

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE & POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR & DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE DJILLALI LIABES - SIDI BEL ABBES -

FACULTE DES SCIENCES EXACTES

DEPARTEMENT DE CHIMIE

MEMOIRE DE MAGISTER

Présenté par :

M^{elle} . Fatna DJILANI KOBIBI

Spécialité: Chimie

Option : Chimie physique, théorique et modélisation moléculaire

Intitulé

Etude par TD-DFT de propriétés de molécules organiques

Soutenu le : / / 2013

Devant le jury composé de:

Président	: GUEMRA Kadour,	Professeur, Université Djillali Liabes
Examineur	: TALEB MOKHTARI Ilham	MCA. Université Djillali Liabes
Examineur	: LAZREG Abdelkader	MCA. Université Djillali Liabes
Rapporteur	: RAHAL-SEKKAL Majda	Professeur, Université Djillali Liabes

Email: djilanikobibifatma@yahoo.fr - **Tel:** 0697873583 - 0792972096

Etude par TD-DFT de propriétés de molécules organiques.

Abstract:

In this work, the DFT and TDDFT have been applied to study a series of chromophore using five different functionals. The effects of substituent, solvent on the absorption spectra have been discussed. To evaluate the ability of various density functionals to predict the excitation energies, excitation energies using the TDDFT approach have been analyzed according to the nature of the functional and the amount of HF-like exchange. Geometrical studies indicate that all tested hybrid functionals are reasonably accurate in predicting geometrical parameters. The presence of substituent.

Résumé:

La simulation des spectres UV-VIS, par les méthodes de calcul chimique, est très utile puisque les approches modernes peuvent fournir de bons résultats comparables à ceux obtenus par l'expérience. Dans ce sens, la méthode TD-DFT, donne des résultats précis. Dans le premier temps, nous présentons des généralités concernant les propriétés optiques non linéaires. Les principes généraux des méthodes de la chimie quantique sont ensuite exposés brièvement où, nous nous limitons cependant, aux méthodes utilisées dans ce travail. Dans la troisième étape nous avons considéré deux modèles de chromophore. Ces modèles ont servi respectivement à la prédiction des paramètres structuraux et à celle de leurs propriétés physico-chimiques.

الملخص:

في هذا العمل قمنا بدراسة بعض المركبات العضوية و ذلك باستعمال اربع وظائف هجينة من عائلة M06 و مقارنتها مع طريقة MP2 التي اخذت كمرجع حسابي , لهدف معرفة مدى تأثير الوظيفة الهجينة و دور الجذر الالكيلي , دور المذيب و ذلك باستعمال طريقة PCM و لمعرفة الادوار الالكترونية قمنا باستعمال و استنتاج الاطياف الالكترونية و من خلال الدراسة تم استخلاص ان الوظيفة الهجينة تعطي نتائج جيدة مقارنة مع الوظائف الاخرى و للتأكد من النتائج النظرية قمنا بمقارنتها مع النتائج التجريبية.

Mots clés: Fonctionnelle de la densité résolue dans le temps, molécules push-pull, spectre de vibration.

Présentée par: M^{elle} Fatma Djilani Kobibi.

**Laboratoire de microscopie, micro-analyse de la matière et spectroscopie moléculaire
L2MSM. UDL-SBA.**

djilanikobibifatma@yahoo.fr

