ملخص

تتمحور الاعمال المنجزة في هذه المذكرة حول الدراسة بواسطة نظرية الكثافة الالكترونية والمركبات العضوية و معقداتها.

تواجد مجموعة الهيدروكسيل على النفطالين يؤدي الى الاتزان (ازو, هيدرازو) وتكون المماكبات المحسوبة :

(AZO ORTHO C4 PARA C6 ORTHO C2), (HYDRAZO ORTHO C4 PARA C6 ORTHO C2).

هذه المماكبات ثابتة طاقويا

تم كذ لك حساب المعقد $Ni(azo)_2$ با التناظرCi و الذي يعطي معا المعقد المستوي المربع.

الكلمات المفتاحية:الاهتزازات , الفجوة الالكترونية , المماكبات,المدار الجزيئي, ADF.

Abstract

The work carried out in this note focuses on the study by the electronic theory of the organic complex. The presence of the hydroxyl group on the naphthalene leads to equilibrium (Azo ,Hydrazo) and gives the following isomers .

(AZO ORTHO C2 ORTHO C4 PARA C6) , (Hydrazo ORTHO C2 ORTHO C4 PARA C6) .

The complex Ni $(azo)_2$ was also calculated in the Ci group symmetry ,which led to the complexes square plane .

Keywords: ADF, molecular orbital, gap, vibration, isomérs.

Résumé

Les travaux menés dans ce mémoire se concentrent sur l'étude de la théorie électronique du ligand et le métal de transition chélate au ligand.
La présence du groupe hydroxyle sur le naphtalène conduit à l'équilibre (Azo et Hydrazo).

Ces accumulateurs AZO ORTHO C2 PARA C6 ORTHO C4, HYDRAZO ORTHO C2 PARA C6 ORTHO C2 sont stationnaires.

Le complexe Ni $(azo)_2$ a été calculé en symétrie Ci, ce qui donne un complexe carré.

Mots clés : ADF, orbitale moléculaire, gap, vibration, isomère.