

ETUDE THÉORIQUE DE LA RÉACTION DE FORMATION DES ESTERS GLYCIDIQUES α – CHLORÉS EN SÉRIE ALIPHATIQUE PAR LES MÉTHODES QUANTIQUE D.F.T

Zouhair LAKBAIBI^{abc}, Mohamed TABYAOUI^{bc}, Abdeslam EL HAJBI^a.

^aLaboratoire de Chimie Physique (LCP), Département de Chimie, Faculté des Sciences Université ChouaibDoukkali, BP20, 24000 EL Jadida, Maroc.

^bLaboratoire de Chimie Organique Bioorganique et Environnement (LCOBE), Département de Chimie, Faculté des Sciences Université ChouaibDoukkali, BP20, 24000 EL Jadida, Maroc.

^cLaboratoire des Matériaux, Nanotechnologies et Environnement, Université Mohamed V Rabat-Agdal, Faculté des Sciences, 4 Av. Ibn Battouta, B.P. 1014 RP, M-10000 Rabat, Maroc

zouhairshaim@gmail.com

RESUME : Dans ce présent travail, nous avons déterminé par la méthode quantique de la théorie de la fonctionnelle de densité DFT B3LYP/6-311G(d,p) l'optimisation géométrique des réactifs, des produits obtenus au cours de la réaction, les énergies correspondantes aux réactifs et aux produits, la densité électronique située au niveau de certains atomes des réactifs, le caractère électrophile et nucléophile des réactifs, les indices de Fukui, les molleses locales condensées, les indices d'électrophilie et de nucléophilie locale, certaines grandeurs thermodynamiques de la réaction de l'isobutyraldéhyde et du dichloroacétate d'isopropyle, la localisation des états de transition, les populations électroniques atomiques et les indices de réactivité calculés par l'utilisation des analyses de population naturelle (NPA), électrostatiques MK et CHelpG, analyse de surface d'énergie potentielle et la nature du mécanisme réactionnel.

Mots clés : DFT, B3LYP/6-311G (d, p), indices de Fukui, molleses locales condensées, indices d'électrophile, nucléophilie, populations électronique atomiques, indices de réactivité.