Conclusion générale

Les travaux décrits dans ce mémoire rapportent une étude en méthode DFT de la structure électronique de complexes organiques et des molécules organiques, à l'aide du logiciel ADF.

Nous avons étudié les propriétés géométriques et énergétiques, des isomères 1-phénol -2naphtol il sort de cette étude

L'isomère avec Br en position para est le plus favoris.

Le classement du gap n'est pas sur l'instar du classement de stabilité.

La présence de trois Br est un facteur de déstabilisation.

Un rétrécissement ou élongation des les liaisons s est observé.

Les complexes calculés montrent un plan carré avec une couche de 16é.

Les spectres de fréquences calculés pour les structures organiques s'éloignent de 30 cm-1 des spectres de la littérature.

Pour les complexes aucune oscillation métallique n'est observée.

Pour les perspectives

Synthèse ces composés hypothétiques et faire une comparaison.

Etendre l'étude par d'autres méthodes de calculs.