

LISTE DES FIGURES

Figure 1: Réaction générale.....	23
Figure 2: Mécanisme réactionnel global de la réaction du composé (A) avec le 2,3-diamino-2-méthyl propane et l'aldéhyde (1 ^{ère} voie)	25
Figure 3: Action de 2,3-diamino-2-méthyle propane sur un 3-acetyl-4-hydroxy-6-methyl-2H-pyran-2-one.....	29
Figure 4: L'attaque de l'azote N ₃ sur le carbone C ₁ (1 ^{ère} étape)	30
Figure 5 : Profil de la surface d'énergie totale de l'étape (1)	30
Figure 6 : L'attaque de O ₂ sur H ₅ et l'élimination de la molécule d'eau (2 ^{ème} étape).....	34
Figure 7 : Profil de la surface d'énergie totale de l'étape (2)	34
Figure 8 : L'attaque de l'azote N ₆ sur le carbone C ₉ del'aldéhyde ajoutée (3 ^{ème} étape)	37
Figure 9 : Profil de la surface d'énergie totale de l'étape (3)	37
Figure 10 : L'attaque de O ₁₀ sur H ₈ et l'élimination d'une molécule d'eau (4 ^{ème} étape)	40
Figure 11 : Profil de la surface d'énergie totale de l'étape (4)	40
Figure 12 : L'azote N ₃ attaque l'hydrogène du milieu acide H ₁₁ et la formation du carbocation au carbone C ₁ (5 ^{ème} étape).....	43
Figure 13 : Profil de la surface d'énergie totale de l'étape (5).....	43
Figure 14 : L'élimination de l'hydrogène H ₁₃ (6 ^{ème} étape).....	46
Figure 15: Profil de la surface d'énergie totale de l'étape (6).....	46
Figure 16 : L'azote N ₆ attaque l'hydrogène du milieu acide H ₁₄ et la formation du carbocation au carbone C ₉ (7 ^{ème} étape).....	49
Figure 17 : Profil de la surface d'énergie totale de l'étape (7).....	49
Figure 18 : L'attaque de la double liaison (C ₁ =C ₁₂) et l'élimination de l'hydrogène H ₁₁ (8 ^{ème} étape).....	52
Figure 19 : Profil de la surface d'énergie totale de l'étape final.....	52
Figure 20 : Profil global de la surface d'énergie potentielle du chemin (1)	56
Figure 21 : Mécanisme réactionnel global de la réaction du composé (A) avec le 2,3-diamino-2-méthyl propane et l'aldéhyde (2 ^{ème} voie)	58
Figure 22 : L'étape principale de la réaction générale (2 ^{ème} voie).....	61

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1:	les cinq fréquences des différentes structures du chemin (1)	27
Tableau 2:	Energies totales des différentes structures du chemin réactionnel (1).....	28
Tableau 3:	Principaux paramètres géométriques, électroniques et énergétiques des structures de l'étape (1).....	31
Tableau 4:	Principaux paramètres géométriques, électroniques et énergétiques des structures de l'étape (2)	35
Tableau 5:	Principaux paramètres géométriques, électroniques et énergétiques des structures de l'étape (3)	38
Tableau 6:	Principaux paramètres géométriques, électroniques et énergétiques des structures de l'étape (4)	41
Tableau 7:	Principaux paramètres géométriques, électroniques et énergétiques des structures de l'étape (5)	44
Tableau 8:	Principaux paramètres géométriques, électroniques et énergétiques des structures de l'étape (6)	47
Tableau 9:	Principaux paramètres géométriques, électroniques et énergétiques des structures de l'étape (7)	50
Tableau 10:	Principaux paramètres géométriques, électroniques et énergétiques des structures de l'étape finale.....	53
Tableau 11:	Barrières énergétiques des différentes étapes de chemin réactionnel (1)	55
Tableau 12:	Cinq premières fréquences des états de transition.....	55
Tableau 13:	les cinq fréquences des structures A, B, EI et C' du chemin réactionnel (2).	60
Tableau 14:	Energies totales des structures A, B, EI et C' du chemin réactionnel (2)	60
Tableau 15:	Principaux paramètres géométriques, électroniques et énergétiques des structures de l'étape principale.....	62

LISTE DES ABREVIATIONS

AE	Affinité électronique
AM1	Austin Model 1
BO	Approximation de Born- Oppenheimer
B3LYP	Becke, three-parameter, Lee-Yang-Parr
6-31G	Base étendue
CNDO	Complete Neglect of Differential Overlap
TS	État de transition
EI	Energie d'ionisation
IS	Etat intermédiaire
HOMO	Highest Occupied Molecular Orbital
HLSP	Heitler-London-Slater-Pauling
HF	Hartree-Fock
INDO	Intermediate Neglect of Differential Overlap
LCAO	Linear Combination of Atomic Orbitals
LUMO	Lowest Unoccupied Molecular Orbital
MNDO	Modified Neglect of Differential Overlap
MINDO	Modified Intermediate Neglect of Differential Overlap
MM2	Méthodes des calculs
MM	Mécanique Moléculaire
MQ	Mécanique Quantique
GAMESS	Méthodes des calculs
NDDO	Neglect of Diatomic Differential Overlap
BV	Orbitale la plus basse vacante "Valence-Bond"
OA	Orbitale Atomique
OM	Orbitale Moléculaire
PM3	Parameter Method number 3
PM6	Parameter Method number 6
DFT	Théorie de la fonctionnelle de la densité
ZDO	Zero Differential Overlap



SOMMAIRE

SOMMAIRE

Liste des figures.....	I
Liste des Tableaux.....	II
Liste des abréviations.....	III
Introduction générale.....	1
Références.....	5

Chapitre I.Méthodes de calcul et Logiciels utilisés

1. Historique.....	8
2. Introduction.....	8
❖ Modélisation moléculaire : Pour qui ? Pour quoi ?.....	9
❖ Approximation de Born-Oppenheimer.....	10
3. Méthodes de calculs.....	11
3. 1.Les méthodes semi-empiriques.....	11
❖ Méthode PM3 (Parameter Method number 3).....	11
3.2. Méthodes Hartree-Fock.....	12
3.3. Méthode DFT.....	13
3.4. Choix de la méthode.....	14
4. Logiciels utilisés.....	14
❖ Gaussian.....	14
❖ ChemBio3D.....	15
5. Bases et fonctionnelle utilisées.....	16
❖ Les bases 6-31G et 6-311G.....	16
❖ La fonctionnelle B3LYP.....	16
6. L'énergie d'ionisation et l'affinité électronique.....	16
Référence.....	18

Chapitre II. Recherche théorique d'un chemin réactionnel

1. Introduction.....	22
2. Etude théorique en méthode HF de la réactivité d'une pyrone.....	24
3. Partie A (voie1): Cas de l'attaque de l'azote N ₃ sur le pyran-2-one.....	24
3.1 Mécanisme de réaction.....	24
3.2 Recherche du chemin réactionnel (1).....	28
3.3 Etude structurale et électronique du chemin réactionnel (1).....	29
4. Partie B (voie2): Cas de l'attaque de l'azote N ₆ sur le pyran-2-one.....	57
4.1 Mécanisme de réaction.....	57
4.2 Recherche du chemin réactionnel (2).....	60
4.3 Etude structurale et électronique du chemin réactionnel (2)	61
5. Conclusion.....	64
Référence.....	65
Conclusion générale.....	67
Annexe.....	69
Résumé.....	73