

Conclusion générale

La représentation du solvant, dont le rôle est très important dans la stabilisation et la dynamique des glucides, constitue un enjeu majeur de la modélisation moléculaire. Ce travail a été consacré à l'étude par modélisation moléculaire de solvation de deux monosaccharides :

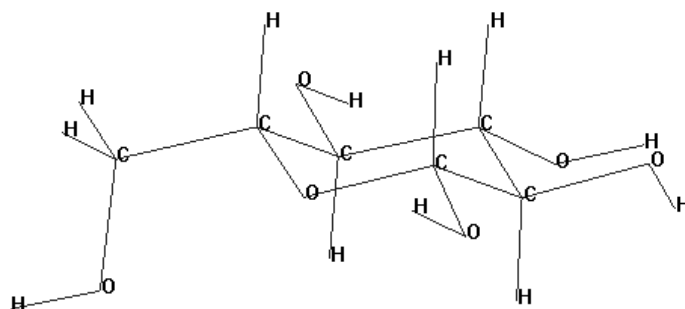


Figure1 : structure de β -D-glucose

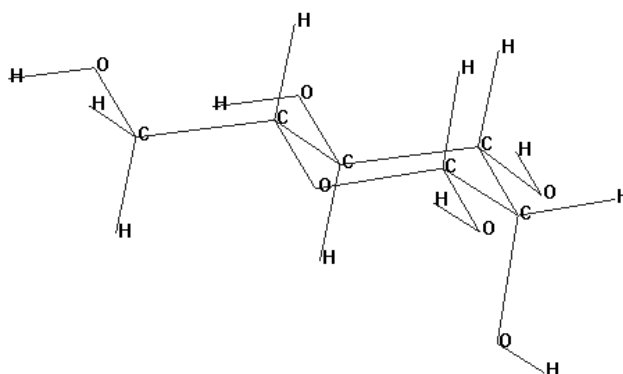


Figure2 : structure de β -D-mannose

Cette étude comprend quatre chapitres :

Au niveau de 1^{er} chapitre des notions sur les biomolécules et plus précisément les glucides ou hydrate de carbone [1] qui forment une classe de molécule entrainement variées[7].

Les aspects de la modélisation moléculaire[2] sont abordés dans la 2^{eme} chapitre afin de situer la mécanique moléculaire [3] parmi les méthodes de modélisation utilisé pour la description des comportements atomiques au sien de la structure moléculaire. la notion de champ de force [4], l'ensemble des termes de l'énergie stérique est défini précisément dans l'expression mathématique en mécanique moléculaire. L'importance de paramétrisation justifie le choix du champ de force.

Conclusion générale

Le chapitre 3 fait la revue des différentes méthodes existantes, expérimentales et théoriques [5], et aussi les différents solvants existants et leurs classifications [8], pour étudier précisément la solvation des macromolécules biologiques. L'étude de la solvation des biomolécules apparaît indispensable pour rationaliser l'influence de l'eau sur les processus biochimiques et représente donc un enjeu majeur de la biologie moderne.

Le dernier chapitre est consacré aux résultats obtenus ainsi à la discussion et à l'interprétation de ces derniers.

Les glucides sont des composés organiques extrêmement importants par leur abondance naturelle et leurs fonctions structurales et de réserve énergétique. A l'état organisé ou désordonné, la compréhension des interactions glucides/eau est essentielle pour de nombreux domaines scientifiques et technologiques [6]. La complexité de ces interactions est due à la présence de groupements hydroxyles très proches qui multiplient les alternatives de liaisons hydrogène soit intramoléculaires soit avec l'eau. Pour le calcul avec Gaussian on a obtenu la même énergie pour les deux molécules étudiées (avec ou sans solvant), le Gaussian ne tient pas compte de la stéréochimie il considère le β -D-glucose et le β -D-mannose la même molécule, Par contre Hyperchem tient compte de la stéréochimie c'est pour cela on a trouvé des énergies différentes pour le β -D-mannose et le β -D-glucose dans les deux cas. Donc le solvant (l'eau) joue un rôle très important dans la stabilisation des structures des monosaccharides [9].

Les perspectives que nous envisageons de réaliser dans un futur dans le cadre d'un doctorat s'articuleront autour des applications dans le domaine de l'activité biologique ainsi que les effets de solvant.

Conclusion générale

Reference:

- [1] C. Gourmala, Y. Luo, S. Ghalem, Elucidation of the LewisX- LewisX carbohydrate interaction with molecular dynamics simulation; A glycosynapse model, *J. Theor. Chem.*, 821, 22-29, **2007**
- [2] H. Dugas, Principe de base en modélisation moléculaire, Aspect théorique et pratique, quatrième édition, librairie de l'Université de Montréal, **1996**
- [3] A. R. Leach, molecular modeling, principles and application, Addison Wesley Longman Essex UK-m1193m chapitre 3, B-A. K. Rappe, C. L. Casewit, molecular mechanics across chemistry science BOOKS, Sausalito, CA, **1997**
- [4] J. Slomka, la mécanique moléculaire, une méthode non quantique pour le calcul de la structure et de l'énergie d'entité moléculaire, l'actualité chimique, chapitre 7, **1986**
- [5] Zhou R. "Free energy landscape of protein folding in water: explicit vs. implicit solvent". *Proteins* **53** (2): 148–61, November **2003**
- [6] Furstner, A., and Müller, T. Metathesis route to resin glycosides: formal total synthesis of tricolorin A. *J. Org. Chem.*, 63, 424-425, **1998**.
- [7] R. Garrett, C. Gricham, Biochimie, de Boeck university, chapitre 8, **81.2000**
- [8] WYPYCH G. "Handbook of solvents". Chem Tec Publishing ; William Andrew, , 1675 p, **2001**.
- [9] Un Modèle de Solvation Semi-Implicite pour la Simulation des Macromolécules Biologiques ; Nathalie BASDEVANT (née CAPITAINÉ) pour obtenir le titre de DOCTEUR de l'UNIVERSITÉ d'EVRY-VAL-d'ESSONNE, p237, **2003**