

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DE LHADJ LAKHDAR
FACULTE DE CHIMIE



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de MAGISTER

En : CHIMIE

Spécialité : PHYSIQUE CHIMIE THEORIQUE CHIMIE INFORMATIQUE

Par

BAKHOUCHE Kahina

sur le Sujet :

**Prédiction théoriques de grandeurs
spectroscopiques de composés d'espèces naturelles**

Soutenu publiquement le 17/05/2011 , devant le jury :

Mr A. DIBI	Prof	U.Batna.	Président
Mme N. OUDDAI	Prof	U.Batna.	Examinateur
Mr A. DJEBAILI	Prof	U.Batna.	Examinateur
Mme D. HAMMOUTENE	Prof	USTHB.	Directeur de thèse

REMERCIEMENTS

Le présent travail a été réalisé dans le Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire (LTMM) de la Faculté de Chimie, à l'USTHB d'Alger, sous la Direction de Mme le Professeur Dalila HAMMOUTENE.

Une partie de ce travail a été effectuée dans le cadre de la réalisation du projet 'Net 45': Projet de coopération entre les différents pays d'Afrique (Cameroun – Sénégal – Algérie - Tunisie) financé par l'ICTP (International Center of Theoretical Physics).

Je tiens tout d'abord à remercier Mme Dalila HAMMOUTENE, Professeur à l'USTHB, pour avoir dirigé cette thèse ainsi que pour la confiance qu'elle m'a témoignée durant la réalisation de ce travail. Ses compétences scientifiques, son don de communiquer son savoir et ses qualités humaines témoignent d'une grande personnalité scientifique. Qu'elle trouve ici ma profonde gratitude et ma sincère et très amicale reconnaissance.

J'adresse mes vifs remerciements à Mr Amar DIBI, Professeur à l'Université de Batna, pour avoir accepté de présider le jury de ce mémoire.

Je remercie également Mme Nadia OUDDAI, Professeur à l'Université de Batna, pour avoir accepté d'examiner judicieusement ce travail.

J'adresse mes remerciements à Mr Abdelbaki DJEBAILI, Professeur à l'Université de Batna, pour avoir accepté de faire partie du jury de ce mémoire.

Une partie de ce travail de recherches a été réalisée au sein du Laboratoire de Spectroscopie Atomique Moléculaire et Applications (LSAMA) de la Faculté des Sciences de Tunis, où j'ai été co-encadrée par Mme Zoubeida DHAOUADI, que je remercie particulièrement.

De même, l'ICTP est vivement remercié pour le financement de mes séjours à Tunis.

Mes remerciements vont aux Professeurs Mme Nadia OUNISSI et Mme Ourida OUAMERALI, responsables de l'école doctorale, ainsi qu'à tous les enseignants de cette école, qui ont contribué à ma formation.

J'exprime également une grande reconnaissance à toute l'équipe de notre laboratoire LTMM d'Alger, pour leur esprit d'entraide et l'atmosphère très agréable et chaleureuse qui y règne. Je remercie tout particulièrement Mesdames Sema DJENNANE et Yamina AKACEM ainsi que Messieurs Madjid NAIT ACHOUR et Hacène MEGHEZZI, Professeurs à l'USTHB, ainsi que mes camarades du laboratoire LTMM.

Je tiens à remercier vivement tous les membres du LSAMA pour m'avoir accueillie au sein de leur équipe, et en particulier, leur Directeur, Mr le Professeur Nedjm Eddine JAIDANE, ainsi que Messieurs Hassen GHALILA et Youcef MAJDI.

Je remercie également mes amis du LSAMA (Yvon, Gotoum, Jules, Mohamed, Khaled, Yassine, Alio, Samir, Meha) pour les bons moments qu'on a passés ensemble, la bonne ambiance studieuse qui règne au laboratoire et pour leur accueil chaleureux.

J'aimerais également remercier Mmes Samia KADDOUR et Ouardia ZEKRI qui m'ont encouragée. Grâce à elles, j'ai pu découvrir le côté passionnant de la recherche.

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à Mr Hamid OUNISSI pour sa disponibilité, sa gentillesse et son aide. Que Dieu le protège et lui accorde une excellente santé.

Une pensée très forte va à ma mère, mon père et à mes frères (Norro, Halim) et mes sœurs (Sana, Dihia et Chelia), à ma belle sœur Sana et ma petite nièce Celina, à toute ma famille ici en Algérie et en France, pour leur aide et leurs encouragements. Sans eux, ce modeste travail n'aurait jamais vu le jour.

Enfin, un salut à tous mes amis, mes camarades ainsi qu'à toutes les personnes qui m'ont aidée de loin ou de près pour réaliser ce travail (Hanane, Kaouther, Lamia, I.Nadia, K.Nadia, Zehira, Kahina, Nour, Touta, Hassina, Souhila).

Sommaire

Introduction générale	4
Bibliographie	8
Chapitre I : Tocophérol et huiles végétales	
I- Introduction.....	10
II- Huiles végétales	10
1- Composition des huiles végétales	10
• Composés majeurs.....	10
✓ Triglycérides.....	10
✓ Acides gras.....	11
• Composés mineurs.....	13
✓ Antioxydants.....	13
✓ Tocophérols.....	14
2- Oxydation des huiles végétales.....	16
✓ Rôle des tocophérols.....	17
Bibliographie	19
Chapitre II : Méthodes théoriques	
I- Introduction.....	21
II- Cadre Hartree Fock.....	23
1- Théorie de perturbation Moller-plesset (MP).....	25
2- Méthodes d'interaction de configurations (CI).....	25
III- Théorie de la densité fonctionnelle de la densité (DFT).....	26
1- Théorèmes de Hohenberg et Kohn.....	26
a- Premier théorème.....	26
b- Second théorème.....	26
2- Formalisme de Kohn-Sham.....	27
3- Fonctionnelles utilisées en DFT.....	28
a- Approximation locale de la densité (LDA).....	28
b- Approximation du Gradient Généralisé (GGA).....	29
c- Fonctionnelles hybrides.....	30
III- Etats excités.....	31
1- Calcul TDDFT.....	31
Bibliographie	35
Chapitre III : Propriétés structurales, activité antioxydante	
I- Modèles de tocophérol.....	37
II- Calculs des paramètres structuraux.....	37
III- Détermination théorique de l'activité antioxydante	40
1- Indicateurs physico-chimique de l'activité antioxydante.....	40
2- Activité antioxydante.....	42
❖ Détail des calculs théoriques.....	42
❖ Résultats	43
<i>Calculs des indicateurs de l'activité du l'α-tocophérol</i>	43

<i>Calculs des indicateurs de l'activité des trois configurations du tocophérol</i> (β , γ , et δ).....	44
IV-Conclusion.....	46
V- Spectre de vibration.....	47
Bibliographie.....	48

Chapitre IV : Propriétés Spectroscopiques.

I- Introduction.....	50
II- Principe de Franck-Condon.....	51
III-Spectrométrie quantitative.....	51
✓ Loi de Beer Lmobert.....	52
IV- Intérêt de la spectrométrie UV-VIS.....	52
VI- Résultats.....	53
1- Paramètres géométriques.....	54
2- Paramètres spectroscopiques	56
❖ Effet de la base	57
❖ Effet de la substitution de la chaine phytyl du alpha tocophérol.....	57
a- alpha TOH.....	58
❖ Spectre d'absorption.....	59
❖ Moment dipolaire de transition S_0-S_1	60
b- béta TOH.....	60
❖ Spectre d'absorption.....	61
❖ Moment dipolaire de transition S_0-S_1	61
c- gamma TOH.....	61
❖ Spectre d'absorption.....	62
❖ Moment dipolaire de transition S_0-S_1	62
d- delta TOH.....	63
❖ Spectre d'absorption.....	63
❖ Moment dipolaire de transition S_0-S_1	64
IV- Conclusion	64
Bibliographie.....	65
Conclusion générale.....	66