

En faveur de la performance et l'efficacité des outils informatiques et ceux des appareils de diffraction des rayons X, dont la précision des calculs est très élaborés, la détermination de la structure cristalline des monocristaux demeure la méthode la plus efficace et la plus souple qu'on peut mettre en œuvre pour la caractérisation des propriétés structurales et moléculaires des matériaux cristallins.

A partir des expériences de diffraction des rayons X sur un monocristal, nous présenterons des analyses structurales précises (qui reflètent les interactions entre les atomes) ainsi que la détermination de la distribution de la densité électronique dans les solides moléculaires. Cette dernière apparaît, par conséquent, potentiellement plus utile pour la compréhension des structures cristallines des matériaux pour étudier les propriétés moléculaires telles que : les paramètres positionnels et thermiques, le moment dipolaire moléculaire ainsi que les charges nettes pour les atomes d'une molécule.

L'augmentation de la précision des résultats obtenus, grâce à l'efficacité du matériel expérimental (diffractomètre à quatre cercles) d'une part et au traitement rigoureux des données brutes d'autre part, a suscité un nombre important de travaux.

Dans cette étude, l'intérêt s'est porté sur la détermination de la structure cristalline par la méthode de la diffraction des rayons X sur un monocristal d'un composé organique (4-Méthoxy Benzen Carbothio Amide (4-MBCA)) de formule chimique C_8H_9NOS , ce composé se trouve dans un système cristallin orthorhombique avec un groupe de symétrie $P2_12_12_1$, donc il est noncentrosymétrique. L'objectif de cette étude est l'étude des propriétés électroniques (transfert de charge).

En effet, l'expérience permet d'obtenir les modules des facteurs de structure à partir des intensités diffractées mesurées par la diffraction des rayons X. Pour calculer la densité électronique, il est nécessaire de connaître non seulement ces

facteurs mais aussi leurs phases. Dans le cas d'une structure non-centrosymétrique, la phase peut prendre une valeur comprise entre 0 et 2π et son estimation reste approximative. Pour une structure centrosymétrique, les phases des facteurs de structures sont supposées égales aux phases calculées à partir de la superposition d'atomes, c'est-à-dire qu'elles peuvent être égales à 0 et π . Pour établir la distribution de la charge électronique à partir des facteurs de structures, nous allons utiliser des modèles mathématiques, qui sont développés en détail dans le premier chapitre. Les corrections apportées aux intensités diffractées sont également détaillées dans ce chapitre.

Dans le deuxième chapitre, nous exposerons les dispositifs expérimentaux qui sont utilisés pour récolter les intensités diffractées par le monocristal en utilisant un diffractomètre automatique Nonius CAD4. Les intensités diffractées mesurées qui sont les données expérimentales sont enregistrées et traitées par le formalisme de R. H. Blessing [1].

Les intensités diffractées sont utilisées pour déterminer les paramètres positionnels pour chaque atome de la molécule. Puis, ces derniers sont affinés par un modèle sphérique utilisant la méthode des moindres carrés qui sert à les améliorer et par suite à déterminer les paramètres thermiques. Ces résultats nous vont permettre de décrire la répartition des charges électroniques expérimentales. Le troisième chapitre de ce mémoire est consacré aux résultats obtenus par la résolution et l'affinement de ces paramètres pour effectuer l'analyse structurale et thermique de la molécule de ce composé. Ce dernier va présenter dans le quatrième chapitre.

Avec le modèle Kappa [2] et le formalisme de Hansen et Coppens [3], la densité électronique est exprimée par un développement de fonctions analytiques dont les divers paramètres sont affinés en même temps que les paramètres atomiques : les paramètres multipolaires. Ces paramètres sont utilisés pour illustrer la répartition des charges électroniques sur les atomes et le long des différentes liaisons de la molécule. Les résultats obtenus et la représentation de la distribution électronique correspondants sont présentés dans le dernier chapitre.