

Résumé

En se basant sur des résultats expérimentaux des données spectrales de FT-IR et l'analyse d'images MEB., nous avons fait l'étude computationnelle du processus d'inclusion de diphénylamine (DPA) dans la bêta cyclodextrine au moyen de la chimie computationnelle en utilisant plusieurs techniques à savoir la méthode statistique de Monte Carlo , la méthode semi empirique PM3MM , les méthodes HF et la DFT ainsi que l'approche ONIOM2. En déterminant le complexe d'inclusion le plus stable, nous avons pu étudier les différentes interactions entre les molécules par la méthode NBO.

Mots clés: β -Cyclodextrine, diphénylamine (DPA), PM3MM, DFT, HF, ONIOM2, NBO.