Interaction des iota- et kappa-carrabiose avec des cations monovalents, étude par DFT.

RESUME:

Les carraghénanes sont des polysaccharides linéaires sulfatés qui composent la paroi cellulaire des algues rouges et qui sont utilisés comme agents texturants dans l'industrie alimentaire. Leur squelette est composé de D-galactopyranoses réliés alternativement par des liaisons α (1→3) et β (1→4). Notre étude concerne deux disaccharides le kappa- et iota- carrabiose issus des carraghénanes, elle consiste principalement à explorer l'espace conformationnel et identifier les structures correspondant aux énergies les plus basses en tenant compte des paramètres géométriques ; les angles dièdres de la liaison glycosidique ainsi que les différentes orientations des groupements hydroxyle et hydroxyméthyle présents dans leurs structures. Cette étude est faite sans et en présence du cation de potassium. Afin d'atteindre ce but, les méthodes DFT ont été utilisés pour l'étude de la structure dans le vide et dans le solvant utilisant le modèle implicite PCM. Les principaux résultats ont montré un effet important de la présence d'un contre ion sur la stabilité des carraghénanes.

ABSTRACT:

Carrageenans are linear sulphated polysaccharides occurring as cell wall constituents inred algae and are used as texturing agents in the food industry. The backbone of the polymer iscomposed of alternating α (1→3) and β (1→4). The objective of our study is mainly to explore the conformational space and identify conformations corresponding to the lowest energies taking into account the geometrical parameters, the dihedral angles of the glycosidic bond and the different orientations of the hydroxymethyl and hydroxyl groups present in their structures in the presence of potasum cation. To achieve this goal, the DFT methods were used in the study of the structures of carrageenan kappa- and iota- carrageenan especially in vacuum and in the solvent using the PCM implicit model, as well as their structural characterization. The main results showed a significant effect of the ion on the stability against carrageenan, followed by the conformation of the hydroxymethyl group does not seem to affect their stability.

Mots clés: κ-carrabiose, ι-carrabiose, méthode DFT, B3LYP, minima, solvant implicite.

الملخص

الكاراغينات سكريات ذات بنية سلسلية مكبرتة تشكل جدران خلايا الطحالب الحمراء, و تستخدم كعوامل التركيب في صناعة الأغذية. يتكون هيكلها من D-غلاكتوبيرانوز متصلة بواسطة الروابط β(1←4) و α(1←3) بالتناوب. بنية الوحدة المتكررة للسكر الثنائي في الكراغينات تختلف حسب موضع و عدد المجموعات الكبريتية. الوحدات 6,3- أنهيدرو-D-غلاكتوبيرانوز يمكنها أيضا تعويض الوحدات α(1←3)-D-غلاكتوبيرانوز. الهدف من دراستنا هو أساسا استكشاف الفضاء الهيئي و التعرف على الأشكال ذات الطاقة لدني و هذا بمراعاة المعايير الهندسية, زوايا الفتل الغلوكوزيدية و التوجهات المختلفة لمجموعات الهيدروكسيل و الهيدروكسي مثيل المتواجدة في بنيتها. لتحقيق هدا الهدف تم استخدام الطرق شبه التجريبية في دراسة بنية الكاراغينات و خاصة ι- كاراغينان و كذلك التشخيص البنيوي. و قد تمت مقارنة بين مركبات مختلفة لإيجاد العلاقة بين معاييرها الهندسية و استقراها **PCM**, و نوع الرابطة الغلوكوزيدية وهيئة مجموع الهيدروكسي مثيل ذلك بدراسة تأثير ι- كاراغينان

Présenté par: Amina fezazi.

Laboratoire de Microscopie, Micro-analyse de la matière et Spectroscopie Moléculaire L2MSM UDL-SBA

fmouni-84@hotmail.fr