



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET
POPULAIRE



UNIVERSITE DE « EL HADJ LAKHDER » BATNA

FACULTE DES SCIENCES

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de

MAGISTER

En : **Chimie** Option : **Physique, Chimie Théorique et Informatique.**

Présenté par :

Amraoui Nour El-Yakine

Sujet :

**ETUDE THEORIQUE DES PROPRIETES
SPECTROSCOPIQUES DES BASES DE
L'ADN ET/OU ARN**

Soutenu le: 16/05/2011 devant le jury composé de :

Mr A. Dibi	Professeur	U. Batna	Président
Mme N. Ouddai	Professeur	U. Batna	Examinatrice
Mme L. Hambaba	Professeur	U. Batna	Examinatrice
Mlle D. Hammoutène	Professeur	USTHB	Directeur de thèse

Remerciements

Ce travail a été effectué au laboratoire de *Thermodynamique et Modélisation Moléculaire*, Faculté de Chimie de l'Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumédiène.

Tout d'abord, je tiens à exprimer ma reconnaissance à notre promotrice, Mlle **D. HAMMOUTENE**, Professeur à l'USTHB, pour m'avoir aidée et soutenue dans notre travail pendant toute la période du stage. Je tiens à la remercier chaleureusement pour ses encouragements et les précieux conseils qu'elle m'a accordé.

Je remercie Mr **A. DIBI**, Professeur à l'Université de Batna, de bien vouloir présider ce jury.

Je tiens également à remercier Mme **N. OUDDAI**, professeur à l'Université de Batna, pour avoir accepté de juger ce travail.

Je remercie Mme **L. HAMBABA**, Professeur à l'Université de Batna, pour avoir accepté d'examiner ce travail.

Je remercie Mr **H. OUNISSI**, maître de conférences à l'Université de BATNA pour ces efforts la journée de la soutenance.

DEDICACES

Je tiens à dédier ce mémoire à mes très chers parents que je remercie beaucoup pour m'avoir soutenue et encouragée tout au long de mes études. Je le dédie également à toute ma famille sans exception.

SOMMAIRE

Introduction générale.....	(1)
----------------------------	-----

Partie Théorique

Chimie théorique : méthode et concepts.....	(4)
A- Les méthodes ab-initio.....	(5)
A-1 L'équation de Schrodinger.....	(5)
A-2 L'approximation de Born-Oppenheimer.....	(6)
A-3 L'approximation de Hartree-Fock.....	(7)
A-4 Les méthodes Post-Hartree-Fock.....	(12)
A-4-1 La méthode perturbative Møller-Plesset.....	(12)
A-4-2 Les méthodes Multi-configurationnelle.....	(13)
A-4-2-1 L'interaction de configurations.....	(13)
A-4-2-2 La méthode de l'espace actif complet : CASSCF.....	(14)
A-5 Formation de la corrélation électronique.....	(15)
A-6 Les fonctions de base.....	(17)
B- La théorie de la fonctionnelle de la densité.....	(19)
B-1 La densité électronique.....	(21)
B-2 Les théorème de Hohenberg et Khon.....	(21)
B-2-1 Le premier théorème de Hohenberg et Khon.....	(21)
B-2-2 Le deuxième théorème de Hohenberg et Khon.....	(24)
B-3 Le formalisme de Kon- Sham.....	(25)
B-4 traitement de l'échange et de corrélation.....	(28)
B-4-1 L'approximation de la densité local (LDA).....	(28)

B-4-1-i Le modèle du gaz uniforme d'électrons.....	(29)
B-4-1-ii Le model de Thomas-Fermi.....	(30)
B-4-2 L'approximation du gradient généralisé(GGA).....	(31)
B-4-3 Les fonctionnelles hybrides.....	(33)
B-5 La performance de quelques fonctionnelles de densité.....	(35)

C- Traitement des états excités :

Théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps (TD-DFT).....	(37)
---	------

Chapitre I : Travaux antérieurs

I- La tautomérie : Nature et généralités.....	(38)
I-1 Introduction.....	(38)
I-2 Types de tautomérie.....	(39)
I-2-1 La tautomérie prototropique.....	(39)
I-2-2 La tautomérie annulaire.....	(40)
I-2-3 La tautomérie non-prototropique.....	(41)
I-3 Quelques effets de la tautomérie sur Cétone-Alcool.....	(42)
I-4 Tautomérie de l'uracile.....	(45)
I-5 Travaux antérieurs	(47)
I-5-1 l'effet de la tautomérie sur les paramètres géométriques de l'uracile.....	(48)
I-5-2 l'effet de la tautomérie sur les charges partielles des tautomères.....	(51)

Chapitre II : Stabilité relative des tautomères

II-1 Introduction.....	(57)
------------------------	------

II-2 Résultats.....	(58)
II-2-1 La stabilité relative des tautomères de l'uracile.....	(58)
II-2-2 Le potentiel d'ionisation	(62)
II-2-4 Les polarisabilités dynamiques.....	(64)
II-2-5 L'enthalpie de déprotonation.....	(70)
Chapitre III : l'effet de l'ionisation sur les tautomères de l'uracile	
III-1 introduction.....	(71)
III-2 L'effet de l'ionisation sur les tautomères de l'uracile.....	(72)
III-2-1 L'effet de l'ionisation sur les géométries.....	(72)
III-2-2 L'effet de l'ionisation sur les propriétés électroniques.....	(78)
Chapitre IV : Les états excités des tautomères de l'uracile	
IV-1 Introduction.....	(79)
IV-2 Les états excités des cinq tautomères les plus stables.....	(80)
Chapitre V : Analyse vibrationnel	
V-1 Introduction.....	(87)
V-2 Les modes vibrationnels de quelques tautomères.....	(88)
V-3 L'effet de la tautomérie sur les vibrations.....	(96)
Chapitre VI : attachement électronique des tautomères de l'uracile	
VI-1 Introduction.....	(97)

VI-2 L'affinité électronique des tautomères.....(99)

Conclusion générale.....(101)