



# Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbès

Faculté des Sciences

Département de Chimie

MEMOIRE DE MAGISTER

EN CHIMIE

Spécialité: Chimie physique, théorique et modélisation moléculaire

Présenté par : FODIL Rachida

## ***Méthodes empiriques et quantiques appliquées à l'étude conformationnelle du $\kappa$ -carrabiose en présence du solvant explicite***

Des optimisations de géométrie ont été effectuées pour un ensemble de cinq conformères du disaccharide  $\kappa$ -carrabiose sous sa forme neutre par une méthode de Mécanique Classique qui est la Mécanique Moléculaire en utilisant le champ de force AMBER pour les molécules isolées et le champ de force OPLS pour celles solvatées. Les solvations ont été effectuées en utilisant des boîtes de simulations avec des conditions aux limites périodiques dans le but d'avoir une meilleure description de nos systèmes. La conformation "tg" du groupement exocyclique "hydroxyméthyle" n'est pas affectée par l'ajout des molécules d'eau et la structure la plus stable du  $\kappa$ -carrabiose solvate correspond à celle du conformère "A".

Pour l'étude en Mécanique Quantique, l'hétéro-dimère et l'hétéro-trimère ont été complètement optimisés en utilisant les deux fonctionnelles hybrides B3LYP et B3PW91 et la base d'orbitales 6-31+G(d). La correction CounterPoise de l'erreur de la superposition des bases d'orbitales "BSSE-CP" a été introduite durant et après l'optimisation des deux complexes aux deux niveaux de théories : B3LYP/6-31+G(d) et B3PW91/6-31+G(d). Les résultats ont montré que l'inclusion de la correction BSSE-CP durant l'optimisation de ces deux systèmes n'est pas nécessaire.

Les optimisations de géométrie de ces deux derniers aux quatre niveaux de théorie : B3LYP/6-31+G(d), B3LYP/6-31++G(d), B3LYP/6-31+G(d, p), B3LYP/6-31++G(d, p) ont prouvé que l'addition des fonctions de polarisation à la base d'orbitales 6-31+G(d) est le moyen efficace pour réduire la BSSE.

**Mots clés :**  $\kappa$ -carrabiose; disaccharide, mécanique moléculaire ; champ de force ; *conditions aux limites périodiques*, DFT ; l'erreur de superposition de bases (BSSE) ; la correction CounterPoise (Cp).

