

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ SALAH BOUBNIDER, CONSTANTINE 03
FACULTÉ DE GÉNIE DES PROCÉDÉS
DÉPARTEMENT DE GÉNIE DE L'ENVIRONNEMENT

N° d'ordre :... ..

Série :... ..

Mémoire

PRESENTÉ POUR L'OBTENTION DU DIPLOME DE MASTER
EN GÉNIE DES PROCÉDÉS
OPTION : GÉNIE DES PROCÉDÉS DE L'ENVIRONNEMENT

ETUDE COMPUTATIONNELLE DU COMPLEXE D'INCLUSION DE SULFONAMIDE AVEC β -CYCLODEXTRINE

Présenté par :

BENLAHRECHE Sarra

FOUGHALI Roumaïssa

MILLI Chourouk

Dirigé par :

Mme MESSIAD-YOUSFI Hanane

Maître de conférence « B »

Année universitaire

2020-2021

Session : juin

SOMMAIRE

LISTE DES FIGURES	VIII
LISTE DES TABLEAUX	X
LISTE DES ABRÉVIATIONS	XII
Introduction générale.....	1
CHAPITER I : Methodes de calcul.....	3
I.1. Historique.....	3
I.2.Méthodes de la mécanique quantique	4
I.2.1.Equation de Schrödinger.....	4
I.2.2. Méthode semi-empirique.....	5
I.2.3. Méthode Hartree-Fock.....	5
I.2.4. Méthode de la théorie de densité fonctionnelle.....	6
I.2.4.1 Bases et Fonctionnelles Utilisées	6
I.2.5. Méthodes hybrides : La méthode ONIOM.....	6
I.3.Mécanique moléculaire	7
I.4. Dynamique moléculaire	8
CHAPITER II : Sulfonamide.....	9
II.1.Généralités	9
II.2. Historique de Sulfonamide	9
II.2.1 Mode d'action.....	10
II.3. Synthèse des Sulfamides.....	10
II.4. Propriétés physico-chimiques des Sulfonamides.....	11
II.4.1. Propriétés physiques des Sulfamides.....	11
II.4.1.1.Caractères organoleptiques	11
II.4.1.2 Point de fusion	11
II.4.1.3. Spectre Ultra-Violet.....	11
II.4.1.4. Solubilité.....	11
II.4.2 Propriétés chimiques des sulfamides.....	12

II.4.2.1. Propriétés chimiques liées à la fonction sulfonamide.....	12
II.4.2.2. Propriétés chimiques liées à la fonction amine.....	13
II.4.3. Toxicité des Sulfamides.....	13
II.5. Utilisation	14
Conclusion.....	14
CHAPITER III : Cyclodextrine.....	15
III.1. Historique des cyclodextrine (CDs)	15
III.2. Généralités sur les cyclodextrines	15
III.2.1. Cyclodextrines.....	15
III.3 Production, structure et caractéristiques physicochimiques	16
III.3.1 Production.....	16
III.3.2. Structure.....	17
III.3.3. Caractéristiques physicochimiques.....	18
III.4. Toxicité des cyclodextrines.....	20
III.5. Utilisation des cyclodextrines	20
III.5.1. De l'Environnement.....	20
III.5.1.1. L'eau.....	20
III.5.1.2. En dépollution des sols.....	20
III.5.2. Applications cosmétiques.....	21
III.5.3. Applications pharmaceutiques.....	21
III.5.4. Agro-alimentaire.....	21
CHAPITER IV : Complexe d'inclusion.....	23
IV.1. Généralités sur la complexation	23
IV.2. Conséquence de complexation	24
IV.3. Mécanisme d'inclusion	25
IV.4. Préparation des complexes d'inclusion.....	25
IV.5. Facteurs influençant le procédé d'inclusion	26
IV.5.1. Taille de la cavité.....	26
IV.5.2. Influence du PH.....	26

IV.5.3. Influence de la température.....	26
IV.6. Forces de Van der Waals, les liaisons hydrogène, Transfert de charge	26
IV.6.1. Forces de Vander Waals.....	26
IV.6.2. Liaisons hydrogène.....	27
IV.6.3. Transfert de charge.....	27
IV.7. Thermodynamique de la complexation	27
IV.8. Détection de la formation d'un complexe d'inclusion	28
IV.8.1. Détection de l'inclusion en solution.....	28
IV.8.1.1. Spectroscopie UV-Visible.....	28
IV.8.1.2. Fluorescence.....	28
IV.8.2. Détection de complexes d'inclusion à l'état solide.....	29
IV.8.2.1. RMN.....	29
IV.8.2.2. Spectroscopie de masse.....	29
IV.8.2.3. Autres méthodes.....	29
CHAPITER V : Resultat et discusion.....	30
V.1. Introduction	30
V.2. Méthodologie d'inclusion.....	31
V.3. Analyse des résultats	32
V.3.1. Recherche du minimum.....	32
V.3.2. Paramètres thermodynamiques calculés du processus de complexation SULF/ β -CD.....	35
V.3.3. Résultat du calcul ONIOM2.....	36
V.3.4. Analyse NBO (Natural bond orbital).....	38
V.3.5. Paramètre géométriques.....	41
V.3.6. Transfert des charges de Mulliken.....	42
V.3.7. Structure géométrique de la β -CD.....	42
V.3.8. Orbital moléculaire.....	44
Conclusion Générale.....	49
Résumé.....	52
Bibliographie.....	53

Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié la complexation de molécule Sulfonamide avec la β -cyclodextrine. Dans cette étude nous avons tenu compte seulement de la stœchiométrie 1:1.

Nous avons simulé l'inclusion de Sulfonamide dans la β -CD en utilisant la méthode semi empirique PM3, DFT et les méthodes ONIOM2 et NBO. Les énergies de complexation et d'interaction pour les deux orientations considérées sont rapportées.

Nous avons trouvé que l'orientation B ou le groupement aniline est orienté vers la face large de β -CD est plus stable, les calculs thermodynamique statistique à 1 atm et 298.15K ont montré que dans le vide, le processus de complexation est exothermique et enthalpiquement favorable. L'énergie de complexation négative calculée suggère que les complexes d'inclusion sont stables. Les résultats des orbitales HOMO et LUMO confirment la meilleure stabilité de l'orientation B.

Enfin, l'analyse NBO a été réalisée sur des complexes optimisés à la base de la méthode ONIOM2 pour quantifier les interactions donneuses accepteuses entre Sulfonamide et β -CD.

Mots-clés: complexe d'inclusion, β -Cyclodextrine, Sulfonamide, PM3, DFT, ONIOM2, NBO.