
TD de Chimie Quantique :
Etude d'une molécule et de ses possibilités de couplage
par liaisons hydrogène au sein d'un complexe

But:

- Effectuer la recherche de structures à l'état solide et analyser les paramètres géométriques de certains types de liaisons hydrogènes ($C=O \cdots H-O$, $C=O \cdots H-N$, $N \cdots H-N$, etc.).

- Calculer avec la méthode quantique semi-empirique PM3 les paramètres géométriques et électroniques du complexe **X-Y** et des molécules individuelles **X** et **Y**. Pour les molécules **X** et **Y**, étudier ses possibilités de former des liaisons hydrogènes hypothétiques avec une molécule complémentaire. Comparer la structure calculée du complexe avec celles à l'état solide.

- Effectuer la recherche bibliographique des applications de méthodes spectroscopiques (RMN, IR, UV, ...) sur les complexes par des liaisons hydrogènes.

Logiciels: SPARTAN et Base de Cambridge

1. Recherche cristallographique.

- En utilisant le logiciel *QUEST* effectuer la recherche des structures possédant le même type de liaisons hydrogènes que dans le complexe **X-Y**.
- Analyser avec *VISTA* les paramètres géométriques.

2. Calculs quantiques.

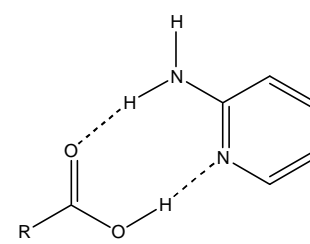
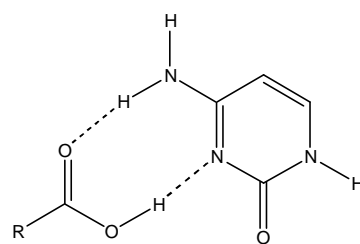
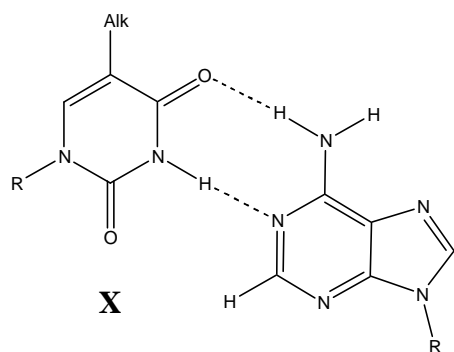
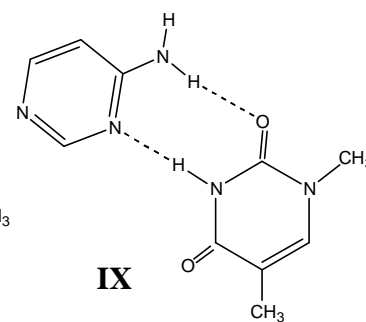
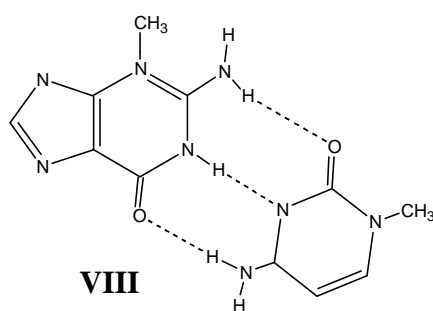
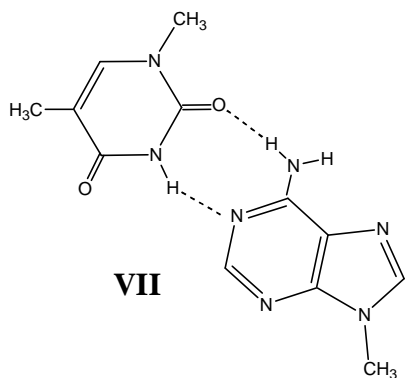
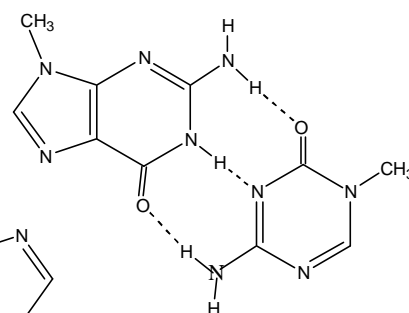
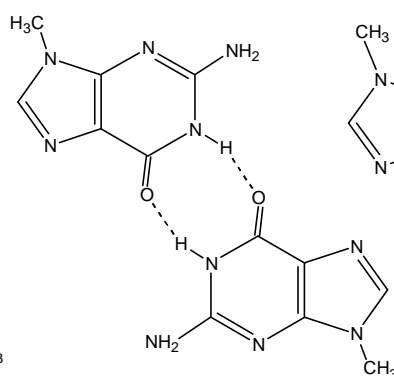
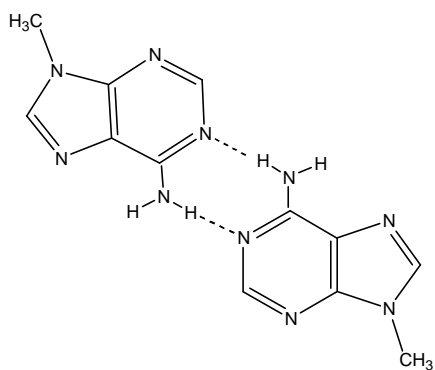
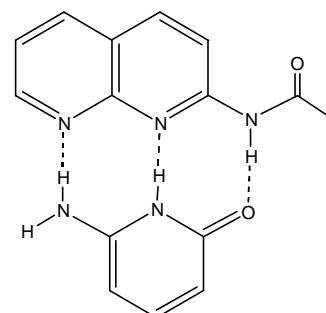
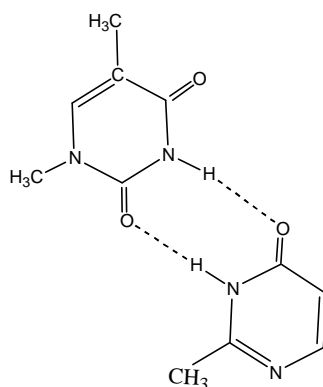
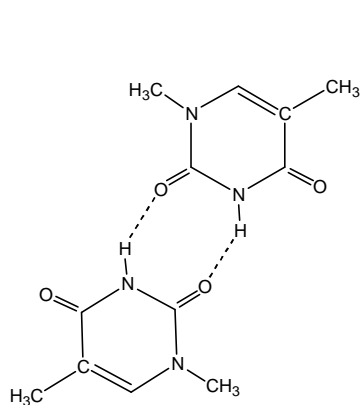
2.1 Molécules individuelles X et Y

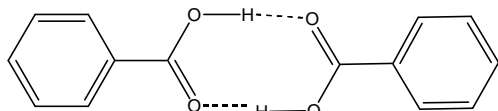
- Construire les molécules individuelles **X** et **Y** en utilisant, s'il y a lieu, des contraintes sur les dièdres H-N-C-C pour maintenir plan le groupe NH_2 .
- Effectuer les calculs semi-empiriques PM3 avec optimisation de la géométrie. En particulier seront calculés: (i) le potentiel électrostatique (en utilisant l'option **Volume** et **Surface**); (ii) le moment dipolaire; (iii) les charges de Mulliken.
- Afficher les contours de la distribution du potentiel électrostatique pour identifier les régions qui sont fortement électropositives et celles électronégatives. Identifier celles qui correspondent respectivement à des donneurs et des accepteurs pour des liaisons hydrogènes. En se basant sur cette analyse, proposer des arrangements possibles.

2.2 Complexe X-Y.

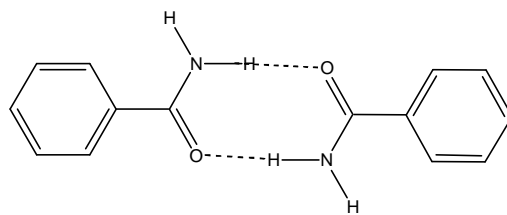
- Superposer les molécules **X** et **Y**, puis utiliser *Merge As* pour préparer le complexe **X-Y**.
- Analyser et comparer la distribution de charges, les longueurs de liaisons et les angles sur les molécules **X** et **Y** dans le complexe par rapport aux résultats obtenus pour les molécules isolées.
- Superposer la molécule donnée (**X** ou **Y**) avec la structure du complexe **X \cdots Y**. Y a-t-il une correspondance entre l'orientation des liaisons hydrogènes et la topologie du potentiel électrostatique ?

Complexes X-Y

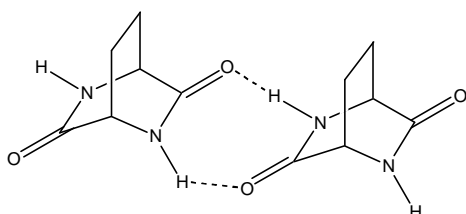




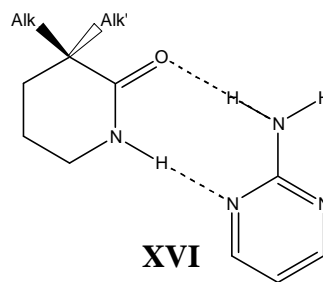
XIII



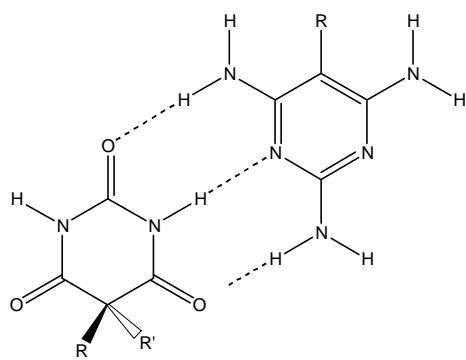
XIV



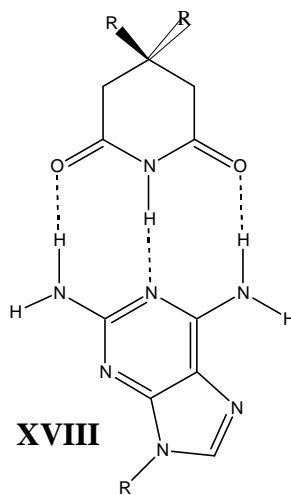
XV



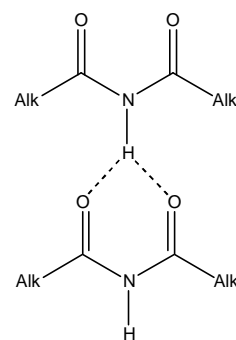
XVI



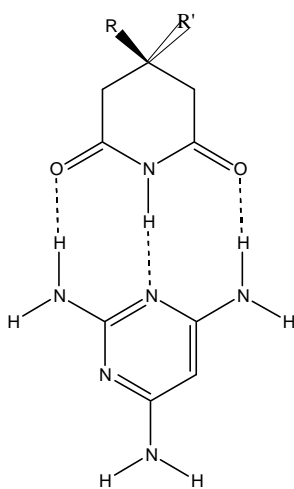
XVII



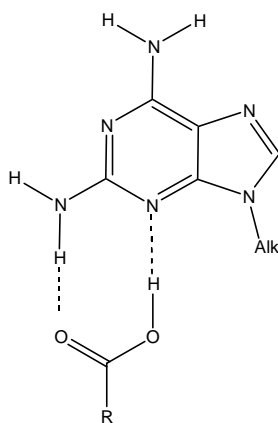
XVIII



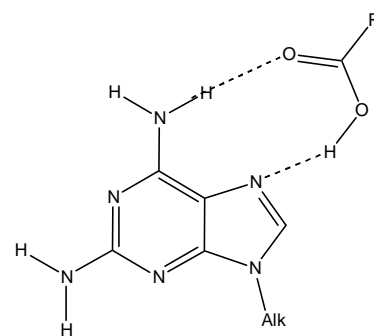
XIX



XX



XXI



XXII