



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 : Mécabih Nadia

Etude structurale de quelques oligo-saccharides par les méthodes semi-empiriques

Les carraghénanes sont des polysaccharides linéaires sulfatés qui composent la paroi cellulaire des algues rouges, utilisés comme agents texturants dans l'industrie alimentaire. Leur squelette est composé de D-galactopyranoses reliés alternativement par des liaisons α (1 \rightarrow 3) et β (1 \rightarrow 4). La structure des motifs disaccharidiques de répétition des carraghénanes varie par la position et le nombre des groupements sulfates. Des unités 3,6- anhydro- α -D-galactopyranose peuvent aussi remplacer les unités α (1 \rightarrow 3)-D-galactopyranoses.

L'objectif de notre étude consiste principalement à explorer l'espace conformationnel et d'identifier les conformations correspondant aux énergies les plus basses en tenant compte des paramètres géométriques, les angles dièdres de la liaison glycosidique et les différentes orientations des groupements hydroxyles et hydroxyméthyle présents dans leurs structures. Afin d'atteindre ce but, les méthodes semi- empiriques ont été utilisées dans l'étude de la structures des carraghénanes en particulier kappa et iota carraghénanes, ainsi que leur caractérisation structurale. Une comparaison entre les différents composés a été faite en vue d'établir une relation entre leurs paramètres structuraux de géométrie et leur stabilité, en vue d'étudier l'effet de la sulfatation, le type de liaison glycosidique et la conformation du groupement hydroxyméthyle.

Les principaux résultats ont montré un effet important de la sulfatation sur la stabilité des carraghénanes, suivi par le type de liaison glycosidique, la conformation du groupement hydroxyméthyle ne semble pas influencer leur stabilité. L'intervention de ces différents paramètres structuraux sur la stabilité se fait en favorisant plus de liaisons hydrogènes qu'elles soient intra ou inter-résidus.

Mots clés : κ -carrabiose ; ι -carrabiose ; néo- κ -carrabiose ; néo- ι -carrabiose ; disaccharide ; liaison glycosidique ; les cartes iso-potentielles ; méthodes semi-empiriques