



*Conclusión*

*générale*

## Conclusion générale

Ce travail est une contribution quantique à l'étude de la structure et de la réactivité des différents composés de réaction, qui jouent un rôle important dans la recherche biologique, médicale, pharmacologie, industriel, thérapeutique, comme agents anticonvulsifs, anti-inflammatoires, analgésiques, antidépresseurs du système nerveux central et antibactériens et en synthèse de chimie organique.

Notre travail a porté sur l'étude théorique du mécanisme réactionnel d'un pyran-2-one et une diamine par deux voies principales, tous les états intermédiaires et de transitions ont été déterminés.

Ce travail nous a permis d'examiner la possibilité de l'attaque, des deux azotes des deux voies, sur la fonction carbonyle de la DHA qui a permis de comparer la stabilité des deux composés finaux. Les résultats des énergies totales ont montré que l'état final1 (EF1) est le plus stable en confirmant donc que la première possibilité d'attaque est la plus favorable à cause de la différence de stabilité entre EF1 et EF2.

L'étude théorique effectuée en méthodes PM3 et ab initio (HF/6-31G), a montré l'existence des formes de transition au cours de cette réaction, pour toutes les formes apparentes, L'étude comparative des résultats des énergies totales ont confirmé que les états de transition existent mais moins stables que les états intermédiaires qu'il avait des valeurs minimales d'énergie totale.

Le calcul de fréquence qui a été réalisé pour toutes les structures du chemin réactionnel (1), montre que les états intermédiaires ne présentent aucune fréquence imaginaire alors que les états de transition possèdent une fréquence imaginaire (négative).

Nous espérons avoir constitué à travers ce travail une base de données théoriques, qui sera utile dans des études de structure (stabilité), de réactivité (mécanismes) et également de relations structure/activité ultérieures. Les résultats de nos travaux pourront également servir à l'étude des relations de structure-réactivité qui peuvent être effectués au moyen de méthodes adaptées.