L'effet de solvation sur la stabilité des complexes d'inclusion

**BEZZINA Belgacem, ABED GHARS Med Tayeb, kahalerras Mounir,
BENDJAMA Hocine, KHATMI Djameledine**

Abstract : L'analyse conformationnelle et structurale de complexe d'inclusion de l'Ibuprofén avec la β -cyclodextrine (β -CD) en phase gazeuse et en présence de molécules d'eau (explicite et implicite) est effectuée en utilisant différentes méthodes quantique PM3, HF, DFT et ONIOM. Sur la base des interactions de liaison hydrogène, les états solvatés de complexe et leurs fonctions de distribution ont été analysés pour déterminer le nombre de molécules d'eau qui forment la première et la seconde couche de solvation. La méthode PM3 (Parametric Method Number 3) a été utilisée pour étudier l'effet de solvation progressive de complexe d'inclusion en phase gazeuse avec de 10 à 200 molécules d'eau en construisant une couche d'hydratation autour de complexe. Les géométries moléculaires et les paramètres thermodynamiques pour les conformations les plus stables ont été déterminés.

Keywords : Complexe d'inclusion, β -cyclodextrine, solvation explicite, couche de solvation.