

Faculté des Sciences Exactes, Université Djillali Liabès

Sidi Bel Abbès 22000, Algérie

Nom : BESTAOUI-BERREKHCHI-BERRAHMA

Prénom : Noreya

Spécialité : CHIMIE

Option : Chimie théorique, modélisation moléculaire

Intitulé : **STABILITE DES DISACCHARIDES COMPORTANT DIVERSES  
LIAISONS GLYCOSIDIQUES DANS LE VIDE ET DANS L'EAU**

Adresse électronique : [nbesber@yahoo.fr](mailto:nbesber@yahoo.fr)

---

**Résumé:** Dans le cadre de cette thèse, une étude structurale et énergétique de divers conformères des monosaccharides 3,6-anhydro- $\alpha$ -D-galactose, 2-O-sulfaté-3,6- $\alpha$ -D-anhydrogalactose et autres disaccharides  $\beta$ -D-neocarrabiose,  $\beta$ -D-neocarrabiose monohydraté, neo- $\kappa$ -et neo- $\iota$ -carrabiose comportant des liaisons glycosidiques du même type a été réalisée dans la phase gazeuse et dans le solvant implicite. Pour ceci, des calculs quantiques (*ab initio* et DFT) ont été effectués, en utilisant des modèles qui simulent la présence du solvant implicite en utilisant les deux modèles Onsager et PCM, et  $\beta$ -D-neocarrabiose monohydraté en utilisant l'effet de l'introduction de la correction Counterpoise-BSE. Dans ce but, nous avons suivi une procédure en deux étapes: la construction de cartes adiabatiques avec la fonctionnelle et la base B3LYP/6-31G(d), suivie par une relaxation complète des conformations de plus basses énergies, en utilisant les niveaux de théorie B3LYP, B3PW91 et MP2 avec plusieurs ensembles de base.

---

**Summary :** In this thesis, a structural and energetic study of various conformers of monosaccharides 3,6-anhydro- $\alpha$ -D-galactose, 2-O-sulfaté-3,6- $\alpha$ -D-anhydrogalactose and disaccharides  $\beta$ -D-neocarrabiose,  $\beta$ -D-neocarrabiose monohydraté, neo- $\kappa$ -et neo- $\iota$ -carrabiose with other glycosidic bonds of the same type in vacuum and in water. For this, quantum calculations (*ab initio* and DFT), have been made using models that simulate the presence of an implicite solvent using Onsager and PCM models, and  $\beta$ -D-neocarrabiose monohydrate using the introduction of the correction effect of the Counterpoise-BSE. For this purpose, we followed a two-step process: the construction of adiabatic maps with functional and basis set B3LYP/6-31G(d), followed by a complete relaxation of the lowest energy conformations, using the levels of theory B3LYP, B3PW91 and MP2 with several basis sets.

---

