

# Investigation théorique des complexes d'inclusion acide acétylsalicylique: $\beta$ -cyclodextrine via la méthode AIM et la dynamique moléculaire

BEZZINA Belgacem

Soutenue en: 2019

**Abstract:** La mécanique quantique et la dynamique moléculaire ont été utilisées pour étudier l'inclusion d'aspirine neutre et déprotonée dans la cavité de la  $\beta$ -cyclodextrine ( $\beta$ -CD). Tout d'abord, la mécanique quantique a été utilisée pour étudier les propriétés structurales, énergétiques et topologiques du complexe neutre (ASA:  $\beta$ -CD) et de sa forme déprotonée (ASA-:  $\beta$ -CD). La nature et la force des interactions conventionnelles et non conventionnelles dans ces complexes ont été étudiées. Elle a été réalisée en combinant les critères théoriques d'Atoms In Molecules (AIM) suggérés par Koch et Popelier et la méthode des orbitales atomiques (NBO) à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité corrigée en dispersion (DFT-D3) avec la fonctionnelle B3LYP utilisant la base cc-pvdz dans la phase gazeuse. Tandis que la dynamique moléculaire a été utilisée pour étudier les processus d'inclusion des complexes (ASA:  $\beta$ -CD) et (ASA-:  $\beta$ -CD) pour déterminer l'énergie libre à l'aide de simulations non biaisées et biaisées. De plus, nous avons suivi la formation de liaisons hydrogène entre les molécules d'ASA/ASA- et la  $\beta$ -CD en fonction du temps d'un part, et la formation de liaisons hydrogène entre ASA/ASA- et les molécules d'eau, d'autre part.

**Keywords :** Aspirine, Cyclodextrine, Mécanique quantique, Complexes d'inclusion, Simulation par dynamique moléculaire, Liaisons hydrogène.