



# Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbès

Faculté des Sciences

Département de Chimie

Docorat en Chimie

**Spécialité:** Chimie théorique et modélisation moléculaire

**Présenté par :** YOUSFI Nouredine

## **ETUDE CONFORMATIONNELLE DE DISACCHARIDES KAPPA- ET IOTA- CARRABIOSE PAR LES METHODES QUANTIQUES**

La fonctionnelle de densité B3LYP a été utilisée avec l'ensemble de base 6-31G(d) pour réaliser les cartes énergétiques iso-potentielles relaxées de la forme chargée du  $\kappa$ -carrabiose dans le vide et pour la forme neutre, initialement dans le vide, puis dans un milieu simulant la présence de l'eau comme solvant en utilisant le modèle Onsager. Une seule conformation de départ a été considérée pour effectuer tous les calculs. Les cartes énergétiques rigides ont été ensuite effectuées, soit par l'ajout de fonctions diffuses ou de polarisation sur la base définie pour obtenir de cette manière les cartes énergétiques : 6-311G(d)//6-31G(d), 6-311G(d,p)//6-31G(d), et 6-3111G(d,p)//6-31G(d). Ces dernières ont été examinées attentivement. Les structures obtenues correspondant aux conformères de plus basses énergies ont été, ensuite, entièrement optimisé en utilisant des ensembles de base différents avec la méthode B3LYP. Dans le cas du disaccharide  $\kappa$ -carrabiose chargé, dans le vide, une inversion en terme d'énergie a été observée pour les deux premiers minima, ceci a été attribuée à la grande valeur de l'intervalle de  $30^\circ$ , pour les angles dièdres de la liaison glycosidique, qui pourrait conduire à l'exclusion d'une valeur intermédiaire correspondant au minimum réel de l'énergie. Nous suggérons donc que, après l'établissement des cartes d'énergie potentielle, il est essentiel de procéder à des optimisations complètes des conformères de plus basses énergies. Les calculs utilisant la méthode MP2, qui tient compte de la corrélation électronique, avec la base 6-31G(d) ont également été effectués pour les conformères de plus basses énergies des deux disaccharides en phase gazeuse.

Une étude du disaccharide  $\iota$ -carrabiose a été réalisée en utilisant la méthode B3LYP/6-31G(d) avec la réalisation des cartes conformationnelles énergétiques. D'autre part, une étude préliminaire, par les méthodes théoriques, des interactions entre le  $\kappa$ -carrabiose et quelques ions des métaux alcalins a été effectuée.

**Mots clés :**  $\kappa/\iota$ -carrabiose; disaccharide; liaison glycosidique; cartes énergétique relaxées; conformère, méthodes de mécanique quantique

