



Université Claude Bernard



Lyon 1

DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **22 septembre 2017**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **BARNES Loïc**

Titre de la thèse : « Etude théorique des saccharides : Structures et spectres infrarouges »



Résumé

Notre travail s'effectue dans le but de fournir une méthode pour permettre le séquençage des oligosaccharides, des biopolymères jouant un rôle clé dans le domaine de la santé comme dans certains domaines industriels tels que l'énergie ou l'alimentation.

Les méthodes utilisées pour séquencer les protéines sont limitées pour l'étude des oligosaccharides.

En revanche, nous montrons que l'alliance entre la méthode expérimentale de spectroscopie d'action (IRMPD) et les calculs théoriques est une méthode prometteuse pour le séquençage des oligosaccharides.

Notre méthode théorique consiste à obtenir des minima de la surface d'énergie potentielle.

Les spectres infrarouges de ces minima sont calculés avec la DFT et en utilisant une grande base.

Les spectres calculés sont alors comparés aux spectres expérimentaux afin d'obtenir des informations sur la structure des constituants ou la composition du mélange dans l'échantillon.

Notre approche alliant les calculs théoriques aux mesures IRMPD s'est avérée particulièrement efficace pour obtenir les structures des mono ou disaccharides présents dans l'échantillon.

De plus elle permet d'identifier des signatures spécifiques à des anomères ou à des conformères.