



Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbes

Faculté des Sciences

Département de Chimie

MEMOIRE DE MAGISTER

EN CHIMIE

Spécialité: Chimie physique, théorique et modélisation moléculaire

Présenté par : LAZREG Abbassia

Dynamique Harmonique, Etude spectroscopique et Calculs quantiques d'énergies et de Structures du monosaccharide le Méthyl- β -D-Xylopyranoside

- ✓ Pour le monosaccharide que nous avons étudié le *Me- β -D-Xylopyranoside*, des calculs théoriques de mécanique quantique, qui englobent les méthodes *ab initio* et la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) ont été entreprises. Celles-ci décrivent le système étudié par résolution de l'équation de Schrödinger.

Les résultats obtenus indiquent que plus la base utilisée est prolongée, plus l'énergie obtenue est minimale. Ensuite, on a procédé à une solvation avec différents modèles où le solvant a été traité d'une manière implicite et explicite. Ceci nous a permis de confirmer l'influence de la cavité sur la stabilité de la molécule étudiée. La présence de l'eau comme solvant dans les systèmes biologique a une importance capitale dans le comportement de la molécule étudiée. Les résultats obtenus montrent que la méthode de théorie fonctionnelle de densité utilisant la base de fonction 6-311g (d,p)⁺ donne la valeur de l'énergie minimale du *Me- β -D-Xylopyranoside* de -612.14466899 Hartree dans le cas d'une optimisation dans le vide et de -612.163283 Hartree pour une optimisation en milieu solvate avec le modèle IPCM. L'étude de l'effet des différents groupements hydroxyles présents sur la molécule ainsi que l'effet de l'orientation du groupe méthyle a confirmé le rôle primordial de la position de ces groupements dans la stabilité de la molécule considérée.

Le calcul et l'analyse des coordonnées normales à l'état cristallin du *Me- β -D-Xylopyranoside* ont été effectués en utilisant le champ de force mUBSFF combiné à la fonction énergie potentielle intermoléculaire qui comprend les interactions de Van der Waals, les interactions électrostatiques et certains termes de la liaison hydrogène.

Puisque l'ensemble des paramètres du champ de force initiale du Me- β -D-glucopyranoside ont été introduits dans notre molécule comme point de départ de notre long et fastidieux affinement, le principe de transférabilité a été vérifié. En effet, l'erreur moyenne entre les nombres d'ondes des vibrations observées et calculées ne dépasse pas 5cm⁻¹. L'attribution des bandes de vibrations observées est en accord avec des travaux antérieurs effectués pour une molécule isolée et la distribution d'énergie potentielle des modes de vibration confirme les résultats obtenus avec des études précédentes.

