

## FIABILITE DES METHODES SEMI-EMPIRIQUES POUR LA DETERMINATION DES PARAMETRES GEOMETRIQUES DES COMPOSES ORGANIQUES $\beta$ -HIMACHALENE HALOGENES

### [ RELIABILITY OF SEMI-EMPIRICAL METHODS FOR THE DETERMINATION OF GEOMETRIC PARAMETERS OF ORGANIC COMPOUNDS $\beta$ -HIMACHALENE HALGOGENATED ]

*Mohammed EL IDRISSE<sup>1</sup>, Abdellah ZEROUAL<sup>1</sup>, Ahmed BENHARREF<sup>2</sup>, and Abdeslam ELHAJBI<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Laboratoire de Chimie Physique, Département de Chimie, Faculté des Sciences Université Chouaib Doukkali, BP 20, 24000 EL  
Jadida, Maroc

<sup>2</sup>Laboratoire de Chimie Biomoléculaire, des Substances Naturelles et Réactivité, URAC 16, Faculté des Sciences Semlalia,  
Université Cadi Ayyad, BP. 2390, 40000 Marrakech, Maroc

Copyright © 2017 ISSR Journals. This is an open access article distributed under the **Creative Commons Attribution License**, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

**ABSTRACT:** Single-crystal X-ray diffraction analysis is the most direct and definitive technique for determining (or confirming) the geometric structure of chemical compound. In this paper, we describe the capacity of semi-empirical methods such as AM1, PM3, PM6 and NODCs for determining interatomic distances and bond angles for three compounds P<sub>1</sub> ((1S, 3R,8R)-2,2-dichloro-3,7,7,10-tetramethyl-tricyclo [6,4,0,0<sup>1,3</sup>] dodec-9-ene), P<sub>2</sub> (1S,3R,8R,9S,11R)-2,2,10,10-tetrachloro-3,7,7,11-tetramethyltetracyclo [6,5,0,01.2,09.116 ] tridecane) and P<sub>3</sub> (1S,3R,8R,9S,11R)-2,2,10,10-tetrabromo-3,7,7,11-tetramethyltetracyclo [6,5,0,01.2,09.116 ] tridecane) including experimental data interatomic distances and bond angles are available. The results obtained show a good agreement with experimental reference values, a few exceptions, for semi-empirical methods AM1 and PM6 appear more reliable than PM3 and NODC.

**KEYWORDS:** Halogenated organic compounds, geometrical parameters, X-ray diffraction, semi-empirical methods.

**RESUME:** Les principales méthodes qui permettent de déterminer la géométrie d'un produit chimique sont les méthodes de la diffraction des rayons X et les méthodes spectroscopiques. Dans ce travail, nous avons testé capacité des méthodes semi-empiriques AM1, PM3, PM6 et CNDO à déterminer les distances interatomiques et les angles de liaisons des composés chimiques P<sub>1</sub> ((1S, 3R,8R)-2,2-dichloro-3,7,7,10-tétraméthyl-tricyclo[6,4,0,0<sup>1,3</sup>]dodec-9-ène), P<sub>2</sub> (1S,3R,8R,9S,11R)-2,2,10,10-tétrachloro-3,7,7,11-tétraméthyltetracyclo[6,5,0,01.2,0<sup>9,11</sup>6 ]tridecane) et P<sub>3</sub> (1S,3R,8R,9S,11R)-2,2,10,10-tétrabromo-3,7,7,11-tétraméthyltetracyclo[6,5,0,01.2,0<sup>9,11</sup>6 ]tridecane), dont les données expérimentales des distances interatomiques et les angles de liaisons sont disponibles. Les résultats obtenus par les méthodes semi-empiriques sont en bon accord avec les valeurs expérimentales. A quelques exception près, les méthodes AM1 et PM6 apparaissent plus fiables que les méthodes PM3 et CNDO.

**MOTS-CLEFS:** Composés organiques halogénés, Paramètres géométriques, Diffraction des Rayons X, les méthodes semi-empiriques.

## 1 INTRODUCTION

Le  $\beta$ -Himachalène est un produit secquiterpénique isolé d'huile essentielle de Cèdre de l'Atlas [1]. Sa structure contient deux doubles liaisons, l'une en position 2,3- tri-substitué et l'autre en position 6,7 tétra-substitué. Le traitement du  $\beta$ -Himachalène par les dihalo-carbènes (dichlorocarbène et le dibromocarbène) générés in situ de la réaction catalysée par transfert de phase liquide-solide [2] conduit aux produits **P<sub>1</sub>**, **P<sub>2</sub>** et **P<sub>3</sub>** (Figure 1). Les structures de ces produits sont déterminées à partir des données spectrales RMN <sup>13</sup>C et <sup>1</sup>H [3] la stéréochimie a été confirmée par la diffraction des rayons X [4]. Une étude théorique montre que ces réactions sont hautement régio- et stéréo- spécifiques [5,6].

Les méthodes quantiques semi-empiriques et ab initio permettent de déterminer les propriétés chimico-physiques des atomes, des ions, des molécules, des radicaux, des clusters... etc.

Dans ce travail nous nous sommes intéressés à utiliser les méthodes semi-empiriques AM1, PM3, PM6 et CNDO pour reproduire les valeurs des distances interatomiques et les angles de liaisons des produits P1 ((1*S*, 3*R*, 8*R*)-2,2-dichloro-3,7,7,10-tétraméthyl-tricyclo [6,4,0,0<sup>1,3</sup>] dodec-9-ène), P2 (1*S*, 3*R*, 8*R*, 9*S*, 11*R*)-2,2,10,10-tétrachloro-3,7,7,11-tétraméthyltetracyclo [6,5,0,01.2,0<sup>9,11</sup>] 6] tridecane) et P3 (1*S*, 3*R*, 8*R*, 9*S*, 11*R*)-2,2,10,10-tétrabromo-3,7,7,11-tétraméthyltetracyclo [6,5,0,01.2,0<sup>9,11</sup>] 6] tridecane).

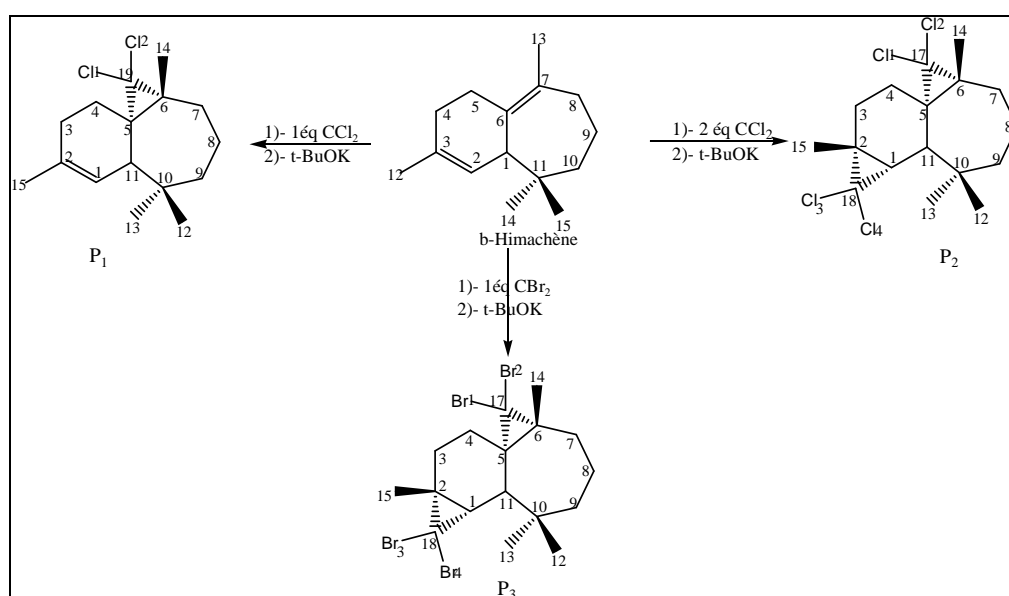


Fig. 1. Réaction de  $\beta$ -Himachalène

Les distances de liaisons et les angles de liaisons des trois produits calculés par les méthodes semi-empiriques sont comparés avec les distances et les angles de liaisons obtenus par la diffraction des rayons X [4].

## 2 METHODE DE CALCUL

Tous les calculs ont été effectués à l'aide des méthodes semi-empiriques CNDO, AM1, PM6 et PM3. Implantés dans le programme gaussien [7]. Après l'optimisation de la géométrie de chaque système moléculaire, nous avons déterminé les distances inter atomiques et les angles de liaisons des produits organiques halogénés P<sub>1</sub>, P<sub>2</sub> et P<sub>3</sub>.

## 3 RESULTATS ET DISCUSSION

### 3.1 DISTANCES INTERATOMIQUES DES P<sub>1</sub>, P<sub>2</sub> ET P<sub>3</sub>

Les distances interatomiques des produits P<sub>1</sub>, P<sub>2</sub> et P<sub>3</sub> calculés par les méthodes semi-empiriques (AM1, PM3, PM6 et CNDO) et mesurés par la diffraction des rayons X sont rassemblées respectivement dans les tableaux 1a, 1b et 1c.

Tableau 1a. Distances interatomiques du  $P_1$  obtenues par les méthodes semi-empirique et D.R.X

| Les longueurs de liaisons | Méthode semi-empiriques |        |        |        |              |
|---------------------------|-------------------------|--------|--------|--------|--------------|
|                           | AM1                     | PM6    | PM3    | CNDO   | <u>D.R.X</u> |
| R(5,6)                    | 1.5239                  | 1.5497 | 1.5318 | 1.5319 | 1.530        |
| R(5,11)                   | 1.519                   | 1.534  | 1.5264 | 1.5119 | 1.525        |
| R(5,4)                    | 1.5082                  | 1.5227 | 1.5194 | 1.4851 | 1.518        |
| R(5,19)                   | 1.5308                  | 1.5378 | 1.5207 | 1.4887 | 1.499        |
| R(6,7)                    | 1.5069                  | 1.5181 | 1.5142 | 1.4964 | 1.506        |
| R(6,14)                   | 1.4998                  | 1.5124 | 1.5093 | 1.473  | 1.507        |
| R(6,19)                   | 1.5201                  | 1.5296 | 1.5086 | 1.48   | 1.510        |
| R(10,11)                  | 1.5484                  | 1.5731 | 1.5594 | 1.5191 | 1.575        |
| R(1,11)                   | 1.4941                  | 1.5097 | 1.4974 | 1.474  | 1.500        |
| R(10,9)                   | 1.5342                  | 1.5555 | 1.5442 | 1.5124 | 1.551        |
| R(10,12)                  | 1.5185                  | 1.5343 | 1.525  | 1.483  | 1.552        |
| R(10,13)                  | 1.5335                  | 1.5492 | 1.5353 | 1.4827 | 1.489        |
| R(7,8)                    | 1.5132                  | 1.5331 | 1.5196 | 1.4882 | 1.521        |
| R(8,9)                    | 1.5106                  | 1.5302 | 1.519  | 1.4941 | 1.511        |
| R(1,2)                    | 1.34                    | 1.3401 | 1.3372 | 1.3467 | 1.318        |
| R(3,4)                    | 1.5162                  | 1.5325 | 1.5221 | 1.4747 | 1.511        |
| R(2,3)                    | 1.4863                  | 1.5038 | 1.488  | 1.466  | 1.486        |
| R(2,15)                   | 1.4826                  | 1.4978 | 1.4841 | 1.4563 | 1.493        |
| R(19, Cl1)                | 1.7379                  | 1.7407 | 1.7299 | 1.6958 | 1.762        |
| R(19, Cl2)                | 1.7351                  | 1.7317 | 1.7297 | 2.2776 | 1.756        |

 Tableau 1b. Distances interatomiques du  $P_2$  obtenues par les méthodes semi-empiriques et D.R.X

| Les longueurs de liaison | Méthode semi-empiriques |        |        |        |              |
|--------------------------|-------------------------|--------|--------|--------|--------------|
|                          | AM1                     | PM6    | PM3    | CNDO   | <u>D.R.X</u> |
| R(5,6)                   | 1.5313                  | 1.5573 | 1.5372 | 1.5205 | 1.555        |
| R(5,11)                  | 1.524                   | 1.5381 | 1.5238 | 1.5264 | 1.542        |
| R(5,4)                   | 1.5124                  | 1.5261 | 1.5216 | 1.4657 | 1.533        |
| R(5,17)                  | 1.5337                  | 1.5407 | 1.5241 | 1.7385 | 1.467        |
| R(6,7)                   | 1.5047                  | 1.5165 | 1.5153 | 1.4784 | 1.509        |
| R(6,14)                  | 1.5028                  | 1.5144 | 1.5096 | 1.5173 | 1.531        |
| R(6,17)                  | 1.5163                  | 1.5255 | 1.5056 | 1.5309 | 1.524        |
| R(10,11)                 | 1.5569                  | 1.5787 | 1.5694 | 1.5041 | 1.568        |
| R(1,11)                  | 1.5152                  | 1.5304 | 1.5128 | 1.5294 | 1.515        |
| R(10,9)                  | 1.5349                  | 1.5525 | 1.5448 | 1.4934 | 1.505        |
| R(10,12)                 | 1.5186                  | 1.5342 | 1.5271 | 1.4809 | 1.540        |
| R(10,13)                 | 1.5399                  | 1.553  | 1.5382 | 1.4848 | 1.532        |
| R(7,8)                   | 1.5098                  | 1.5292 | 1.517  | 1.4747 | 1.544        |
| R(8,9)                   | 1.5079                  | 1.5273 | 1.5184 | 1.4767 | 1.509        |
| R(1,2)                   | 1.5152                  | 1.5407 | 1.5062 | 1.5115 | 1.522        |
| R(3,4)                   | 1.5158                  | 1.5324 | 1.523  | 1.4808 | 1.506        |
| R(2,3)                   | 1.5002                  | 1.5147 | 1.5073 | 1.4857 | 1.536        |
| R(2,18)                  | 1.5234                  | 1.5331 | 1.5095 | 1.4861 | 1.522        |
| R(17, Cl1)               | 1.7364                  | 1.731  | 1.7291 | 3.1295 | 1.752        |
| R(17, Cl2)               | 1.7371                  | 1.7419 | 1.7306 | 1.8584 | 1.766        |
| R(18, Cl3)               | 1.7183                  | 1.7186 | 1.7404 | 1.7023 | 1.748        |
| R(18, Cl4)               | 1.7418                  | 1.7441 | 1.7087 | 1.8125 | 1.777        |

Tableau 1c. Distances interatomiques du  $P_3$  obtenues par les méthodes semi-empiriques et D.R.X

| Les longueurs de liaisons | Méthode semi-empiriques |        |        |       |
|---------------------------|-------------------------|--------|--------|-------|
|                           | AM1                     | PM6    | PM3    | D.R.X |
| Br3 C18                   | 1.891                   | 1.9066 | 1.8624 | 1.899 |
| Br2 C17                   | 1.9117                  | 1.9319 | 1.8838 | 1.912 |
| Br1 C17                   | 1.916                   | 1.93   | 1.8738 | 1.927 |
| Br4 C18                   | 1.915                   | 1.9328 | 1.871  | 1.945 |
| C2 C1                     | 1.5083                  | 1.5346 | 1.5145 | 1.51  |
| C2 C3                     | 1.5006                  | 1.5149 | 1.507  | 1.51  |
| C2 C15                    | 1.4974                  | 1.5092 | 1.5051 | 1.51  |
| C2 C18                    | 1.5243                  | 1.5378 | 1.4854 | 1.51  |
| C6 C5                     | 1.526                   | 1.5559 | 1.5451 | 1.560 |
| C6 C16                    | 1.5037                  | 1.5163 | 1.5072 | 1.52  |
| C6 C17                    | 1.5161                  | 1.5279 | 1.4777 | 1.52  |
| C6 C7                     | 1.5052                  | 1.5178 | 1.5159 | 1.51  |
| C5 C4                     | 1.5132                  | 1.5287 | 1.5206 | 1.53  |
| C5 C11                    | 1.5253                  | 1.5396 | 1.5282 | 1.540 |
| C1 C11                    | 1.5163                  | 1.5327 | 1.5136 | 1.540 |
| C1 C18                    | 1.518                   | 1.5208 | 1.4783 | 1.48  |
| C4 C3                     | 1.5149                  | 1.53   | 1.5235 | 1.54  |
| C11 C10                   | 1.5579                  | 1.5796 | 1.5638 | 1.57  |
| C9 C10                    | 1.5346                  | 1.5513 | 1.5455 | 1.54  |
| C9 C8                     | 1.5077                  | 1.5271 | 1.519  | 1.52  |
| C13 C10                   | 1.5186                  | 1.5345 | 1.5266 | 1.53  |
| C7 C8                     | 1.5092                  | 1.5286 | 1.5189 | 1.53  |
| C10 C12                   | 1.5407                  | 1.5538 | 1.537  | 1.52  |

D'après ces résultats nous constatons que l'écart entre la distance de la double liaison du produit 1 calculée est d'ordre  $2,2 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$ , mais l'écart entre les liaisons des carbone-chlore est d'ordre: 0.02, 0.03, 0.24, 0.032 et 0.06, respectivement PM6, AM1, PM3 et CNDO.

Pour le produit 2 l'écart entre la longueur des liaisons carbone- chlore calculé et mesuré est d'ordre 0.035, 0.032, 0,068 et 0,96, AM1, PM6, PM3 et CNDO respectivement. D'autre part l'écart entre les longueurs de liaisons brome-carbone trouvé et les longueurs expérimentales des rayons X est d'ordre 0.01, 0.003 et 0.03, AM1, PM6 et PM3.

Nous avons représenté les distances interatomiques calculées par les méthodes semi-empiriques en fonction des distances interatomiques expérimentales dans la figure 1. Le résultat obtenu est une droite de la forme  $Y = a \cdot X + b$ , les paramètres a, b et  $R^2$  (facteur de correction) sont rassemblés dans les tableaux (2a, 2b, 2c).

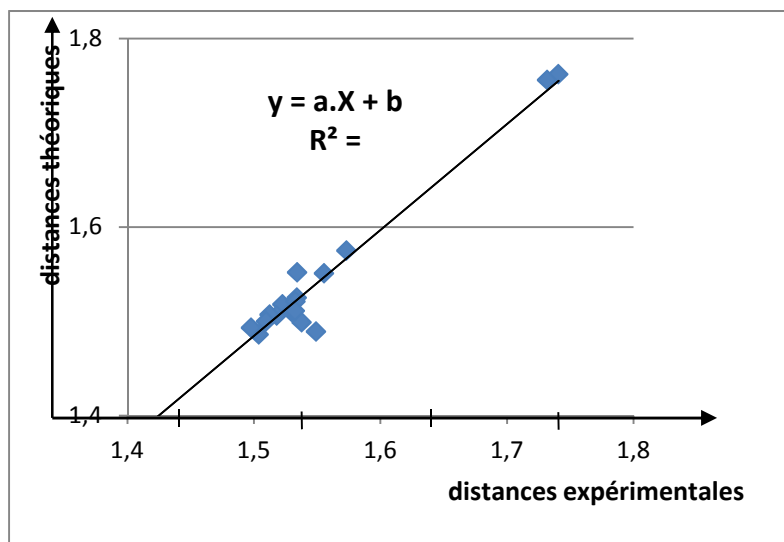


Fig. 1. Les distances interatomiques théoriques en fonction des distances expérimentales

Tableau 2a. Les paramètres  $a$ ,  $b$  et  $R^2$  de l'équation du produit 1

| Coefficients | a     | b       | $R^2$ |
|--------------|-------|---------|-------|
| Méthode      |       |         |       |
| AM 1         | 1,095 | - 0,142 | 0,964 |
| PM 6         | 1,123 | -0,200  | 0,974 |
| PM 3         | 1,125 | -0,192  | 0,967 |
| CNDO         | 0,398 | +0,92   | 0,64  |

Tableau 2b. Les paramètres  $a$ ,  $b$  et  $R^2$  de l'équation du produit 2

| Coefficients | a     | b     | $R^2$ |
|--------------|-------|-------|-------|
| Méthode      |       |       |       |
| PM 6         | 0,984 | 0,031 | 0,992 |
| PM 3         | 0,897 | 0,148 | 0,99  |
| AM 1         | 0,979 | 0,023 | 0,989 |

Tableau 2c. Les paramètres  $a$ ,  $b$  et  $R^2$  de l'équation du produit 3

| Coefficients | a     | b      | $R^2$ |
|--------------|-------|--------|-------|
| Méthode      |       |        |       |
| AM 1         | 0,869 | 0,194  | 0,942 |
| PM 6         | 0,835 | 0,294  | 0,945 |
| PM 3         | 0,835 | 0,249  | 0,937 |
| CNDO         | 2,369 | -2,094 | 0,401 |

La comparaison de distances interatomiques expérimentales et théoriques montre que la méthode PM6 est la plus fiable car elle possède un facteur de correction  $R^2$  le plus grand.

### 3.2 ANGLES DE LIAISONS DES PRODUITS $P_1$ , $P_2$ ET $P_3$

Les angles de liaisons des produits  $P_1$ ,  $P_2$  et  $P_3$  calculés par les méthodes semi-empiriques et mesurés par la diffraction des rayons X sont regroupés dans les tableaux (3a, 3b, 3c).

Tableau 3a. Les angles de liaison du  $P_1$  obtenus par les méthodes semi-empiriques et mesurés par la diffraction des rayons X

| Les angles  | Méthode semi-empiriques |          |          |          |       |
|-------------|-------------------------|----------|----------|----------|-------|
|             | AM 1                    | PM 6     | PM 3     | CNDO     | D.R.X |
| C10 C9 C8   | 116.7219                | 116.191  | 114.9059 | 121.6046 | 117.3 |
| C9 C10 C13  | 105.7769                | 105.8229 | 106.7878 | 100.636  | 110.7 |
| C9 C10 C12  | -----                   | -----    | -----    | -----    | 103.0 |
| C9 C10 C11  | 111.015                 | 110.4795 | 110.2946 | 126.5382 | 111.9 |
| C13 C10 C12 | 108.4056                | 107.9005 | 108.1042 | 111.1698 | 108.7 |
| C13 C10 C11 | 108.7332                | 109.2727 | 108.525  | 111.7274 | 109.8 |
| C12 C10 C11 | 113.8641                | 112.9918 | 114.1911 | 100.6714 | 112.4 |
| C2 C1 C11   | 125.222                 | 125.3606 | 122.5061 | 128.5267 | 125.6 |
| C1 C2 C15   | 122.2955                | 122.136  | 122.6677 | 124.2445 | 122.2 |
| C1 C2 C3    | 122.3916                | 122.686  | 120.3029 | 117.3928 | 121.4 |
| C15 C2 C3   | 115.2946                | 115.1591 | 117.0136 | 118.3626 | 116.4 |
| C10 C11 C1  | 111.5799                | 112.1869 | 112.6344 | 104.7436 | 114.3 |
| C10 C11 C5  | 116.1142                | 115.1284 | 116.1259 | 122.1618 | 114.8 |
| C1 C11 C5   | 110.3264                | 109.8447 | 108.9995 | 112.9996 | 109.4 |
| C5 C4 C3    | 111.7394                | 110.4105 | 116.6202 | 117.4391 | 109.8 |
| C11 C5 C4   | 113.0321                | 113.0231 | 115.6701 | 113.2919 | 111.9 |
| C11 C5 C19  | 118.6393                | 118.5474 | 117.6228 | 118.1935 | 118.2 |
| C11 C5 C6   | 119.7447                | 120.6178 | 119.4341 | 128.4174 | 118.4 |
| C4 C5 C19   | 116.321                 | 115.9046 | 116.6097 | 116.3148 | 117.1 |
| C4 C5 C6    | 119.4599                | 119.165  | 116.5655 | 111.4014 | 122.2 |
| C19 C5 C6   | -----                   | -----    | -----    | -----    | 59.8  |
| Cl1 C19 Cl2 | 108.8958                | 108.4954 | 107.5308 | 49.754   | 107.6 |
| Cl1 C19 C5  | 120.7007                | 121.6028 | 120.9468 | 64.9312  | 121.7 |
| Cl1 C19 C6  | 119.506                 | 118.1562 | 120.4865 | 63.169   | 121.3 |
| Cl2 C19 C5  | 120.8086                | 121.787  | 121.1142 | 106.4727 | 120.3 |
| Cl2 C19 C6  | 119.962                 | 119.5323 | 120.0754 | 105.951  | 118.9 |
| C5 C19 C6   | -----                   | -----    | -----    | -----    | 61.1  |
| C5 C6 C19   | -----                   | -----    | -----    | -----    | 59.1  |
| C5 C6 C7    | 119.7031                | 119.6084 | 120.3227 | 128.094  | 116.0 |
| C5 C6 C14   | 119.378                 | 119.5968 | 117.7221 | 117.6298 | 121.2 |
| C19 C6 C7   | 118.0653                | 119.2405 | 118.5756 | 127.4768 | 118.3 |
| C19 C6 C14  | 119.7465                | 116.7999 | 119.3131 | 112.0671 | 119.4 |
| C7 C6 C14   | 111.2119                | 112.3439 | 111.9559 | 106.0878 | 112.9 |
| C6 C7 C8    | 112.6219                | 111.3268 | 111.6963 | 120.1143 | 111.6 |
| C9 C8 C7    | 112.9703                | 112.8995 | 112.9386 | 128.8405 | 115.5 |
| C2 C3 C4    | 112.5733                | 111.575  | 113.6227 | 111.8778 | 114.8 |

Tableau 3b. Les angles de liaison du P<sub>2</sub> obtenus par les méthodes semi-empiriques et mesurés par la diffraction des rayons X

| Les angles        | Méthode semi-empiriques |          |          |          |              |
|-------------------|-------------------------|----------|----------|----------|--------------|
|                   | AM1                     | PM6      | PM3      | CNDO     | D.R.X        |
| C1 C2 C3          | 117.4397                | 117.2498 | 116.5025 | 117.943  | 117.8        |
| C1 C2 C15         | 118.7103                | 118.8659 | 119.0907 | 119.7377 | 118.2        |
| C1 C2 C18         | 119.0774                | -----    | -----    |          | 58.8         |
| C3 C2 C15         | 112.7743                | 113.7599 | 112.0851 | 112.9245 | 113.4        |
| C3 C2 C18         | 119.0774                | 119.261  | 121.6216 | 123.689  | 119.1        |
| C15 C2 C18        | 119.2648                | 117.993  | 118.8834 | 113.4252 | 119.0        |
| C5 C6 C16         | 118.1623                | 119.4212 | 118.9421 | 120.3345 | 117.8        |
| <b>C5 C6 C17</b>  | -----                   | -----    | -----    |          | <b>118.3</b> |
| C5 C6 C7          | 121.7723                | 122.1663 | 120.2057 | 122.162  | 118.2        |
| C16 C6 C17        | -----                   | -----    | -----    |          | 57.7         |
| C16 C6 C7         | 110.6065                | 110.2435 | 112.1405 | 100.6257 | 116.1        |
| C17 C6 C7         | 117.3414                | 119.083  | 118.3133 | 122.0635 | 114.8        |
| C6 C5 C4          | 115.6174                | 115.6207 | 118.2115 | 136.233  | 113.4        |
| C6 C5 C11         | 122.9003                | 123.3984 | 117.7173 | 100.5576 | 116.0        |
| C4 C5 C11         | 112.8125                | 112.5339 | 116.2494 | 123.1904 | 106.2        |
| C2 C1 C11         | 124.8482                | 124.6444 | 119.7206 | 116.0981 | 120.9        |
| <b>C2 C1 C18</b>  | -----                   | -----    | -----    |          | <b>60.5</b>  |
| C11 C1 C18        | 125.3325                | 123.9801 | 122.6    | 129.1718 | 122.9        |
| C5 C4 C3          | 113.3727                | 112.8314 | 117.7897 | 113.0661 | 114.5        |
| C2 C3 C4          | 110.3517                | 109.4211 | 116.6658 | 120.9772 | 116.0        |
| C5 C11 C1         | 111.6251                | 111.6493 | 110.9342 | 114.3474 | 112.4        |
| C5 C11 C10        | 115.8271                | 115.5351 | 114.8385 | 122.059  | 119.1        |
| C1 C11 C10        | 109.3776                | 108.9415 | 112.6648 | 104.7697 | 112.3        |
| C10 C9 C8         | 117.9996                | 116.659  | 114.9437 | 118.7384 | 115.6        |
| <b>C6 C16 C17</b> | -----                   | -----    | -----    |          | <b>61.0</b>  |
| <b>C6 C17 C16</b> | -----                   | -----    | -----    |          | <b>61.2</b>  |
| C6 C7 C8          | 111.666                 | 111.1795 | 112.2732 | 114.9993 | 114.7        |
| C11 C10 C9        | 113.1201                | 112.8157 | 109.172  | 113.7979 | 114.3        |
| C11 C10 C13       | 109.6845                | 109.329  | 109.9831 | 112.1352 | 109.4        |
| C11 C10 C12       | 111.9766                | 111.362  | 114.3933 | 111.4518 | 107.6        |
| C9 C10 C13        | 103.6888                | 103.8315 | 106.9369 | 112.1352 | 110.5        |
| C9 C10 C12        | 110.1481                | 110.6458 | 108.7225 | 107.9175 | 107.4        |
| C13 C10 C12       | 107.7739                | 108.5071 | 107.3612 | 106.5461 | 107.2        |
| <b>C2 C18 C1</b>  | -----                   | -----    | -----    |          | <b>60.7</b>  |
| C9 C8 C7          | 111.5017                | 111.0513 | 113.3766 | 114.5303 | 114.2        |

Tableau 3c. Les angles de liaison du  $P_3$  obtenus par les méthodes semi-empiriques et mesurés par la diffraction des rayons X

| Les angles        | Méthode semi-empiriques |          |          |       |
|-------------------|-------------------------|----------|----------|-------|
|                   | AM 1                    | PM 6     | PM 3     | D.R.X |
| C1 C2 C3          | 117.4397                | 117.3526 | 116.6135 | 116.4 |
| C1 C2 C15         | 118.7103                | 118.5299 | 119.1602 | 119.5 |
| C1 C2 C18         | 119.0774                | -----    | -----    | 119.1 |
| C3 C2 C15         | 112.7743                | 114.2029 | 112.1247 | 113.9 |
| C3 C2 C18         | 119.0774                | 119.4837 | 120.2261 | 119.1 |
| C15 C2 C18        | 119.2648                | 117.3912 | 119.5442 | 118.6 |
| C5 C6 C16         | 118.1623                | 119.181  | 117.9617 | 118.3 |
| <b>C5 C6 C17</b>  | -----                   | -----    | -----    | 57.4  |
| C5 C6 C7          | 121.7723                | 121.6282 | 121.1373 | 118.9 |
| C16 C6 C17        | -----                   | -----    | -----    | 61.5  |
| C16 C6 C7         | 110.6065                | 111.3712 | 111.7889 | 115.5 |
| C17 C6 C7         | 117.3414                | 118.6565 | 117.5835 | 114.4 |
| C6 C5 C4          | 115.6174                | 117.1519 | 117.0954 | 113.4 |
| C6 C5 C11         | 122.9003                | 122.1783 | 118.665  | 116.5 |
| C4 C5 C11         | 112.8125                | 113.0789 | 116.0635 | 106.4 |
| C2 C1 C11         | 124.8482                | 124.2081 | 119.9509 | 122.0 |
| <b>C2 C1 C18</b>  | -----                   | -----    | -----    | 61.4  |
| C11 C1 C18        | 125.3325                | 122.699  | 126.4478 | 123.6 |
| C5 C4 C3          | 113.3727                | 111.2467 | 118.8126 | 114.3 |
| C2 C3 C4          | 110.3517                | 109.302  | 116.8656 | 116.2 |
| C5 C11 C1         | 111.6251                | 111.245  | 111.6897 | 111.9 |
| C5 C11 C10        | 115.8271                | 115.1812 | 114.6132 | 118.5 |
| C1 C11 C10        | 109.3776                | 109.8148 | 111.261  | 112.8 |
| C10 C9 C8         | 117.9996                | 116.6798 | 114.965  | 117.1 |
| <b>C6 C16 C17</b> | -----                   | -----    | -----    |       |
| <b>C17 C6 C16</b> | -----                   | -----    | -----    |       |
| C6 C7 C8          | 111.666                 | 111.2717 | 112.2093 | 114.5 |
| C11 C10 C9        | 113.1201                | 112.374  | 109.842  | 115.4 |
| C11 C10 C13       | 109.6845                | 109.5983 | 110.223  | 108.8 |
| C11 C10 C12       | 111.9766                | 111.4693 | 114.2029 | 106.5 |
| C9 C10 C13        | 103.6888                | 103.9691 | 106.5006 | 109.6 |
| C9 C10 C12        | 110.1481                | 110.637  | 108.569  | 108.5 |
| C13 C10 C12       | 107.7739                | 108.4617 | 107.1874 | 107.8 |
| <b>C2 C18 C1</b>  | -----                   | -----    | -----    | 61.4  |
| C9 C8 C7          | 111.5017                | 111.423  | 112.7011 | 115.4 |

D'après ces résultats nous constatons que:

- Les angles de liaisons des produits  $P_1$ ,  $P_2$  et  $P_3$  qui sont supérieurs à 120 calculés par les méthodes semi-empiriques et obtenus par la diffraction des rayons X possèdent un écart moyen entre les valeurs des angles d'ordre 0.9°, 1°, 1.2° et 26°, AM1, PM6, PM3 et CNDO respectivement.
- Les angles de liaisons des produits  $P_1$ ,  $P_2$  et  $P_3$  qui sont inférieurs à 120 calculés par les méthodes semi-empiriques et obtenus par la diffraction des rayons X possèdent un écart moyen entre les valeurs des angles d'ordre 2.2, 1.07, 1.16 et 1.07 au CNDO, PM3, PM6 et AM1 respectivement.

Nous avons représentés dans la figure 2 les valeurs des angles calculés par les méthodes semi-empiriques en fonction des angles expérimentales, le résultat obtenu donne une droite de la forme  $Y = a.X + b$ .

Les paramètres a, b et  $R^2$  de l'équation sont rassemblés dans les tableaux (4a, 4b, 4c). D'après ces tableaux on remarque que la méthode AM1 qui possède un facteur  $R^2$  le plus grand, alors la méthode AM1 la plus précise pour calculer les angles de liaisons.



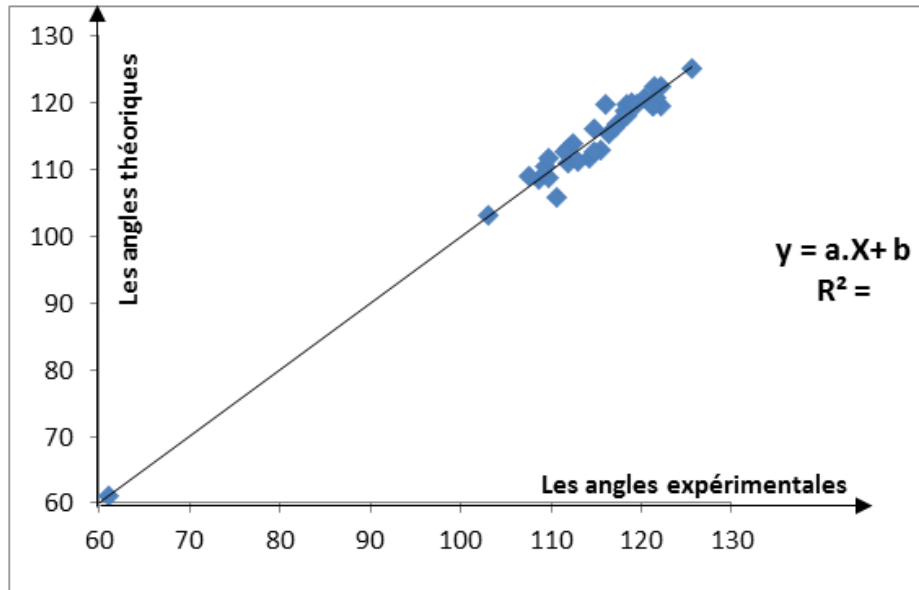


Fig. 2. Les angles théoriques en fonction des angles expérimentales

Tableau 4a. Les paramètres de l'équation et le facteur de correction R<sup>2</sup> du produit 1.

| Méthode | Coefficients | a     | b     | R <sup>2</sup> |
|---------|--------------|-------|-------|----------------|
| AM 1    |              | 0,992 | 0,576 | 0,99           |
| PM 6    |              | 0,99  | 0,57  | 0,989          |
| PM 3    |              | 0,99  | 0,57  | 0,989          |
| CNDO    |              | 0,873 | 9,55  | 0,394          |

Tableau 4b. Les paramètres de l'équation et le facteur de correction R<sup>2</sup> du produit 2

| Méthode | Coefficients | a     | b     | R <sup>2</sup> |
|---------|--------------|-------|-------|----------------|
| AM 1    |              | 0,996 | 0,392 | 0,973          |
| PM 6    |              | 0,989 | 1,037 | 0,971          |
| PM 3    |              | 0,993 | 0,968 | 0,972          |
| CNDO    |              | 0,998 | 0,888 | 0,87           |

Tableau 4c. Les paramètres de l'équation et le facteur de correction R<sup>2</sup> du produit 3

| Méthode | Coefficients | a     | b     | R <sup>2</sup> |
|---------|--------------|-------|-------|----------------|
| PM 6    |              | 0,998 | 0,237 | 0,977          |
| PM 3    |              | 0,998 | 0,511 | 0,981          |
| AM 1    |              | 0,987 | 0,763 | 0,982          |

#### 4 ESTIMATION D'ERREUR

L'estimation d'erreur des distances et les angles pour les différents produits calculés par la relation :

$$\% \text{ Erreur} = \frac{\text{grandeur Exp} - \text{grandeur Cal}}{\text{grandeur Exp}} \times 100$$

Les valeurs d'estimation d'erreur des distances et les angles pour les différents produits P<sub>1</sub>, P<sub>2</sub> et P<sub>3</sub>, sont reportées dans les tableaux 4a, 4b, 4c, 5a, 5b et 5c.

Tableau 4a. Le pourcentage d'erreur des longueurs de liaison du  $P_1$

| Les liaisons                              | Méthodes Semi-empirique |                |                |                |
|---|-------------------------|----------------|----------------|----------------|
|   | AM1                     | PM6            | PM3            | CNDO           |
| R(5,6)                                    | 0,39%                   | 1.24%          | 0,11%          | 0,06%          |
| R(5,11)                                   | 0,39%                   | 0,59%          | 0,09%          | 0,85%          |
| R(5,4)                                    | 0,59%                   | 0,26%          | 0,092%         | 2,09%          |
| R (5,19)                                  | 2,06%                   | 2,5%           | 1,4%           | 0,66%          |
| R(6,7)                                    | 0,05%                   | 0,79%          | 0,53%          | 0,59%          |
| R(6,14)                                   | 0,46%                   | 0,33%          | 0,15%          | 2,1%           |
| R(6,19)                                   | 0,66%                   | 1,25%          | 0,09%          | 1,98%          |
| R(10,11)                                  | 1,65%                   | 0,06%          | 0,95%          | 3,49%          |
| R(1,11)                                   | 0,33%                   | 0,6%           | 0,16%          | 1,73%          |
| R(10,9)                                   | 1,03%                   | 0,25%          | 0,43%          | 2,45%          |
| R(10,12)                                  | 2,12%                   | 1,09%          | 1,73%          | 4,44%          |
| R(10,13)                                  | 2,95%                   | 4,03%          | 3,76%          | 0,4%           |
| R(7,8)                                    | 0,46%                   | 0,78%          | 0,08%          | 2,1%           |
| R(8,9)                                    | 0,019%                  | 1,25%          | 0,52%          | 1,05%          |
| R(1,2)                                    | 1,66%                   | 1,66%          | 1,44%          | 2,12%          |
| R(3,4)                                    | 0,33%                   | 1,38%          | 0,72%          | 2,4%           |
| R(2,3)                                    | 0,013%                  | 1,14%          | 0,13%          | 1,34%          |
| R(2,15)                                   | 0,66%                   | 0,26%          | 0,59%          | 2,41%          |
| R(19, C11)                                | 1,36%                   | 1,19%          | 1,82%          | 3,74%          |
| R (19,C12)                                | 1,13%                   | 1,36%          | 1,49%          | 29,61%         |
| <b>La moyenne du pourcentage d'erreur</b> | <b>0,9156%</b>          | <b>1,6855%</b> | <b>0,8141%</b> | <b>3,2805%</b> |

Tableau 4b. Le pourcentage d'erreur des longueurs de liaison du  $P_2$

| Les liaisons                              | Méthodes Semi-empirique |                 |                 |                 |
|---|-------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|
|   | AM1                     | PM6             | PM3             | CNDO            |
| R(5,6)                                    | 1,47%                   | 0,12%           | 1,09%           | 2,18%           |
| R(5,11)                                   | 1,16%                   | 0,19%           | 1,16%           | 0,97%           |
| R(5,4)                                    | 1,30%                   | 0,39%           | 0,71%           | 4,37%           |
| R (5,19)                                  | 4,49%                   | 4,97%           | 3,88%           | 18,40%          |
| R(6,7)                                    | 0,26%                   | 0,46%           | 0,39%           | 1,98%           |
| R(6,14)                                   | 1,82%                   | 1,04%           | 1,37%           | 0,84%           |
| R(6,19)                                   | 0,45%                   | 0,06%           | 1,18%           | 0,39%           |
| R(10,11)                                  | 0,70%                   | 0,63%           | 0,06%           | 4,01%           |
| R(1,11)                                   | 0,01%                   | 0,99%           | 0,13%           | 0,92%           |
| R(10,9)                                   | 1,92%                   | 3,12%           | 2,59%           | 0,73%           |
| R(10,12)                                  | 1,36%                   | 0,32%           | 0,77%           | 3,83%           |
| R(10,13)                                  | 0,45%                   | 1,30%           | 0,39%           | 3,06%           |
| R(7,8)                                    | 2,20%                   | 0,90%           | 1,74%           | 4,46%           |
| R(8,9)                                    | 0,06%                   | 1,19%           | 0,59%           | 2,12%           |
| R(1,2)                                    | 0,39%                   | 1,18%           | 0,98%           | 0,65%           |
| R(3,4)                                    | 0,59%                   | 1,72%           | 1,06%           | 1,66%           |
| R(2,3)                                    | 2,27%                   | 1,36%           | 1,82%           | 3,25%           |
| R(2,15)                                   | 0,06%                   | 0,72%           | 0,78%           | 2,29%           |
| R(19, C11)                                | 0,85%                   | 1,14%           | 1,25%           | 78,19%          |
| R (19,C12)                                | 1,58%                   | 1,35%           | 1,98%           | 5,20%           |
| <b>La moyenne du pourcentage d'erreur</b> | <b>1,23365%</b>         | <b>1,21387%</b> | <b>1,28369%</b> | <b>6,55221%</b> |

Tableau 4c. Le pourcentage d'erreur des longueurs de liaison du  $P_3$

| Les liaisons                              | Méthodes Semi-empirique |                |                |
|---|-------------------------|----------------|----------------|
|   | AM1                     | PM6            | PM3            |
| R(5,6)                                    | 0,421 %                 | 0,368 %        | 1,927 %        |
| R(5,11)                                   | 0,015 %                 | 1,040 %        | 1,474 %        |
| R(5,4)                                    | 0,570 %                 | 0,150 %        | 2,750 %        |
| R (5,19)                                  | 1,542 %                 | 0,627 %        | 3,804 %        |
| R(6,7)                                    | 0,112 %                 | 1,629 %        | 0,291 %        |
| R(6,14)                                   | 0,622 %                 | 0,317 %        | 0,198 %        |
| R(6,19)                                   | 0,794 %                 | 0,052 %        | 0,317 %        |
| R(10,11)                                  | 0,794 %                 | 1,841 %        | 1,629 %        |
| R(1,11)                                   | 0,897 %                 | 0,256 %        | 0,955 %        |
| R(10,9)                                   | 2,236 %                 | 0,243 %        | 0,835 %        |
| R(10,12)                                  | 1,072 %                 | 0,519 %        | 2,782 %        |
| R(10,13)                                  | 0,311 %                 | 0,516 %        | 0,390 %        |
| R(7,8)                                    | 1,045 %                 | 0,084 %        | 0,614 %        |
| R(8,9)                                    | 0,909 %                 | 0,019 %        | 0,766 %        |
| R(1,2)                                    | 1,538 %                 | 0,474 %        | 1,714 %        |
| R(3,4)                                    | 2,567 %                 | 2,702 %        | 0,114 %        |
| R(2,3)                                    | 1,623 %                 | 0,649 %        | 1,071 %        |
| R(2,15)                                   | 0,770 %                 | 0,605 %        | 0,388 %        |
| R(19, Br1)                                | 0,324 %                 | 0,714 %        | 0,357 %        |
| R (19,Br2)                                | 0,809 %                 | 0,460 %        | 0,065 %        |
| <b>La moyenne du pourcentage d'erreur</b> | <b>0,9717%</b>          | <b>0,6902%</b> | <b>1,0656%</b> |

Tableau 5a. Le pourcentage d'erreur des angles de liaison  $P_1$

| Les angles                                | Méthodes Semi-empirique |                 |                 |                 |
|---|-------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|
|   | AM1                     | PM6             | PM3             | CNDO            |
| C10 C9 C8                                 | 0,05%                   | 0,944%3         | 2,04%           | 3,66 %          |
| C9 C10 C13                                | 4,46%                   | 4,40%           | 3,53%           | 9,09%           |
| C9 C10 C12                                | 0%                      | 0%              | 0%              | 0%              |
| C9 C10 C11                                | 0,7%9                   | 1,269%          | 1,43%           | 13,08%          |
| C13 C10 C12                               | 0,27%                   | 0,735%          | 0,54%           | 2,27%           |
| C13 C10 C11                               | 0,98%                   | 0,479%          | 1,16%           | 1,75%           |
| C12 C10 C11                               | 1,3%                    | 0,525%          | 1,59%           | 10,43%          |
| C2 C1 C11                                 | 0,3%                    | 0,19%           | 2,46%           | 2,32%           |
| C1 C2 C15                                 | 0,78%                   | 0,052%          | 0,38%           | 1,67%           |
| C1 C2 C3                                  | 0,81%                   | 1,059%          | 0,90%           | 3,30%           |
| C15 C2 C3                                 | 0,94%                   | 1,065%          | 0,52%           | 1,68%           |
| C10 C11 C1                                | 2,37%                   | 1,848%          | 1,45%           | 8,36%           |
| C10 C11 C5                                | 1,14%                   | 0,285%          | 1,14%           | 6,41%           |
| C1 C11 C5                                 | 0,84%                   | 0,406%          | 0,36%           | 3,28%           |
| C5 C4 C3                                  | 1,76%                   | 0,556%          | 6,21%           | 6,95%           |
| C11 C5 C4                                 | 1,01%                   | 1,003%          | 3,36%           | 1,24%           |
| C11 C5 C19                                | 0,37%                   | 0,293%          | 0,48%           | 0,005%          |
| C11 C5 C6                                 | 1,13%                   | 1,872%          | 0,87%           | 8,45%           |
| C4 C5 C19                                 | 0,66%                   | 1,02%           | 0,41%           | 0,67%           |
| C4 C5 C6                                  | 2,24%                   | 2,483%          | 4,61%           | 8,82%           |
| C19 C5 C6                                 | 0%                      | 0%              | 0%              | 0%              |
| C11 C19 C12                               | 1,2%                    | 0,831%          | 0,06%           | 53,75%          |
| C11 C19 C5                                | 0,82%                   | 0,079%          | 0,61%           | 46,63%          |
| C11 C19 C6                                | 1,47%                   | 2,591%          | 0,67%           | 47,92%          |
| C12 C19 C5                                | 0,42%                   | 1,236%          | 0,67%           | 11,48%          |
| C12 C19 C6                                | 0,89%                   | 0,531%          | 0,98%           | 10,88%          |
| C5 C19 C6                                 | 0%                      | 0%              | 0%              | 0%              |
| C5 C6 C19                                 | 0%                      | 0%              | 0%              | 0%              |
| C5 C6 C7                                  | 3,1%9                   | 3,110%          | 3,72%           | 10,42%          |
| C5 C6 C14                                 | 1,51%                   | 1,322%          | 2,86%           | 2,94%           |
| C19 C6 C7                                 | 0,19%                   | 0,795%          | 0,23%           | 7,75%           |
| C19 C6 C14                                | 0,29%                   | 2,177%          | 0,07%           | 6,14%           |
| C7 C6 C14                                 | 1,49%                   | 0,492%          | 0,83%           | 6,03%           |
| C6 C7 C8                                  | 0,91%                   | 0,244%          | 0,08%           | 7,62%           |
| C9 C8 C7                                  | 2,19%                   | 2,251%          | 2,21%           | 11,54%          |
| C2 C3 C4                                  | 1,93%                   | 2,808%          | 1,02%           | 2,54%           |
| <b>La moyenne du pourcentage d'erreur</b> | <b>1,0897%</b>          | <b>1,08253%</b> | <b>1,32245%</b> | <b>8,86717%</b> |

Tableau 5b. Le pourcentage d'erreur des angles de liaison P<sub>2</sub>

| Les angles                                | Méthodes Semi-empirique |                |                |                |
|---|-------------------------|----------------|----------------|----------------|
|   | AM 1                    | PM 6           | PM 3           | CNDO           |
| C10 C9 C8                                 | 0,448%                  | 0,409%         | 0,183%         | 1,325%         |
| C9 C10 C13                                | 0,329%                  | 0,405%         | 0,284%         | 0,198%         |
| C9 C10 C12                                | 0%                      | 0%             | 0%             | 0%             |
| C9 C10 C11                                | 0,493%                  | 0,132%         | 1,558%         | 0,856%         |
| C13 C10 C12                               | 0,009%                  | 0,161%         | 0,945%         | 3,853%         |
| C13 C10 C11                               | 0,278%                  | 0,509%         | 0,796%         | 4,363%         |
| C12 C10 C11                               | 0,059%                  | 0,372%         | 0,285%         | 1,719%         |
| C2 C1 C11                                 | 0%                      | 0%             | 0%             | 0%             |
| C1 C2 C15                                 | 1,202%                  | 1,147%         | 1,881%         | 2,743%         |
| C1 C2 C3                                  | 0%                      | 0%             | 0%             | 0%             |
| C15 C2 C3                                 | 2,112%                  | 1,787%         | 3,213%         | 12,878%        |
| C10 C11 C1                                | 1,284%                  | 1,860%         | 2,782%         | 6,698%         |
| C10 C11 C5                                | 0,970%                  | 1,654%         | 3,258%         | 20,134%        |
| C1 C11 C5                                 | 2,746%                  | 2,437%         | 1,858%         | 13,684%        |
| C5 C4 C3                                  | 3,007%                  | 3,138%         | 9,082%         | 15,78%         |
| C11 C5 C4                                 | 1,163%                  | 0,904%         | 1,679%         | 4,837%         |
| C11 C5 C19                                | 0%                      | 0%             | 0%             | 0%             |
| C11 C5 C6                                 | 0,695%                  | 0,364%         | 2,304%         | 4,507%         |
| C4 C5 C19                                 | 0,402%                  | 1,335%         | 3,948%         | 1,079%         |
| C4 C5 C6                                  | 2,512%                  | 2,968%         | 0,572%         | 4,111%         |
| C19 C5 C6                                 | 0,116%                  | 0,292%         | 0,187%         | 2,187%         |
| C1 C19 C12                                | 1,122%                  | 1,400%         | 3,28%          | 3,003%         |
| C1 C19 C5                                 | 1,515%                  | 1,323%         | 1,364%         | 7,119%         |
| C1 C19 C6                                 | 0,375%                  | 0,179%         | 1,823%         | 1,399%         |
| C12 C19 C5                                | 1,231%                  | 1,409%         | 2%             | 0,436%         |
| C12 C19 C6                                | 0,979%                  | 1,311%         | 4,816%         | 1,388%         |
| C5 C19 C6                                 | 0,404%                  | 0,366%         | 1,307%         | 3,065%         |
| C5 C6 C19                                 | 2,563%                  | 2,333%         | 7,232%         | 4,649%         |
| C5 C6 C7                                  | 2,691%                  | 2,568%         | 2,827%         | 4,661%         |
| C5 C6 C14                                 | 0,755%                  | 0,984%         | 0,063%         | 0,536%         |
| C19 C6 C7                                 | 0,009%                  | 0,306%         | 0,713%         | 1,163%         |
| C19 C6 C14                                | 0%                      | 0%             | 0%             | 0%             |
| C7 C6 C14                                 | 1,681%                  | 1,723%         | 2,338%         | 0,753%         |
| C6 C7 C8                                  | 0,445%                  | 0,409%         | 0,183%         | 1,325%         |
| C9 C8 C7                                  | 0,329%                  | 0,405%         | 0,284%         | 0,198%         |
| C2 C3 C4                                  | 0%                      | 0%             | 0%             | 0%             |
| <b>La moyenne du pourcentage d'erreur</b> | <b>0,9442%</b>          | <b>1,0239%</b> | <b>1,8963%</b> | <b>3,9128%</b> |

Tableau 5c. Le pourcentage d'erreur des angles de liaison  $P_3$

| Les angles                                | Méthodes Semi-empirique |                |                |
|---|-------------------------|----------------|----------------|
|   | AM 1                    | PM 6           | PM 3           |
| C10 C9 C8                                 | 0,3 %                   | 0,46%          | 1,101%         |
| C9 C10 C13                                | 0,43%                   | 0,563%         | 0,753%         |
| C9 C10 C12                                | 0%                      | 0%             | 0%             |
| C9 C10 C11                                | 0,55%                   | 0,317%         | 1,159%         |
| C13 C10 C12                               | 0,01%                   | 0,135%         | 2,117%         |
| C13 C10 C11                               | 0,22%                   | 0,846%         | 0,097%         |
| C12 C10 C11                               | 0,3%                    | 1,37%          | 0,969%         |
| C2 C1 C11                                 | 0%                      | 0%             | 0%             |
| C1 C2 C15                                 | 3,02%                   | 3,355%         | 1,696%         |
| C1 C2 C3                                  | 0%                      | 0%             | 0%             |
| C15 C2 C3                                 | 4,73%                   | 5,044%         | 3,41%          |
| C10 C11 C1                                | 2,21%                   | 3,73%          | 3,06%          |
| C10 C11 C5                                | 1,95%                   | 1,95%          | 4,24%          |
| C1 C11 C5                                 | 5,94%                   | 6,377%         | 1,48%          |
| C5 C4 C3                                  | 6,22%                   | 5,96%          | 9,46%          |
| C11 C5 C4                                 | 3,26%                   | 3,09%          | 0,97%          |
| C11 C5 C19                                | 0%                      | 0%             | 0%             |
| C11 C5 C6                                 | 1,97%                   | 0,87%          | 0,244%         |
| C4 C5 C19                                 | 0,98%                   | 1,45%          | 2,873%         |
| C4 C5 C6                                  | 4,86%                   | 5,67%          | 0,57%          |
| C19 C5 C6                                 | 0,68%                   | 0,66%          | 1,304%         |
| C1 C19 C12                                | 2,74%                   | 2,99%          | 3,57%          |
| C1 C19 C5                                 | 2,6%                    | 2,99%          | 0,324%         |
| C1 C19 C6                                 | 2,07%                   | 0,91%          | 0,567%         |
| C12 C19 C5                                | 0%                      | 0%             | 0%             |
| C12 C19 C6                                | 0%                      | 0%             | 0%             |
| C5 C19 C6                                 | 2,64%                   | 3,06%          | 2,115%         |
| C5 C6 C19                                 | 1,03%                   | 1,29%          | 4,48%          |
| C5 C6 C7                                  | 0,26%                   | 0,06%          | 0,53%          |
| C5 C6 C14                                 | 4,06%                   | 3,49%          | 6,31%          |
| C19 C6 C7                                 | 6,16%                   | 6,03%          | 3,22%          |
| C19 C6 C14                                | 2,55%                   | 3,02%          | 1,23%          |
| C7 C6 C14                                 | 0,53%                   | 1,21%          | 0,15%          |
| C6 C7 C8                                  | 0%                      | 0%             | 0%             |
| C9 C8 C7                                  | 2,36%                   | 2,75%          | 0,72%          |
| C2 C3 C4                                  | 0,3%                    | 0,46%          | 1,101%         |
| <b>La moyenne du pourcentage d'erreur</b> | <b>1,8465%</b>          | <b>1,9899%</b> | <b>1,6776%</b> |

## 5 CONCLUSION

Dans ce travail, nous avons étudié les performances des méthodes semi-empiriques AM1, PM3, PM6 et CNDO à reproduire les distances inter-atomiques et angles de liaisons des composés **P1** ((1*S*, 3*R*, 8*R*)-2,2-dichloro-3,7,7,10-tétraméthyl-tricyclo[6,4,0,0<sup>1,3</sup>]dodec-9-ène), **P2** (1*S*, 3*R*, 8*R*, 9*S*, 11*R*)-2,2,10,10-tétrachloro-3,7,7,11-tétraméthyltetracyclo[6,5,0,01.2,0<sup>9,11</sup>6]tridecane) et **P3** (1*S*, 3*R*, 8*R*, 9*S*, 11*R*)-2,2,10,10-tétrabromo-3,7,7,11-tétraméthyltetracyclo[6,5,0,01.2,0<sup>9,11</sup>6]tridecane) les résultats calculés sont en bon accord avec les données expérimentales.

La méthode PM6 qui possède un facteur très grand alors cette méthode la plus précise pour calculés les longueurs de liaisons, par contre la méthode la plus précise pour optimiser les angles de liaisons c'est la méthode AM1 car elle possède un facteur de correction le plus grand.

## REFERENCES

- [1] M. Plattier, P. Teisseire, *Recherches*, 1974, 19, 131
- [2] E. Lassaba, H. Eljamili, A. Chekroun, A. Benharref, A. Chiaroni, C. Riche et J-P. Lavergne Synthetic communications, (1998), 28(4), 2641-2651.
- [3] H. Eljamili, A. Auhmani, M. Dakir, E. Lassaba, A. Be,harref, M. Pierrot, A. Chiaroni, C. Riche, Tetrahedron Letters 2002 43 6645-6648
- [4] A.Auhmani, E.Kossareva, E; Lassaba, M. Réglier, M. Pierrot et A. Benharref, Acta Crystallographica Section C, (1999), (55), 0114.
- [5] A. Chekron, A. jarid, A. Benharref et A. Boutalib, J. Org. Chem., (2000), 65, 4431-4434.
- [6] A. Chekroun, A. jarid, A. Benharref et A. Boutalib, Journal of Molecular structure (Techoem), (2002), 588, 201-210.
- [7] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.