

Résumé :

Le développement important des moyens informatiques au cours de ces dernières années a permis à la chimie et à la biochimie de s'enrichir d'un outil informatique spécialement dédiée à l'analyse structurale des molécules chimiques et biologiques (protéine, ADN, et hydrate de carbone). ce nouvel outil, basé sur les lois de physique classique, permet d'appréhender l'aspect dynamique des molécules et d'expliquer d'un point de vue structurale leurs propriétés : c'est la modélisation moléculaire.

Le but de présenter ce travail consiste à faire une solvation des deux sucres monosaccharide, en utilise les méthodes de la modélisation moléculaire, ces deux monosaccharides inclus dans la partie des glucides qui sont des composés organiques extrêmement importants par leur abondance naturelle et leurs fonctions structurales et de réserve énergétique. A l'état organisé ou désordonné, ces molécules sont intimement associées à l'eau. De ce fait, la compréhension des interactions glucides/eau est essentielle pour de nombreux domaines scientifiques et technologiques. 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.

Mots clés : modélisation moléculaire, interactions, monosaccharides, solvation.

Abstract:

The important development of the computing means during these last year's allowed the chemistry and the biochemistry to grow rich by a data-processing tool specially dedicated to the structural analysis of the chemical and biological molecules (protein, DNA, and carbohydrate). This new tool, based on the laws of classical physics, capture both the dynamic aspect of the molecules and to explain a point of view structural properties called molecular modeling.

The aim of this work is consists to a solvation of the two monosaccharide sugars, using the molecular modeling methods. These included in the carbohydrates that are organic compounds extremely important in their natural abundance and structural features and energy reserve. In organized state or not (disorganized), these molecules are closely associated with water. Thus, understanding the carbohydrate-water interactions is essential for many scientific and technological fields. The complexity of these interactions is due to the presence of hydroxyl groups that multiply very close alternatives or intramolecular hydrogen bonds either with water.

Keywords: molecular modeling, interactions, monosaccharides, solvation.