

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

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

Etude des interactions dans le système supramoléculaire
Pesticide /Cyclodextrine Native

Présenté par :

Djezzar malek
Meriraoui roumeissa
Lakroum ayoub
Laraba riyadh

Dirigé par :

M^{me} MESSIAD-YOUSFI Hanane
Maître de conférences « A »

Année universitaire
2024-2025
Session : Juin

Table de matières

Résumé.....	I
LISTE DES FIGURES.....	XII
LISTE DES TABLEAUX.....	XIV
LISTE DES ABRÉVIATIONS.....	XV
Introduction Général.....	1

CHAPITRE I : Méthomyl

I.1.	Introduction.....	4
I.2.	Généralités	4
I.2.1.	Définition et structure chimique du Méthomyl.....	6
I.3.	Propriétés physiques et chimiques du Méthomyl.....	6
I.4.	les applications du Méthomyl et ses méthodes d'application.....	7
I.5.	Toxicité et effets sur la santé du Méthomyl.....	9
I.6.	Effets environnementaux du Méthomyl.....	9
I.7	Rôle du méthomyl par rapport à d'autres insecticides.....	11
I.8.	Stockage et élimination du méthomyl.....	12

CHAPITRE II : Cyclodextrines

II.1.	Introduction.....	14
II.2.	Historique des cyclodextrines.....	14
II.3.	Généralités sur les cyclodextrines.....	15
II.3.1.	Structure des Cyclodextrines.....	15
II.3.2.	Nomenclature des cyclodextrines.....	15
II.3.3.	Dérivés de cyclodextrine.....	16
II.4.	Propriété physico-chimique des cyclodextrines.....	17
II.5.	Domaines d'applications des cyclodextrines.....	18
II.5.1.	l'application des Cyclodextrines dans l'industriel.....	19
II.5.2.	l'application des Cyclodextrines dans l'environnement.....	19
II.6.	Études de Toxicité Environnementale des Cyclodextrines.....	20

CHAPITRE III : Complexe d'inclusion

III.1.	Définition d'un Complexes d'Inclusion.....	22
III.2.	L'Inclusion et la complexation.....	22
III.3.	L'influence des paramètres externes sur les complexes d'inclusion.....	24
III.3.1.	Taille de la cavité.....	24
III.3.2.	Influence de la température.....	24
III.3.3.	Influence du pH.....	24
III.3.4.	Polarité et charge.....	24
III.4.	Forces stabilisantes les complexes d'inclusions.....	24
III.4.1.	Interactions de Van der Waals.....	24
III.4.2.	Interaction hydrophobique.....	25
III.4.3.	Les liaisons hydrogène.....	25
III.5.	Applications des complexes d'inclusions.....	25
III.6.	Conséquences de la complexation	26

CHAPITRE IV : Méthode de mécanique quantique

IV.2.	Méthodes de chimie quantique.....	28
IV.2.1.	Les méthodes ab initio.....	30
IV.2.1.1	Méthode Hartree-Fock.....	30
IV.2.1.2	Méthodes post-Hartree-Fock.....	30
IV.2.2.	Les méthodes semi-empiriques.....	30

IV.2.3.	Les méthodes de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).....	31
IV.3.	Mécanique Moléculaire.....	32
IV.4.	Dynamique moléculaire.....	33
IV.5.	Méthodes hybrides.....	34
IV.5.1.	L'analyse NBO.....	34

CHAPITRE V:Résultat et discussion

V.1.	Introduction.....	37
V.2.	Méthodologie et calcul.....	37
V.3.	Résultats et discussions.....	39
V.3.1.	Recherche du minimum.....	40
V.3.2.	Analyse thermodynamique du processus de complexation de la Meth : β -CD	42
V.3.3.	Calculs ONIOM.....	44
V.3.4.	Analyse NBO (Natural Bond Orbital).....	46
V.3.5.	Paramètres géométrique.....	50
V.3.6.	Transfert des charges de Mulliken.....	54
V.3.7.	Structure géométrique de la β -CD.....	55
V.3.8.	Orbital moléculaire.....	56
	Conclusion général.....	62
	Bibliographie	63

Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié la complexation de la molécule Méthomyl avec la β -cyclodextrine. Cette étude a pris en considération exclusivement la stœchiométrie 1:1. Nous avons simulé l'inclusion de Méthomyl dans la β -CD en utilisant la méthode semi empirique PM6, 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) est plus stable, les calculs thermodynamique statistique à 1 atm et 298.15K ont démontré 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 investigations 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 Méthomyl et β -CD. Dans le solvant les investigations orbitales HOMO et LUMO confirment la meilleure stabilité de l'orientation (A) de complexe d'inclusion.

Nous constatons que l'interaction moléculaire et l'environnement solvant conduisent à une modification de la réactivité et de la stabilité des composés.

Mots-clés : complexe d'inclusion, β -Cyclodextrine, Meth, PM6, DFT, ONIOM2, NBO.

Abstract

In this work, we studied the complexation of the Methomyl molecule with β -cyclodextrin. This study, we only considered the 1:1 stoichiometry. We simulated the inclusion of Methomyl in β -CD using the semi-empirical PM6 method, DFT, and the ONIOM2 and NBO methods. The complexation and interaction energies for the two considered orientations are reported.

We found that orientation (B) is more stable, and statistical thermodynamic calculations at 1 atm and 298.15K have demonstrated that in a vacuum, the complexation process is exothermic and enthalpically favorable. The calculated negative complexation energy suggests that the inclusion complexes are stable.

The HOMO and LUMO orbital investigations confirm the better stability of orientation (B).

Finally, the NBO analysis was conducted on complexes optimized using the ONIOM2 method to quantify the donor-acceptor interactions between Methomyl and β -CD.

In the solvent, the HOMO and LUMO orbital investigations confirm the better stability of orientation (A) of the inclusion complex.

We observe that molecular interaction and the solvent environment lead to a modification of the reactivity and stability of the compounds.

Keywords: inclusion complex, β -Cyclodextrin, Meth, PM6, DFT, ONIOM2, NBO.

ملخص

في هذا العمل، درسنا تعقيد جزيء الميثوميل مع β -سيكلوديسترين. هذه الدراسة أخذت في الاعتبار حصرًا النسبة المولية 1:1. لقد قمنا بمحاكاة إدخال ميثوميل في β -CD باستخدام الطريقة شبه التجريبية PM6، وDFT، وطرق ONIOM2 و NBO تم الإبلاغ عن طاقات التعقيد والتفاعل لكلتا الاتجاهين المدروستين. وجدنا أن الاتجاه (B) هو الأكثر استقرارًا، حيث أظهرت الحسابات الديناميكية الحرارية الإحصائية عند 1 atm و 298.15 K أنه في الفراغ، تكون عملية التعقيد طاردة للحرارة ومفيدة من حيث الإنثالبي. تشير الطاقة السلبية للحساب المعقد إلى أن معقدات الإدراج مستقرة. تؤكد التحقيقات المدارية HOMO و LUMO أفضل استقرار للتوجه (B). أخيرًا، تم إجراء تحليل NBO على المركبات المحسنة باستخدام طريقة ONIOM2 لتحديد تفاعلات المانح والمستقبل بين ميثوميل و β -سيكلوديسترين. في المذيب، تؤكد التحقيقات المدارية HOMO و LUMO على أفضل استقرار للتوجه (A) لمركب الإدخال. نلاحظ أن التفاعل الجزيئي وبيئة المذيب يؤديان إلى تعديل في تفاعل واستقرار المركبات.

الكلمات المفتاحية: معقد الإدخال، β -سيكلوديسترين، الميثوميل، PM6، DFT، ONIOM2، NBO.