussien.

Vibration O-H : Cette mode de vibration d'élongation est se situe entre 3000cm-1 et 3900 cm1 et avec un large pic , on le voit bien dans le spectre fig4.13.

Vibration C-H : Dans le molécule menthol La liaison C-H est representer dans le spectre par deux types de vibration : le mode de vibration d'élongation C-H situé dans la gamme 2800 cm-1 - 3150cm-1 on va trouver carbone hybridé sp C-H fig4.14.

carbone hybridé sp2 C_{sp2}-H.

carbone hybridé sp3 C_{sp3}-H4.15.

le mode de vibration déformation C-H situé dans la gamme 1470 cm-1 - 1334cm-1 et il réapparaît dans 953cm-1 [5] fig4.16.

Vibration C-O-H : la vibration de deformation d'angle C-O-H Elle nous est apparue dans un seul pic 1720.56 cm-1 fig 4.17.

Vibration C-C-O : La liaison simple de déformation est représenter a une gamme situé entre 500cm-550cm-1 fig 4.18.

vibration C-C-H : cette mode de vibration de deformation est orienté dans le domaine 1249.91cm-1 941.29cm-1 .fig 4.19.

Vibration C-C-C : La liaison simple de déformation est caractériser par la gamme 1200cm-1 1400cm-1 fig 4.20.

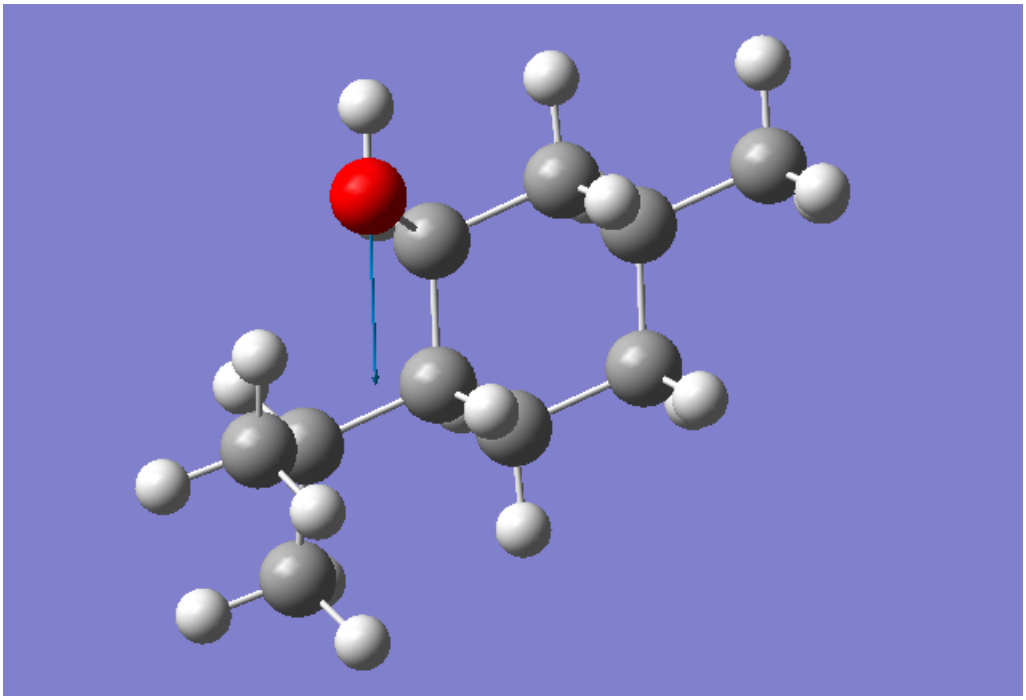


FIGURE 4.13 – Vibration O-H

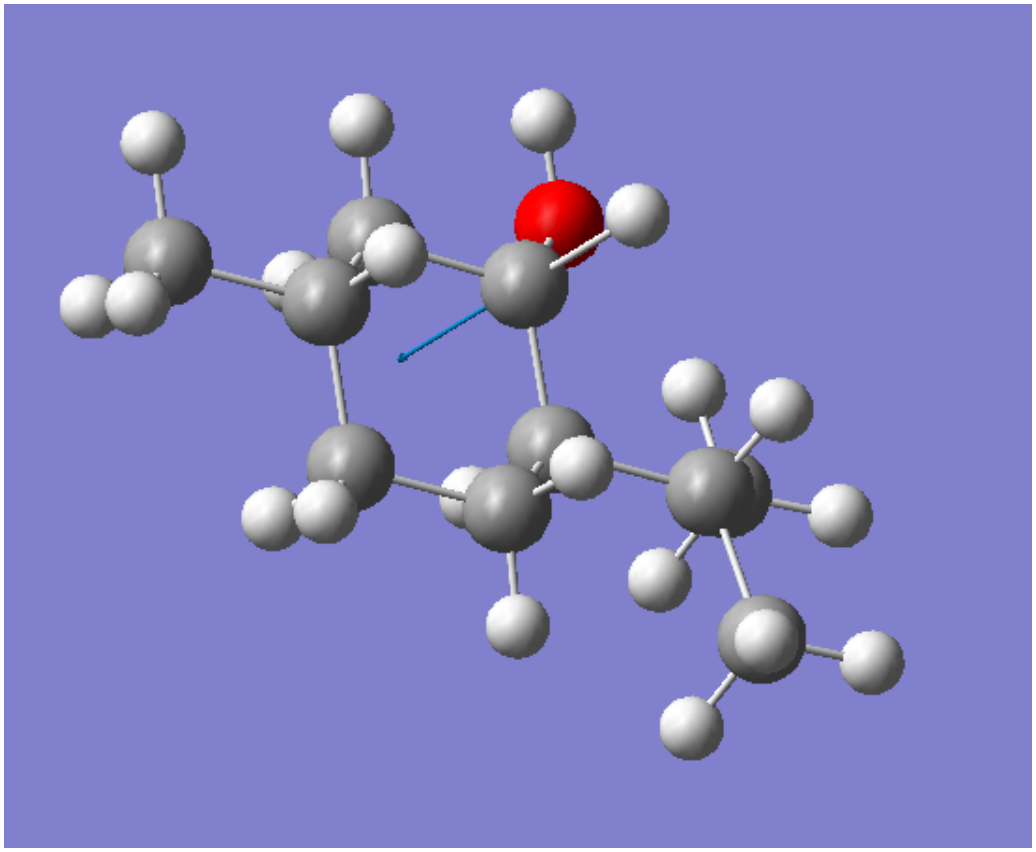


FIGURE 4.14 – Vibration C-H

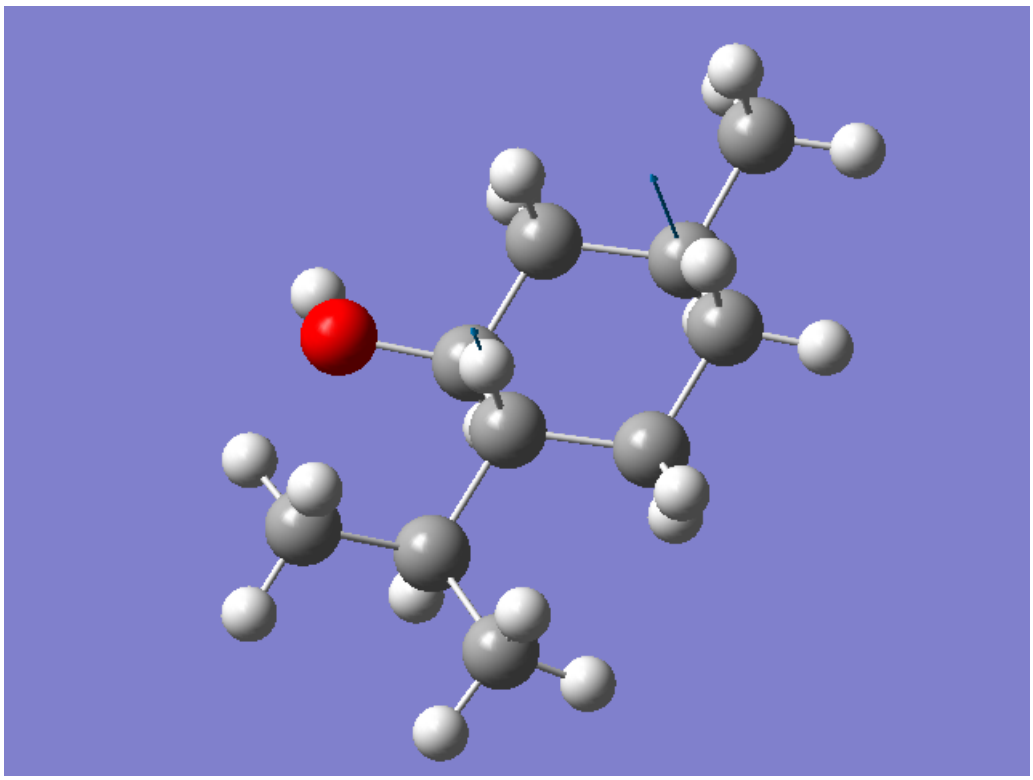


FIGURE 4.15 – Vibration C_{sp3}-H

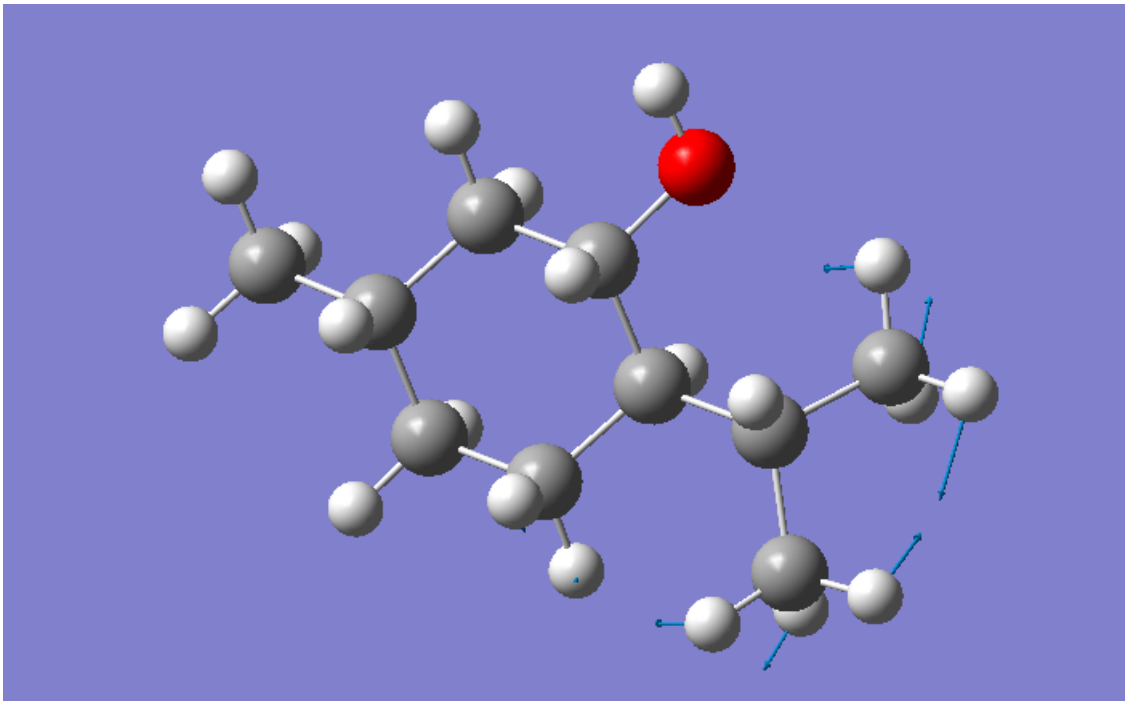


FIGURE 4.16 – Vibration déformation C_{sp3}-H

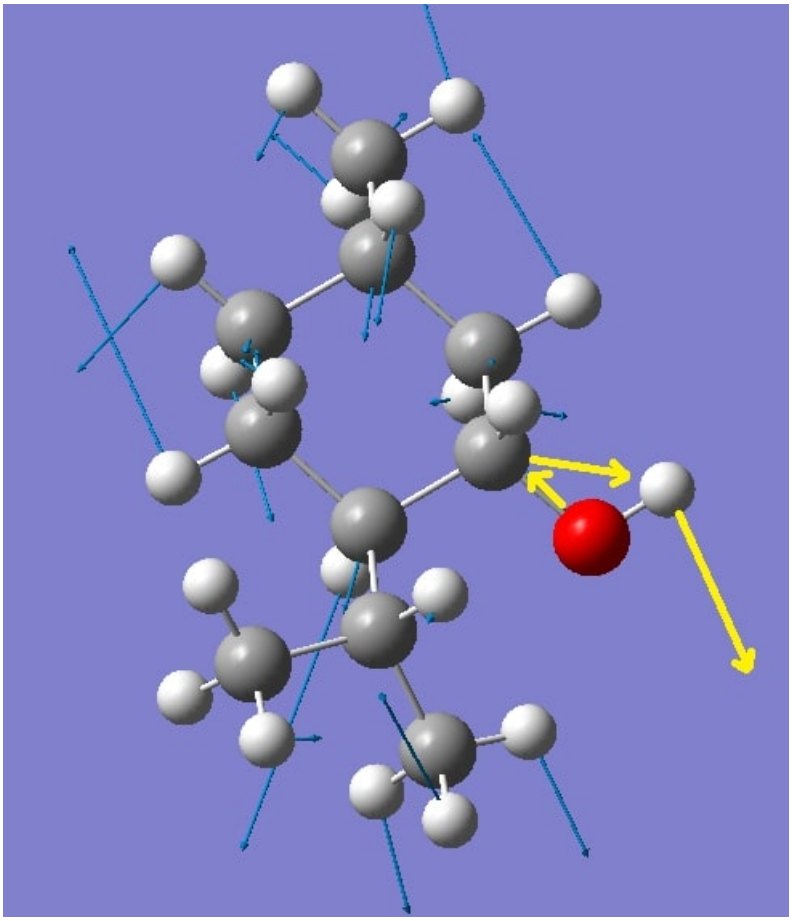


FIGURE 4.17 – Vibration C-O-H

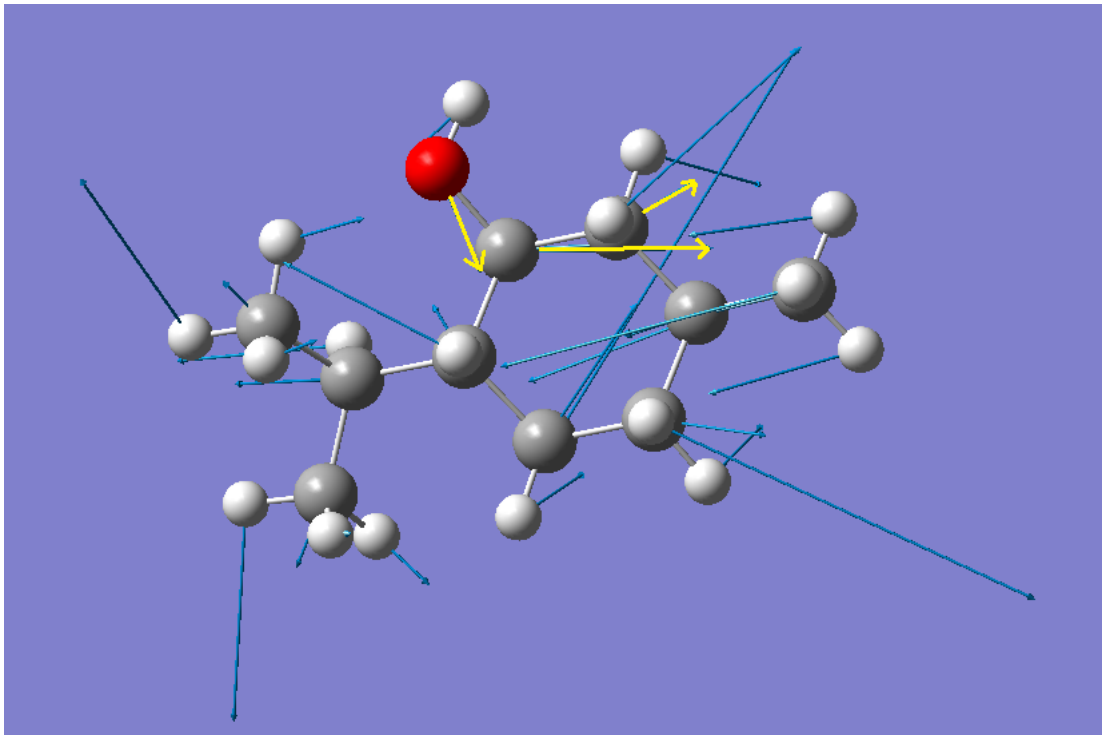


FIGURE 4.18 – Vibration C-C-O

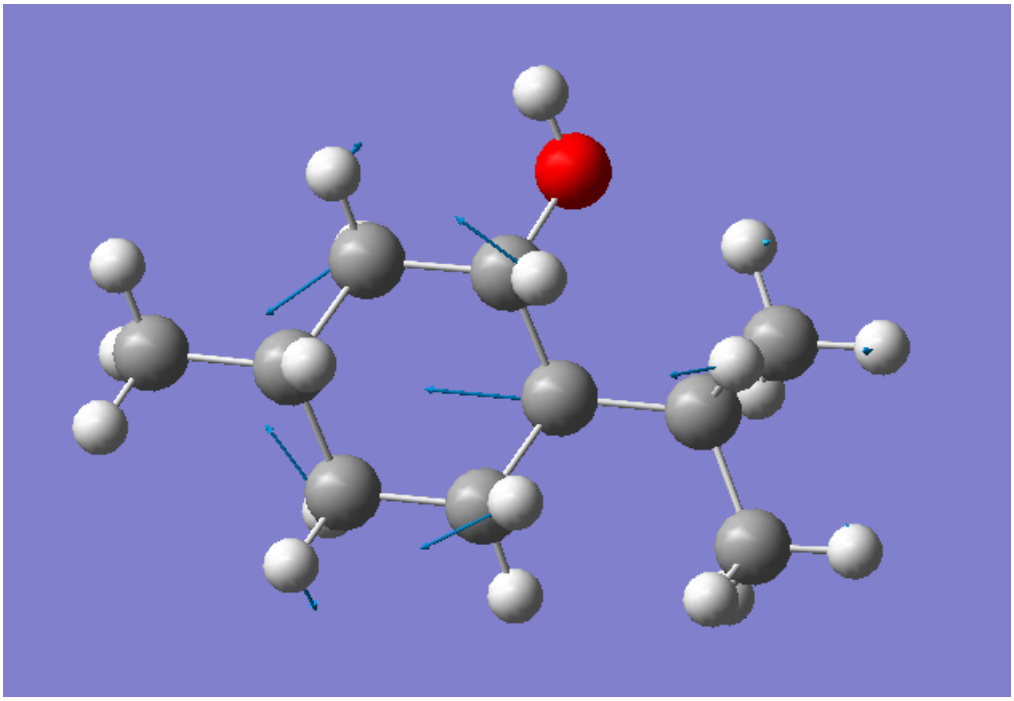


FIGURE 4.19 – vibration C-C-H

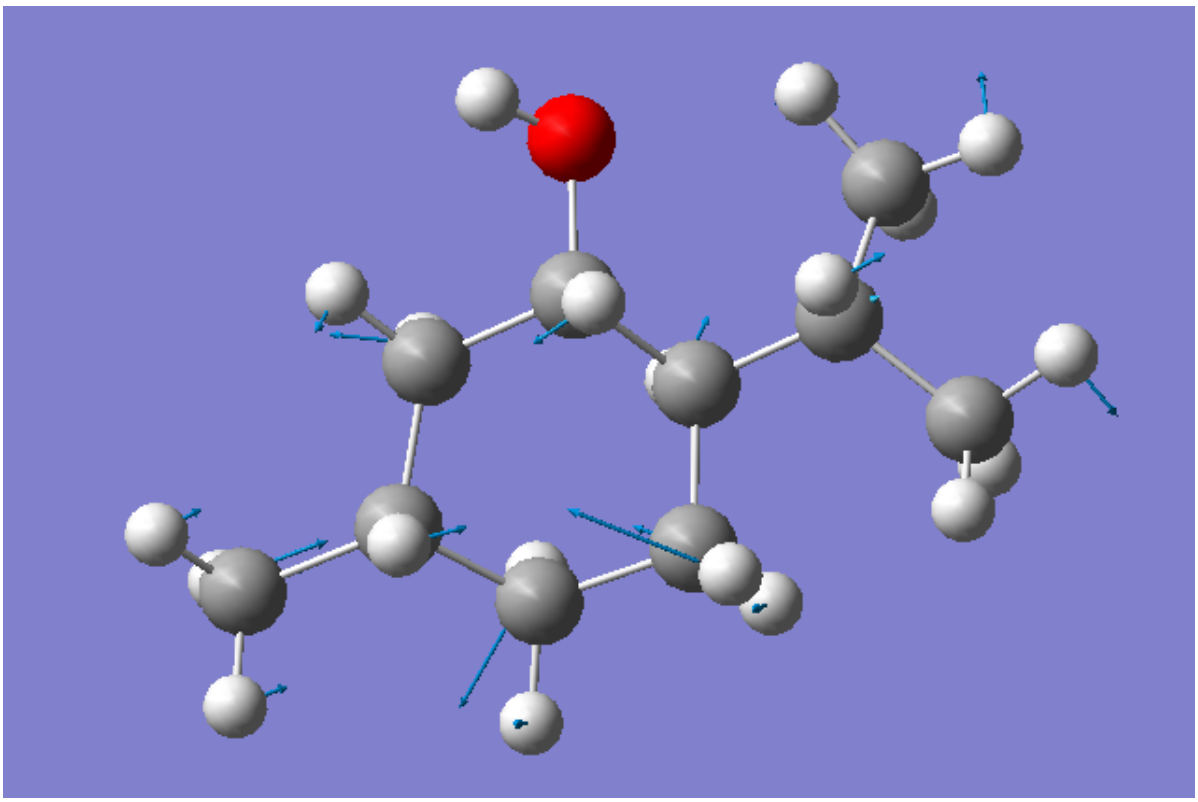


FIGURE 4.20 – Vibration C-C-C

4.9 conclusion

Ce chapitre présenter tout les résultats quelle que soit théorique par la méthode DFT et le programme gaussien ou expérimentale par le spectroscopie infrarouge.

— Tout d'abord nous avons fait une optimisation géométrique et nous obtenis tous les propriétés associes commes les distances entre les atomes de la molecule , les angles et les angles de torsion et nous avons trouvé cette erreur relative dans l'ordre (5.24)(4.41)(8.79).

— Ensuite nous avons extrait l'énergie minimale et les énergies des orbitales atomique et calculer l'énergie de gap (8.785195 ev).

— Enfin dans les propriétés spectroscopique nous avons illustré les pics dans le spectre de menthol par donner leur modes de vibration A l'aide du programme gaussien et du tableau qui l'accompagne , les vibration d'elongation O-H ils apparaissent clairement dans la phase 3302.24cm-1-3209.66cm-1.

Bibliographie

[1] ECCLES, R. Menthol and related cooling compounds. Journal of Pharmacy and Pharmacology, 1994, vol. 46, no 8, p. 618-630.

[2] FAN, Liangyou et ZIEGLER, Tom. Optimization of molecular structures by self-consistent and nonlocal density-functional theory. The Journal of chemical physics, 1991, vol. 95, no 10, p. 7401-7408.

[3] BOMBICZ, P., BUSCHMANN, J., LUGER, P., et al. Crystal structure of (1 R, 2 S, 5 R)-2-isopropyl-5-methyl-cyclohexanol,(-)-menthol. Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 1999, vol. 214, no 7, p. 420-423.

[4] GEERLINGS, Paul, DE PROFT, Frank, et LANGENAEKER, Wilfried. Conceptual density functional theory. Chemical reviews, 2003, vol. 103, no 5, p. 1793-1874.

[5] ABDULOV, Kh, SHUKUROV, T., et al. Calculation of infrared absorption spectrum of menthol. Doklady Akademii Nauk Respubliki Tajikistan, 2013, vol. 56, no 2, p. 113-118.

[6] https ://ritme.com/en/software/gaussian/ Gaussian - Ritme. consulté le (2022-05-30)

Conclusion générale

Ce travail a était fait pour étudier les propriétés géométrique,électronique et vibrationnelle de la composé moléculaire menthol ($C_{10}H_{20}O$) avec la méthode DFT théoriquement et la spectroscopie infrarouge expérimentalement et c'est ce que nous pouvons conclure :

— Pour les propriétés géométrique on a fait une optimisation géométrique qui nous a donné des résultats sur les distances et les angles entre les atomes.
Une estimation que nous pouvons trouver est la liaison C-C sera probablement 1.517 , et liaison C-H sera probablement 1.019 et nous avons trouvé que la liaison O-H est 0.839 tout sa avec une error relative moyenne (5.24).
Nous pouvons estimer que l'angle C-C-C est 110.906 et l'angle H-C-H est 107.463 avec une error moyenne (4.41) , les angles de torsion a une erreur de (8.79).

— Pour les propriétés électronique nous commençons un calcul DFT qui nous a donné les énergies des orbitales atomique et le niveau le plus important des orbitales est ce que nous appelons HOMO et LUMO et vous pouvez avec ces deux calculer l'énergie de gap qui est 8,785195311 ev.

— Pour les propriétés électrostatique On voit bien toutes les places occupées par les électrons et la place la plus dense est au voisinage de l'atome d'oxygène en rouge.

— Pour les propriétés vibrationnelle nous avons fait deux travaux nous avons représenté le spectre par la spectroscopie infrarouge et Nous avons extrait les résultats théoriques par le programme gaussien. on peut dire qu'on a trouvé deux modes de vibration qui sont le mode d'élongation et le mode déformation.

Pour le mode d'elongation est situé dans la zone diagnostique entre 4000cm-1 et 1500cm-1.

Pour le mode déformation est situé dans la zone d'empreintes entre 1700cm-1 et 400cm-1.