

Résumé

La thèse a pour but d'étendre systématiquement des observations récentes indiquant que la conformation moléculaire et certains modes de vibration de benzènes poly-substitués variaient fortement lorsque varie leur environnement. Les molécules retenues pour l'étude sont des benzènes avec pour substituants des méthyles plus des halogènes ou des groupes nitro. La conformation moléculaire précise sera établie par diffraction de rayons X ou diffusion inélastique des neutrons dans divers environnements : cristal pur, molécules dans des cages ou des canaux d'halogénotriazines.

Les interactions intermoléculaires au sein de ces composés ont été étudiées par différentes techniques : surface d'Hirshfeld, spectroscopie, diffraction...

Un examen particulier est consacré à l'examen de l'évolution des modes de 'rotation gênée' et des transitions tunnel des groupes méthyles.

Parallèlement sont effectués des calculs théoriques à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité pour déterminer les conformations moléculaires, les modes normaux de vibration, ainsi que la distribution de l'énergie potentielle.

Les résultats de calcul de la mécanique quantique réalisés par (DFT) avec la fonctionnelle MPW1PW91 et la base Lanl2DZ, ont conduit à des résultats très proches dans les angles et longueurs de liaison par rapport à l'expérience.

Les calculs théoriques de spectroscopie ont permis l'identification des différents modes de vibration des molécules isolées, ils sont confrontés aux spectres expérimentaux IR et Raman.

Mots clés : Canaux d'halogénotriazines, diffraction des rayons X, diffusion inélastique des neutrons, mécanique quantique, IR, Raman.