

ÉTUDE DE LA STRUCTURE DU COMPOSÉ M-NITROPHENOL DANS LA PHASE MONOCLINIQUE

M. Drissi, A. Chouaih, C. Tabti, O. Belarbi & F. Hamzaoui

Laboratoire STEVA Département de Chimie Université de Mostaganem, Algérie.

Le présent travail est consacré à l'étude par la méthode de diffraction des rayons X de la répartition de la densité électronique dans une molécule organique le m-Nitrophenol (m-NPH) connu pour ces application dans le domaine de l'optique non linéaire.

Le meta-Nitrophenol de formule brute $C_6H_5NO_3$ possède une bande d'absorption centré à 270 nm dans l'ultraviolet. L'expérience a été réalisé à une température voisine de 120K en utilisant le diffractomètre a quatre cercle (CAD4) et une chambre basse température. Le m-NPH cristallise dans un groupe d'espace centrosymétrique P21/n (système monoclinique) avec quatre molécules par maille. Les paramètres cristallographiques sont $a=11.240(4)\text{Å}$, $b=6.891(2)\text{Å}$, $c=8.154(1)\text{Å}$ et $\beta=98.050(3)$. Les intensités enregistrées ont été traitées par le formalisme de R. Blessing (1989) pour réduire les différents erreurs qui ont affecter les mesures afin de les utilisés dans l'affinement. Le résultat d'affinement de la structure obtenu, utilisant le programme MOLLY dont le facteur de reliabilité est de l'ordre de 0.01 pour 3148 réflexions. Les facteur de structure aux grands angles obtenu par diffraction X ont permis de localisé les positions atomiques de tous les atomes du cristal y compris les atomes Hydrogène, et déterminer leurs paramètres d'agitation thermique. A partir du modèle multipolaire de Hansen et Coppens (1978), nous avons établir les cartes de densité électronique expérimentales dans les différents plans de la molécule. La figure 1 illustre la répartition des charges électroniques des atomes et sur le long des liaisons chimiques de la molécule. Nous avons remarqués que les doublets libres des atomes Oxygène sont bien résolus. Après l'évaluation des charges nettes atomiques, nous avons déterminé le moment dipolaire de la molécule qui est de l'ordre de 5.151 Debye. La figure 2 montre l'orientation du vecteur de moment dipolaire qui est épouse grossièrement l'axe de transfert de charge, dans ce cas nous pouvons noter l'influence de la charge de l'atome d'oxygène du groupement hydroxyde qui repousse le vecteur vers l'atome de carbone C5.

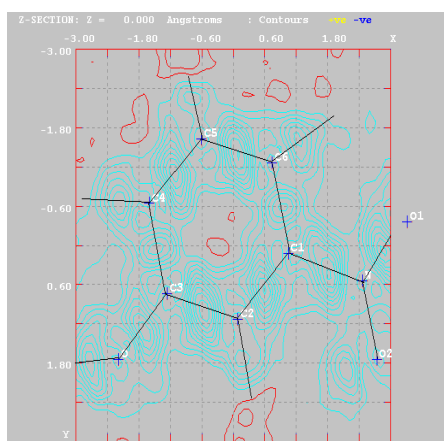


Fig 1: Densité électronique expérimentale

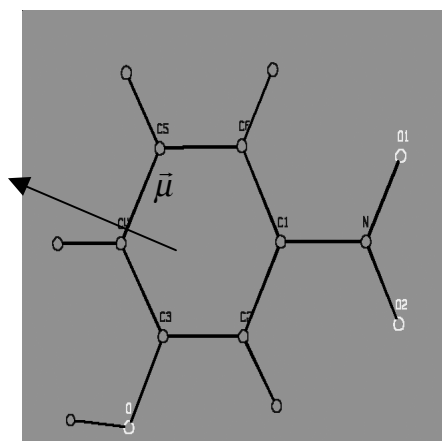


Fig 2: Orientation du Moment Dipolaire oléculaire

Références

- J. L. Oudar J. Chem. Phys., 1977, 67, 446.
- M.Siegelle, J.Zyss &R.Hierle, J.Chem, 74,4800, (1982).
- J. Zyss, I. Ledoux, M. Bertaut& L. Toupet, Chem. Phys.125-135 (1991).
- N.K. Hansen and P. Coppens, Acta Crys. A34. 909-921 (1978).