

# Optimisation Géométrique des prototypes et analyse des fichiers de sorties (Output files)

Méthode Semi-Empirique GFN2-xTB avec ORCA 6.1.0

Corine KENGNE

October 30, 2025

**Abstrat:** Ce document présente une optimisation de géométrie quantique des molécules de BODIPY, Iodo-BODIPY, TPP-BODIPY réalisée avec le logiciel ORCA et la méthode semi-empirique GFN2-xTB (version 6.7.1). L'optimisation, effectuée en coordonnées internes redondantes, a convergé après 15 cycles pour le BODIPY, atteignant une énergie totale finale de -39.5306 Eh et un gradient normatif de 0.00056 Eh/a0, indiquant une structure proche du minimum énergétique. Pour l'Iodo-BODIPY, l'optimisation a convergé après 13cycle avec une énergie totale finale de 46, 138650144869 Eh. Et celle du TPP-BODIPY a démontré une convergence exceptionnelle dès le premier cycle avec une énergie totale -87.684719166344Ha et un Gap HOMO-LUMO de 0.778063388782 eV.

## 1 BODIPY de base

### 1.1 Critères de convergence de la géométrie S0

La convergence de l'énergie totale et de la géométrie du BODIPY de base a été atteinte par une procédure d'optimisation de géométrie utilisant la méthode semi-empirique GFN2-xTB au sein du programme ORCA (version 6.1.0). L'optimisation a nécessité un total de 15 cycles pour satisfaire tous les critères de convergence.

#### 1.1.1 Tolérances de Convergence

Les tolérances de convergence utilisées étaient :

- Changement d'énergie (TolE) :  $5,0 \times 10^{-6} E_h$
- Gradient maximum (TolMAXG) :  $3,0 \times 10^{-4} E_h/\text{bohr}$
- Gradient RMS (TolRMSG) :  $1,0 \times 10^{-4} E_h/\text{bohr}$
- Déplacement maximum (TolMAXD) :  $4,0 \times 10^{-3} \text{ bohr}$
- Déplacement RMS (TolRMSD) :  $2,0 \times 10^{-3} \text{ bohr}$

#### 1.1.2 Convergence de l'Énergie et de la Géométrie

- **Évolution de l'Énergie Totale** L'énergie totale du système a convergé vers une valeur minimale :
  - Énergie initiale (Cycle 1) :  $-39.511355428841 E_h$
  - Énergie après 5 cycles :  $-39.527461604954 E_h$
  - **Énergie finale (Cycle 15) :  $-39.530634782095 E_h$**

Le changement d'énergie au cours du dernier cycle était de  $-0.0000038633 E_h$ , inférieur à la tolérance de  $5,0 \times 10^{-6} E_h$ .

- **Paramètres Géométriques Clés** L'optimisation a été réalisée en coordonnées internes redondantes (120 degrés de liberté pour 21 atomes). Un exemple de changement géométrique notable est l'évolution de l'angle dièdre  $D(N_{10}, B_{11}, N_9, C_1)$  qui est passé de  $0.39^\circ$  (Cycle 14) à  **$0.12^\circ$**  (Cycle 15), indiquant une structure très plane autour du noyau BODIPY. Le moment dipolaire total a également varié :

- Initial (Cycle 1) : 5.29469 Debye
- Final (Cycle 15) : **5.02096 Debye**

## 1.2 Tableaux Récapitulatifs des coordonnées et de la convergence

### 1.2.1 Coordonnées Cartésiennes Optimisées

Table 1: Coordonnées cartésiennes finales après le Cycle 15 (Ångström)

Atome	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)
C	-1.719306	4.912130	-0.145172
C	-2.890391	4.178955	-0.045991
C	-4.246269	4.588309	-0.054497
C	-5.007874	3.449974	0.076851
C	-4.115151	2.371724	0.162696
C	-0.482986	4.288051	-0.110234
C	0.827084	4.820479	-0.190963
C	1.695991	3.757456	-0.103017
C	0.912527	2.601668	0.027851
N	-2.864154	2.806140	0.089657
N	-0.375270	2.918737	0.023518
B	-1.576152	1.944876	0.145080
F	-1.512370	1.273091	1.343918
F	-1.564068	1.053566	-0.903803
H	2.767233	3.786380	-0.128436
H	1.226835	1.579752	0.121687
H	1.067646	5.859938	-0.298255
H	-4.586200	5.601055	-0.147740
H	-6.076933	3.379941	0.110096
H	-4.328915	1.325472	0.270562
H	-1.769184	5.985326	-0.251752

### 1.2.2 Convergence Énergétique et Géométrique

Table 2: Évolution de la convergence au cours des cycles d'optimisation

Cycle	Énergie ( $E_h$ )	$\Delta E$ ( $E_h$ )	RMS Grad ( $E_h/\text{bohr}$ )	Max Grad ( $E_h/\text{bohr}$ )	RMS Step (bohr)	Max Step (bohr)	Conv.
<b>Tolérance</b>	–	$5,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-4}$	$3,0 \times 10^{-4}$	$2,0 \times 10^{-3}$	$4,0 \times 10^{-3}$	<b>YES</b>
1	–39.511355	–	0.008976	0.039292	0.027386	0.112443	NO
2	–39.518195	–0.006840	0.002344	0.007862	0.027386	0.125145	NO
3	–39.522878	–0.004683	0.001290	0.004445	0.027386	0.128101	NO
4	–39.525390	–0.002512	0.000973	0.004700	0.039061	0.174975	NO
5	–39.527462	–0.002072	0.000868	0.003531	0.035773	0.144067	NO
6	–39.528731	–0.001270	0.000783	0.003988	0.035890	0.141807	NO
7	–39.529626	–0.000895	0.000624	0.002997	0.028364	0.121006	NO
8	–39.530055	–0.000429	0.000438	0.001954	0.019749	0.084672	NO
9	–39.530254	–0.000200	0.000302	0.000934	0.018388	0.072847	NO
10	–39.530402	–0.000147	0.000265	0.001012	0.017703	0.064960	NO
11	–39.530512	–0.000110	0.000288	0.001475	0.014876	0.057967	NO
12	–39.530582	–0.000070	0.000250	0.001213	0.009961	0.040242	NO
13	–39.530617	–0.000035	0.000309	0.000862	0.004500	0.017073	NO
14	–39.530630	–0.000013	0.000087	0.000274	0.001666	0.006438	NO
<b>15</b>	<b>–39.530635</b>	<b>–0.000004</b>	<b>0.000052</b>	<b>0.000244</b>	<b>0.000711</b>	<b>0.002566</b>	<b>YES</b>

### 1.3 Conclusion

Au cycle 15, tous les critères de convergence étaient satisfaits :

1. ✓ **Changement d'énergie** :  $-0.0000038633 E_h < 5,0 \times 10^{-6} E_h$
2. ✓ **RMS gradient** :  $0.0000521974 E_h/\text{bohr} < 1,0 \times 10^{-4} E_h/\text{bohr}$
3. ✓ **Max gradient** :  $0.0002441395 E_h/\text{bohr} < 3,0 \times 10^{-4} E_h/\text{bohr}$
4. ✓ **RMS step** :  $0.0007105609 \text{ bohr} < 2,0 \times 10^{-3} \text{ bohr}$
5. ✓ **Max step** :  $0.0025660111 \text{ bohr} < 4,0 \times 10^{-3} \text{ bohr}$

L'optimisation a convergé vers une géométrie stationnaire après **15 cycles**, avec une énergie finale de **–39.530634782095  $E_h$** . La structure finale présente une géométrie plane caractéristique du noyau BODIPY, validée par les faibles valeurs des angles dièdres.

## 2 IODO-BODIPY

### 2.1 Évolution des Paramètres Structurels

Nous analysons ici comment les paramètres structurels clés évoluent entre la structure initiale (Cycle 1) et la structure finale optimisée (Cycle 13).

#### 2.1.1 Changements dans les Longueurs de Liaison

Les changements dans les longueurs de liaison sont généralement de petite ampleur, mais ils sont cruciaux pour atteindre l'état de plus basse énergie. Pendant les premiers cycles, les plus grands changements de liaisons observés sont de  $0.0076 \text{ \AA}$  après le Cycle 1, diminuant ensuite à  $0.0067 \text{ \AA}$  après le Cycle 2, et atteignant seulement  $0.0001 \text{ \AA}$  lors de la convergence finale (Cycle 13).

#### 2.1.2 Changements dans les Angles de Valence

Les angles de valence peuvent subir des ajustements importants, en particulier autour des centres atomiques qui réajustent leur hybridation ou leur encombrement stérique. L'ajustement structural majeur se produit au niveau des angles impliquant le bore (B11) et l'azote (N7), suggérant une réorganisation significative du cycle central de la molécule (probablement un BODIPY).

Table 3: Évolution des longueurs de liaison durant l’optimisation

Liaison	Initial (Å)	Final (Å)	$\Delta$ (Å)	Tendance
B11-F10 (B-F)	1.3891	1.3698	-0.0193	Diminution significative
B11-F9 (B-F)	1.3612	1.3698	+0.0086	Augmentation modérée
B11-N7 (B-N)	1.5490	1.5564	+0.0074	Augmentation modérée
I12-C3 (I-C)	2.0832	2.0837	+0.0005	Très faible augmentation
C14-C1 (C-C)	1.3972	1.3860	-0.0112	Diminution modérée
N15-C5 (N-C)	1.3264	1.3242	-0.0022	Légère diminution

Le déplacement maximal observé pour les angles est passé de  $1.52^\circ$  après le Cycle 1 à seulement  $0.02^\circ$  lors de la convergence (Cycle 13).

Table 4: Évolution des angles de valence durant l’optimisation

Définition de l’Angle	Cycle 1 ( $^\circ$ )	Cycle 13 ( $^\circ$ )	Changement ( $^\circ$ )	Tendance
A(C 6, N 7, B 11)	129.73	126.47	-3.26	Diminution significative
A(B 11, N 7, C 14)	116.90	124.94	+8.05	Augmentation très significative
A(C 3, C 0, C 14)	106.41	106.07	-0.34	Légère diminution
A(C 0, C 14, C 1)	130.53	130.57	+0.04	Quasi stable

### 2.1.3 Changements dans les Angles Dièdres

Les angles dièdres indiquent souvent des changements conformationnels et sont généralement les paramètres qui subissent les variations les plus importantes. Ces changements (pouvant atteindre plus de  $29$  degrés) confirment que l’optimisation GFN2-xTB a entraîné un réarrangement conformationnel substantiel de la structure moléculaire pour atteindre un minimum d’énergie.

Le déplacement maximal observé pour les dièdres est passé de  $5.62^\circ$  après le Cycle 1, a augmenté à  $6.98^\circ$  au Cycle 3 (indiquant une phase de recherche conformationnelle intense), et a finalement diminué à  $0.11^\circ$  lors du dernier cycle convergé.

Table 5: Évolution des angles dièdres durant l’optimisation

Définition du Dièdre	Cycle 1 ( $^\circ$ )	Cycle 13 ( $^\circ$ )	Changement ( $^\circ$ )	Tendance
D(B 11, N 7, C 6, C 3)	-167.34	179.94	$\sim 12.60$	Rotation vers la planarité
D(F 9, B 11, N 7, C 14)	148.20	118.78	-29.42	Changement conformationnel majeur
D(C 8, N 15, B 11, F 9)	-147.69	-118.83	+28.86	Changement conformationnel majeur

## 2.2 Convergence et Propriétés Globales

### 2.2.1 État Final de Convergence

L’optimisation s’est achevée avec succès au Cycle 13 après que tous les critères ont été satisfaits. Le programme a déclaré officiellement : “*THE OPTIMIZATION HAS CONVERGED*”. Au cours

de l'optimisation, plusieurs propriétés moléculaires évoluent de manière significative :

- **Énergie totale** : Elle passe de  $-46.133078687452 E_h$  après le Cycle 1 à  $-46.138650144869 E_h$  à la convergence finale (Cycle 13). Le changement d'énergie lors du dernier pas est très faible ( $-0.0000006650 E_h$ , bien en dessous de la tolérance de  $0.0000050000 E_h$ ).
- **Gradient cartésien** : La norme du gradient chute considérablement, passant de  $0.025061140038 E_h/\text{bohr}$  après le Cycle 1 à  $0.000141323400 E_h/\text{bohr}$  à la convergence finale.
- **Moment dipolaire** : Il augmente légèrement, passant d'une magnitude de  $1.74349 \text{ a.u.}$  (soit  $4.43160 \text{ Debye}$ ) après le Cycle 1 à  $1.84204 \text{ a.u.}$  (soit  $4.68210 \text{ Debye}$ ) à la convergence finale.
- **Écart HOMO-LUMO** : Il passe de  $1.416598550882 \text{ eV}$  après le Cycle 1 à  $1.430468484259 \text{ eV}$  à la convergence finale.

### 2.2.2 Analyse des Derniers Cycles

L'approche de l'optimisation a montré une diminution constante des métriques d'itération en itération :

- **Cycle 11** : Le changement d'énergie ( $7.316 \times 10^{-6} E_h$ ) et le RMS Step ( $2.396 \times 10^{-3} \text{ bohr}$ ) étaient non convergés.
- **Cycle 12** : Quatre critères sur cinq étaient satisfaits. Seul le critère de Déplacement Maximal ( $5.585 \times 10^{-3} \text{ bohr}$ ) restait non convergé.
- **Cycle 13** : Tous les critères sont satisfaits, confirmant l'atteinte du minimum local.

Les changements dans les paramètres internes sont devenus extrêmement faibles au dernier cycle, confirmant que la structure est très proche d'un minimum parfait :

- Max(Bonds) :  $0.0001 \text{ \AA}$
- Max(Angles) :  $0.02^\circ$
- Max(Dihedrals) :  $0.11^\circ$

### 2.3 Coordonnées Cartésiennes Optimisées

Les coordonnées suivantes correspondent à la géométrie finale de la structure après le cycle 13. L'énergie totale finale de la structure optimisée est de  $-46.138650144869 E_h$ .

### 2.4 Tolérances et Critères de Convergence

L'optimisation géométrique ORCA GFN2-xTB (version 6.1.0) a été menée en coordonnées internes redondantes (2022) avec la méthode BFGS. Les tolérances définies au début de l'exécution sont des seuils stricts que la géométrie doit satisfaire pour être considérée comme convergée.

Table 6: Coordonnées cartésiennes optimisées (Angström)

Atome	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)
C	-4.788512	2.850379	-0.090537
C	-2.254068	3.068009	-0.047808
C	0.283107	2.883753	-0.004088
C	-5.590090	1.731202	-0.102820
C	1.099189	1.775169	0.011763
C	0.276893	0.637215	-0.000532
C	-4.753056	0.604099	-0.087623
N	-3.488422	0.996178	-0.066851
C	-1.043666	2.393268	-0.026106
F	-2.249119	-0.698666	1.087096
F	-2.209509	-0.701934	-1.171721
B	-2.234396	0.074575	-0.043530
I	-7.672494	1.666900	-0.138168
I	3.182242	1.738356	0.047729
C	-3.455474	2.377226	-0.067644
N	-0.992727	1.012734	-0.022919
H	-5.094901	3.877379	-0.096798
H	-2.261403	4.147275	-0.049209
H	0.576109	3.914667	-0.000825
H	0.559167	-0.398247	0.006225
H	-5.021805	-0.434974	-0.090852

Table 7: Tolérances de convergence définies

Critère	Tolérance Requise	Unité
Energy Change	$5.0000 \times 10^{-6}$	$E_h$
MAX Gradient	$3.0000 \times 10^{-4}$	$E_h/\text{bohr}$
RMS Gradient	$1.0000 \times 10^{-4}$	$E_h/\text{bohr}$
MAX Displacement	$4.0000 \times 10^{-3}$	bohr
RMS Displacement	$2.0000 \times 10^{-3}$	bohr

Table 8: Convergence de l'optimisation géométrique au Cycle 13

Catégorie	Critère	Valeur Finale	Tolérance	Convergé
Convergence Énergétique	Changement d'énergie	$-6.650 \times 10^{-7} E_h$	$5.000 \times 10^{-6} E_h$	OUI
Convergence des Gradients	Gradient Max	$5.830 \times 10^{-5} E_h/\text{bohr}$	$3.000 \times 10^{-4} E_h/\text{bohr}$	OUI
	Gradient RMS	$1.770 \times 10^{-5} E_h/\text{bohr}$	$1.000 \times 10^{-4} E_h/\text{bohr}$	OUI
Convergence Géométrique	Déplacement Max	$1.914 \times 10^{-3} \text{ bohr}$	$4.000 \times 10^{-3} \text{ bohr}$	OUI
	Déplacement RMS	$4.871 \times 10^{-4} \text{ bohr}$	$2.000 \times 10^{-3} \text{ bohr}$	OUI

## 2.5 Conclusion

L'optimisation géométrique utilisant la méthode GFN2-xTB (version 6.7.1 du noyau xtb) dans ORCA (version 6.1.0) a convergé avec succès. L'énergie totale finale obtenue pour la géométrie optimisée est de  $-46.138650144869 E_h$ . La convergence a été déclarée après 13 cycles, car tous les critères stricts basés sur l'énergie, les gradients et les déplacements ont été satisfaits. Le résultat final représente un point stationnaire (un minimum local) sur la surface d'énergie potentielle.

En résumé, l'optimisation GFN2-xTB a provoqué un affinement structural notable, caractérisé par :

- Des changements importants dans les angles dièdres (jusqu'à  $29^\circ$ ) indiquant une réorganisation conformationnelle substantielle
- Une réorganisation significative des angles impliquant le bore et l'azote dans le cycle central
- Un ajustement fin des longueurs de liaison B-F et C-C
- Une structure finale stable et convergée représentant un minimum d'énergie local

## 3 TRIPHENYLPHOSPHONIUM-BODIPY

L'optimisation GFN2-xTB de la molécule BODIPY a abouti à une convergence complète de la géométrie moléculaire. L'optimisation a été réalisée en utilisant la méthode GFN2-xTB implémentée dans le programme ORCA Version 6.1.0.

### 3.1 Coordonnées Internes

Les paramètres géométriques optimisés incluent :

- **Longueurs de liaison (B)** : Toutes les liaisons C-C, P-C, B-N, et les liaisons dans les cycles aromatiques
- **Angles de valence (A)** : Angles entre trois atomes consécutifs
- **Angles dièdres (D)** : Angles de torsion décrivant la conformation tridimensionnelle

### 3.2 Critères et Tolérances de Convergence

#### 3.2.1 Tolérances Définies

Les tolérances de convergence ont été définies selon les critères standards de la méthode GFN2-xTB :

Table 9: Tolérances de convergence définies pour l'optimisation

Critère	Tolérance
Changement d'énergie (TolE)	$5,0 \times 10^{-6} E_h$
Gradient maximum (TolMAXG)	$3,0 \times 10^{-4} E_h a_0^{-1}$
Gradient RMS (TolRMSG)	$1,0 \times 10^{-4} E_h a_0^{-1}$
Déplacement maximum (TolMAXD)	$4,0 \times 10^{-3} a_0$
Déplacement RMS (TolRMSD)	$2,0 \times 10^{-3} a_0$

### 3.2.2 Résultats de Convergence

L'optimisation a convergé après le **premier cycle d'optimisation (Cycle 1)**, démontrant que la géométrie initiale était déjà très proche du minimum énergétique.

Table 10: Valeurs finales des critères de convergence

Critère	Valeur Finale	Tolérance	Convergé
Gradient RMS	$2,475\,31 \times 10^{-5} E_h a_0^{-1}$	$1,0 \times 10^{-4} E_h a_0^{-1}$	OUI
Gradient MAX	$1,314\,44 \times 10^{-4} E_h a_0^{-1}$	$3,0 \times 10^{-4} E_h a_0^{-1}$	OUI
Déplacement RMS	$3,979\,85 \times 10^{-4} a_0$	$2,0 \times 10^{-3} a_0$	OUI
Déplacement MAX	$1,678\,95 \times 10^{-3} a_0$	$4,0 \times 10^{-3} a_0$	OUI

La norme du gradient cartésien au point stationnaire final était de  $3,937\,48 \times 10^{-4} E_h/a_0$ .

### 3.2.3 Analyse des Écarts de Convergence

Table 11: Écarts entre valeurs finales et tolérances

Critère	Facteur de Réduction	Commentaire
RMS Gradient	$\times 4.0$	4 fois plus petit
MAX Gradient	$\times 2.3$	2.3 fois plus petit
RMS Step	$\times 5.0$	5 fois plus petit
MAX Step	$\times 2.4$	2.4 fois plus petit



### 3.3 Propriétés Moléculaires Calculées

Plusieurs propriétés moléculaires ont été calculées lors de l'évaluation du point stationnaire final :

Table 12: Propriétés moléculaires au point stationnaire

Propriété	Valeur	Unité
Énergie Totale	−87.684719166344	$E_h$
Norme du Gradient	0.000393747661	$E_h/a_0$
HOMO-LUMO Gap	0.778063388782	eV
Énergie HOMO	−0.3095235	$E_h$
Énergie HOMO	−8.4226	eV
Énergie LUMO	−0.2809302	$E_h$
Énergie LUMO	−7.6445	eV
Moment Dipolaire	5.30870	a.u.
Moment Dipolaire	13.49364	Debye
Charge Totale	$-5 \times 10^{-12}$	e
Énergie SCC	−89.118098784427	$E_h$
Énergie de Répulsion	1.433379618084	$E_h$

### 3.4 Changements des Paramètres Géométriques

#### 3.4.1 Variations Maximales

Les variations maximales des coordonnées internes lors du dernier pas d'optimisation étaient extrêmement faibles :

Table 13: Changements maximaux des coordonnées internes

Type de Coordonnée	Changement Maximal
Longueurs de Liaison	0,0001 Å
Angles de Valence	0,02°
Angles Dièdres	0,10°
Angles Impropres	0,00°

#### 3.4.2 Exemples de Paramètres Optimisés

Table 14: Exemples de changements géométriques

Paramètre	Type	Valeur Init.	Step	Valeur Finale
B(C36, C35)	Liaison	1,4234 Å	0,0000 Å	1,4234 Å
B(B46, N45)	Liaison	1,5424 Å	−0,0001 Å	1,5422 Å
A(C4, P0, C12)	Angle	109,37°	−0,01°	109,36°
D(C6, C4, P0, C15)	Dièdre	−111,23°	−0,05°	−111,27°
D(N44, B46, N45, C36)	Dièdre	−25,24°	0,05°	−25,19°
D(C11, C12, P0, C4)	Dièdre	175,30°	−0,10°	175,20°

### 3.5 Coordonnées Cartésiennes Optimisées

Table 15: Coordonnées cartésiennes optimisées (en Angströms)

N°	Atome	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)
0	P	-6.362013	10.819443	1.431838
1	C	-7.722965	13.981494	4.443176
2	C	-7.570400	14.300353	3.102688
3	C	-7.189176	13.324646	2.200875
4	C	-6.977746	12.019046	2.641031
5	C	-7.479312	12.690425	4.885032
6	C	-7.096336	11.707185	3.990112
7	C	-8.684830	11.449100	-0.069734
8	C	-9.488672	11.296850	-1.185537
9	C	-9.063034	10.525164	-2.254469
10	C	-7.830887	9.888222	-2.207274
11	C	-7.025352	10.029090	-1.095204
12	C	-7.438410	10.832696	-0.031589
13	C	-3.304082	12.707562	-0.519636
14	C	-4.536556	12.130410	-0.264030
15	C	-4.765124	11.527125	0.965504
16	C	-2.313383	12.691993	0.448039
17	C	-2.550337	12.104795	1.682445
18	C	-3.777170	11.528677	1.947372
19	H	-8.612256	6.327076	4.550330
20	H	-8.022995	14.744254	5.145802
21	H	-7.744005	15.310341	2.762096
22	H	-7.584692	12.447651	5.931359
23	H	-6.901853	10.701027	4.330291
24	H	-7.053808	13.565772	1.154211
25	H	-5.310677	12.136702	-1.018947
26	H	-3.117809	13.169130	-1.477958
27	H	-1.353094	13.139667	0.240915
28	H	-1.777374	12.096036	2.435599
29	H	-3.976336	11.057806	2.900374
30	H	-6.072339	9.519435	-1.032071
31	H	-7.506168	9.275113	-3.034438
32	H	-9.696143	10.409367	-3.120980
33	H	-10.454254	11.779241	-1.217991
34	H	-9.020029	12.049507	0.764428
35	C	-6.187907	9.213847	2.117359
36	C	-7.325774	8.677584	2.783417
37	C	-8.646659	9.138521	2.855392
38	C	-9.357179	8.203539	3.602516
39	C	-8.458553	7.214009	3.968505
40	C	-5.064001	8.375268	1.884062
41	C	-3.978692	8.462525	1.001041
42	C	-3.218008	7.312130	1.182184
43	C	-3.846585	6.562983	2.163268
44	N	-7.242483	7.497559	3.466509
45	N	-4.959324	7.196390	2.573218
46	B	-5.911328	6.760710	3.705645

*Suite à la page suivante*

Table 15 – *suite*

N°	Atome	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)
47	F	−5.382344	7.158465	4.931482
48	F	−6.090597	5.396159	3.695919
49	H	−2.318147	7.048697	0.661434
50	H	−3.572240	5.618138	2.588606
51	H	−3.790760	9.247512	0.293004
52	H	−9.029163	10.026170	2.383930
53	H	−10.400675	8.234081	3.848375

### 3.6 Conclusion

L'optimisation GFN2-xTB de la molécule TPP-BODIPY a démontré une convergence exceptionnelle dès le premier cycle, avec des valeurs de gradient et de déplacement largement inférieures aux tolérances requises. Les changements géométriques entre l'état initial et final sont minimes (de l'ordre de 0,0001 Å pour les liaisons, 0,02° pour les angles de valence, et 0,10° pour les angles dièdres), confirmant que la structure obtenue représente un point stationnaire précis sur la surface d'énergie potentielle.

Les propriétés électroniques calculées, notamment le gap HOMO-LUMO de 0,778 eV et le moment dipolaire de 13,49 Debye, fournissent des informations importantes sur le comportement électronique de cette molécule.