

Etude Théorique de l'Interaction entre les molécules $C_3H_4N_2Zn$, $C_3H_4N_2Zn^+$ et $C_3H_4N_2Zn^{2+}$ avec CO_2 : Compétition entre liaisons type- σ et type- π

K. Boussouf,^{1,2} **R. Boulmène**,^{1,2} **M.Prakash**,¹ **N.Komiha**,² **M.Taleb**,³ **M.Hochlaf**¹

¹ Université Paris-Est, Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME UMR 8208 CNRS, 5bd Descartes, 77454 Marne- La-Vallée, France

² LS3ME-Equipe de Chimie Théorique et Modélisation, Université Mohamed V- Agdal, Faculté des Sciences Rabat, Maroc

³ Laboratoire LIMME, Université Sidi Med Ben Abdellah, Fac des Sciences Dhar El Mehrez, Fès, Maroc

Notre travail consiste en une étude théorique de la stabilité et des propriétés électroniques du complexe zinc-imidazole ($Im@Zn$, neutre et positivement chargé) en interaction avec CO_2 . Pour chaque structure, nous avons déduit les structures stables (géométries d'équilibre et détermination des fréquences). Ce travail a été effectué en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (PBE, PBE0, M05-2X) [1-2] ainsi qu'en utilisant la théorie Moller Plesset (MP2) [3]. Les effets de la dispersion sont inclus via la dispersion de Grimme (D3).

Ces calculs ont été effectués avec le code GAUSSIAN 09. [4] Les atomes sont décrits par les bases atomiques 6-311++G(d,p). [5] D'un point de vue méthodologique, nous montrons que M502X est bien adaptée pour la description de ce type de composés organométalliques.

Nos résultats montrent que la structure 3D de ces complexes est gouvernées par des interactions faibles (liaisons hydrogène (type- σ), π -stacking, interactions dispersives, etc.). Toutes ces interactions sont en compétition. Par conséquent, ces matériaux hybrides organiques-inorganiques présentent une grande flexibilité structurale intrinsèque.

1 J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett., 1996, 77, 3865–3868.

2 Y. Zhao, N. E. Schultz and D. G. Truhlar, J. Chem. Theory Comput., 2006, 2, 364–382.

3 C. Moller and M. S. Plesset, Phys. Rev., 1934, 46, 618–622.

4 M. J. Frisch, et al., Gaussian 09 (Revision A.02), Gaussian, Inc., Wallingford, CT, 2009.

5 A. D. McLean and G. S. Chandler, "Contracted Gaussian-basis sets for molecular calculations. 1. 2nd row atoms, Z=11-18," J. Chem. Phys., 72(1980) 5639-48.