



# Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbès

Faculté des Sciences

Département de Chimie

**MEMOIRE DE MAGISTER**

**EN CHIMIE**

**Spécialité:** Chimie organique macromoléculaire

**Option:** Polymères biodégradable à usage pharmaceutique.

**Présenté par : BEKHTI - BENSALEM Nabila**

## ***Etude Structurale et Spectroscopique du Rhamnose***

Le Rhamnose est un 6-désoxy-Hexose du type aldose, c'est un monosaccharide naturel isolé à partir du Nerprun (Rhamnus) et du Sumac. En le combinant avec le glucose, on obtient un diholoside appelé : Rutinose.

Le but du mémoire, a été de reproduire le spectre vibrationnel du Rhamnose monohydraté à l'aide du calcul des modes normaux de vibration à l'état cristallin. Ceci en procédant à un ajustement des fréquences à partir de la fonction potentielle Urey-Bradley-Shimanoushi-modifié.

La méthode DFT, B3lyp/6-311g (d, p) utilisée dans les calculs quantiques dans le but d'étudier la conformation du Rhamnose en molécule isolé, a prouvé son efficacité car elle tient compte de l'énergie de corrélation et elle n'est pas très coûteuse en temps de calcul par rapport d'autres méthodes telle que les méthodes post-HF.

Nous nous sommes aussi intéressés au rôle du solvant dans la stabilité de la molécule en particulier en utilisant le modèle dipôle introduit par Onsager.

**Mots clés :** Rhamnose, les modes normaux de vibration, Urey-Bradley-Shimanoushi, conformation, méthodes quantiques.