

UNIVERSITE KASDI MARBAH OUARGLA

Faculté Des Sciences Appliquées

Département de Génie des Procédés



MASTER ACADEMIQUE

Domaine : Sciences et Technologie

Filière : Sciences et Génie de l'Environnement

Spécialité : Génie des Procédés de l'Environnement

Présenté Par : - Chabbi Karima
- Benalia Aouatef

THEME

*Estimation de quelque propriété toxique des composés type
liquide ionique de multiple- système biologique*

Devant le jury composé de :

Dr.Baamer Lotfi
Pr.Skhari Lkhader
Dr.Mokadem khadra
Dr.Benchikhe Imane

Président
Examineur
Encadreur
Co-Encadreur

UKM Ouargla
UKM Ouargla
UKM Ouargla
ATH Laghouat

Année université 2018-2019



Remerciement

*En premier lieu, nous tiens à remercier notre Dieu, qui nous données la force
pour accomplir ce travail.*

*Nous adressons sont vifs remerciements à notre encadreur, Dr : Mokadem
khadra pour nous avons dirigé tout au long de ce travail.*

*Nous remercie également Dr : Benchikh Iman, pour ses explications, remarques
judicieuses et conseils qui m'ont été précieux pour la réalisation de
ce travail.*

*Nous présente mes chaleureux remerciements aux membres de jury
Qui ont consulté sont travail et aussi aux enseignants pour leur aides et
orientation durant nous études.*

*Mes derniers remerciements et ce ne sont pas les moindres, vons à tous ceux qui
ont participé de près ou de loin pour l'aboutissement de ce travail.*

Merci

Dédicaces

Nous dédions sont modetions travail à :

- *Les parents.*
- *Les frères et sœurs.*
- *Tous les membres de ma famille.*
- *Tous mes amis sans exception.*

Karima / Aouatef



SOMMAIRE

Liste des tableaux	
Liste des Figures	
Liste des équations	
Nomenclateurs	
Introduction générale	
Chapitre I : Etat de l'art des Liquides Ioniques	
I.1.Introduction	2
I.2.Généralités sur les liquides ioniques.	2
I.2.1. Définition	2
I.2.2.Historique	4
I.3.Nomenclature et acronymes des LIs.	6
I.4.Propriétés des liquides ioniques.	6
I.5.Génération de liquides ioniques.	8
I.6 .Prix des liquides ioniques.	10
I.7.Méthodes d'estimation des propriétés des LIs.	10
I.7. 1.Méthode QSPR.	10
I.7.2.Méthode GC.	10
I.8.Applications	11
I.9. Conclusion	13
Chapitre II : Outils et techniques utilisée	
II.1. Introduction	15
II.2. Descriptions de méthode.	15
II.2.1.Principe de la méthode.	15
II.3. Propriétés de traitement du système biologique.	17
II.4. Base des données.	19
II.5. Choisir une base des données.	21
II.5.1. Propriété CL 50.	22
II.5.2. Propriété CE50.	22
II .6. Fonction d'objectif.	24
II.6.1.Optimisation	24

II.6.2. Précision	24
II.6.3. Validation	25
II.7. Quelques études pour estimer les propriétés toxiques des liquides.	25
II.8. Conclusion	27
Chapitre III : Résultats et discussion	
III.1.Introduction	29
III.2.Résultats	29
III.2.1.Concentration létale(CL50).	29
III.2.2.Concentration efficace (CE50).	29
III.3.Discussions	34
III.3.1. Graphes du (CL50).	34
III.3.2. Graphes du (EC50).	35
III.4.Conclusions	39
Conclusions générale.	41
Bibliographies	43
Annexe A	46
Annexe B	54
Résumé	66

Liste des tableaux	
Tableau	Page
I.1. Exemple d'anions de liquide ionique.	4
I.2.Nomenclature utilisée pour la dénomination des cations imidazoliums.	6
I.3 .Comparaison des liquides ioniques avec solvant organique.	8
II.1.Comparaison entre la méthode de contribution d'interaction de groupes et contribution des groupe.	17
II.2.Définition les propriétés traitées de système biologique choisi.	18
II.3.Les structures chimiques des cations et les anions dans liquides ionique.	20
II.4.Les propriétés toxiques et les points de données des liquides ioniques.	23
II.5.Quelques études pour estimer les propriétés toxiques des liquides ioniques.	26
III.1.Les résultats de modelés statistiques proposés de méthode (GIC).	37
III.2.Les résultats de l'erreur relative proposée de méthode (GIC).	38
III.3.Comparaison du LC50 et EC50 proposés dans ce travail avec les certaines études pour estimer des propriétés toxique de liquide ionique.	39

Liste des Figures

Figures	Page
I.1. Les LIs un sous-ensemble des sels fondus.	2
I.2. Quelques types des cations des LIs.	3
I.3. Nombre de publications entre 1997 et 2016 concernant le sujet "ionique liquide inorganique synthèse".	5
I.4. Cations imidazolium.	6
I.5. Représente Evaluation des liquides ioniques.	9
I.6. Quelques applications des liquides ioniques.	12
II.1. Algorithme utilise pour estimer des propriétés.	16
II.2. Diagramme de choisie de base des données.	21
III.1. Comparaison entre les données de LC50 prédit et expérimentale pour (◆) et l'ensemble de validation (□) du système biologie Daphnia magna.	34
III.2. Comparaison entre les données de LC50 prédit et expérimentale pour (◆) et l'ensemble de validation (□) du système biologie Vibrio fischeri.	34
III.3. Comparaison entre les données de EC50 prédit et expérimentale pour (◆) et l'ensemble de validation (□) du système biologie Acetylcholinesterase.	35
III.4. Comparaison entre les données de EC50 prédit et expérimentale pour (◆) et l'ensemble de validation (□) du système biologie Daphnia magna.	36
III.5. Comparaison entre les données de EC50 prédit et expérimentale pour (◆) et l'ensemble de validation (□) du système biologie Vibrio fischeri.	36
III.6. Comparaison entre les données de EC50 prédit et expérimentale pour (◆) et l'ensemble de validation (□) du système biologie Leukemia rat cell.	37

. Liste des équations

Equations	Page
I.1.Equations de propriétés (P).	15
II.2.Equations de fonction d'objectif (F).	24
II.3.Equations l'écart absolu moyen (AAD).	24
II.4.Equations l'écart relatif moyen (AARD%).	24
II.5.Equations de coefficient de corrélation (R^2).	24
III.1.Equations corrélation de propriété CL50 par la MCIG de système biologique : Daphnia magna.	29
III.2.Equations corrélation de propriété CL50 par la MCIG de système biologique : Vibrio fischeri.	29
III.3.Equations corrélation de propriété CE50 par la MCIG de système biologique : Acetylcholinesterase.	29
III.4.Equations corrélation de propriété CE50 par la MCIG de système biologique : Daphnia magna.	29
III.5.Equations corrélation de propriété CE50 par la MCIG de système biologique : Vibrio fischeri.	30
III.6.Equations corrélation de propriété CE50 par la MCIG de système biologique : Leukemia rat cell.	30

Nomenclateurs

BMIM-FeCl ₄	1-Butyl-3-methylimidazolium tétrachloroferrate.
EMIM-BF ₄	1-Ethyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate.
BMIM-BF ₄	1-Butyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate.
QSPR	La relation structure-propriété quantitative.
NTf ₂ ⁻	Bis ((trifluoromethyl) sulfonyl) imide.
CIG	Contribution des interactions des groupes.
CL50	Concentration l'étale.
CE50	Concentration efficace.
CG	Contribution des groupes.
LI	Liquides ioniques.
P_i^{Exp}	Valeurs de propriétés expérimentales.
P_i^{cal}	Valeurs de propriétés calculées.
R ²	Coefficient de détermination.
F	La fonction d'objectif.
P	Propriétés
n_j	Le nombre de contribution des interactions des groupes de la première Classe dans modelé.
m_k	Le nombre de Contribution des interactions des groupes de la seconde classe dans molécule.
ΔC_j	Contribution des interactions des groupes de la première classe dans molécule.
ΔD_k	Contribution des interactions des groupes de la seconde classe dans molécule.

Introduction générale

Introduction générale

L'industrie chimique est de plus en plus montrée du doigt pour sa participation à la pollution environnementale et à l'effet de serre. Elle utilise notamment une chimie pleine, en solvants organiques. La plupart de ces solvants organiques sont toxiques et cancérigènes, et certains sont inflammables et dangereux à transporter et à manipuler.

Les chimistes recherchent des solvants de remplacement, qui seraient aussi efficaces que les solvants organiques, et qui n'en auraient pas les mêmes inconvénients. Ils ont découvert une nouvelle classe de solvants, moins polluants et moins volatils : « les liquides ioniques ».

Ces nouveaux solvants suscitent beaucoup d'intérêt à la fois par leur sûreté d'emploi et par les possibilités nouvelles qu'ils apportent en synthèse.

Le domaine de recherche dans les procédés chimiques, biochimiques et environnementaux, est l'un des intervalles les plus vastes dans les développements scientifiques et industriels.

La conception des procédés demande une bonne analyse de fonctionnement des opérations unitaires qui sont représentées par des modèles mathématiques, on prend comme exemple les équations des bilans, quel que soit leur type, massique ou thermique et les équations d'équilibre...etc.

Ces modèles prennent comme variables intermédiaires, les propriétés physico-chimiques des composés purs et des mélanges. Donc il est nécessaire d'utiliser des valeurs exactes de ces propriétés pour appliquer les modèles.

D'autre côté, l'obtention de ces valeurs n'est pas facile à réaliser sauf par voie expérimental, mais les méthodes expérimentales sont longues, complexes, coûteuses et ne sont pas toujours réalisées, heureusement nous avons développé une méthode d'estimation peut déterminer les propriétés physico-chimiques des liquides ioniques avec des pourcentages des erreurs acceptables.

Ces méthodes basées sur des corrélations mathématiques, utilisent des valeurs de contributions de plusieurs groupes. Il est donc impossible de calculer les propriétés désirées, Manuellement car cette opération est longue. Pour cela, il est plus aisé de les mettre sous forme de programmes, pour faciliter les calculs.

Le principe de base de cette méthode est la fragmentation de la structure moléculaire en plusieurs interactions binaires (interaction de deux groupes simples et voisins) avec l'ajoute de quelque groupes qui simplifié l'application de contribution des interactions des groupes types liquides ioniques.

Dans ce travail, nous proposons une nouvelle modèle d'estimation de quelques propriétés toxique des liquides ioniques à savoir la concentration l'étale CL50 et la concentration efficace CE50.

Pour amener à terme ce travail, on a posé plusieurs questionnements :

1. que savons-nous sur les liquides ioniques ?
- 2- quelle est le principe de la méthode utilisée ?
- 3- peuvent-ils élargir la base de données ?

Pour apporter des réponses à ces questions, le présent travail s'organise comme suit :

- Nous présenterons tout d'abord dans le chapitre I, une étude théorique sur les liquides ioniques.
- Le second chapitre est consacré à la description détaillée au principe de la méthode.
- Le dernier chapitre se porte sur les résultats suivies par discussion.

Enfin, on a terminé par une conclusion générale sur la méthode développée.

Chapitre I

Etat de l'art des Liquides Ioniques

I.1.Introduction :

Les Liquides ioniques [LIs] sont connus sous différentes appellations : " room température molten salts", " ionique fluide" ou encore " liquide organique salts". Une question se pose alors : forment-ils une nouvelle classe de matériaux, ou s'agit-il d'une nouvelle nomenclature pour illustrer ce que l'on appelait traditionnellement les sels fondus ? Dans ce chapitre, cette question est abordée avec un aperçu sur l'historique de ces liquides. Leurs propriétés uniques révélées par des études fondamentales ont attiré l'attention non seulement des chercheurs mais également des industriels. Rapidement, ces nouveaux matériaux sont devenus incontournables dans des applications visant l'énergie et l'environnement.

I.2.Généralités sur les liquides ioniques :

I.2.1.Définition :

Les liquides ioniques (LIs) sont des sels liquides se différenciant de l'ensemble des sels fondus par une température de fusion inférieure à 100°C (arbitrairement fixée en référence à la température d'ébullition de l'eau), Dans le cas idéal, mais un grand nombre d'entre eux sont liquides à température ambiante (*Figure I.1*).

Les LIs sont constitués d'un cation le plus souvent organique, associé à un anion organique ou inorganique et les combinaisons cations/anions possibles sont très nombreuses ($>10^6$) et en constante évolution. [1]

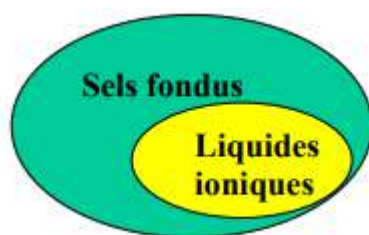
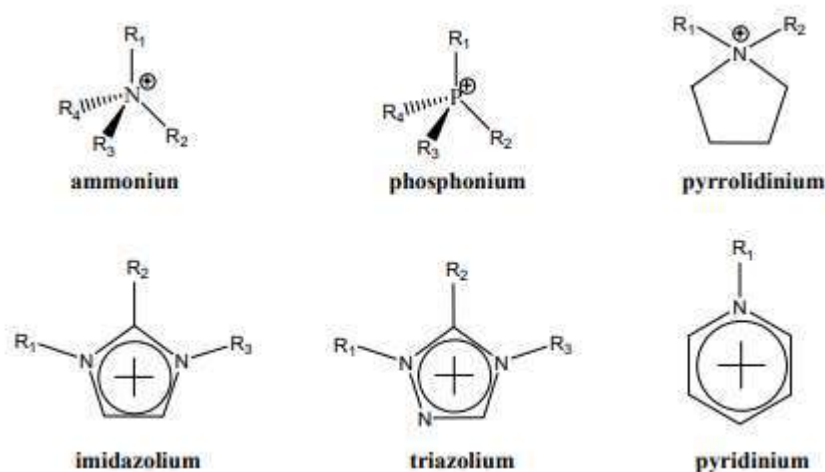


Figure (I.1) : Les LIs un sous-ensemble des sels fondus. [1]

Les cations rencontrés sont généralement volumineux et dissymétriques. Les plus classiques sont des ammoniums ou phosphonium quaternaires, tels que les tétraalkylammoniums ou tétraalkylphosphoniums mais de nombreux LIs sont à base de systèmes hétéroaromatiques comme les alkylpyridiniums, les Triazolium ou encore des Alkylpyrrolidiniums.

Les plus étudiés sont les sels d'imidazoliums diversement substitués sur les atomes d'azote et de carbone.(*Figure I.2*) De plus, toute une série de cations fonctionnalisés a été récemment

développée notamment des actions portant des groupements amines, alcools ou éthers, acides carboxyliques ou esters, thiols, vinyl et alkyl, alcynes ou encore nitriles. Des cations chiraux ont également été synthétisés. [2]



Figure(I.2) : Quelques types des cations des LIs [2]

Les anions mis en œuvre sont des anions inorganiques ou organiques (*tableau I. 1*). Les anions tétrafluoroborate (BF_4^-) et hexafluorophosphate (PF_6^-) très utilisés en chimie organique ou organométallique pour conférer une solubilité recherchée aux espèces ioniques sont à la base de très nombreux sels liquides. Pour ce qui est des anions organiques, les anions fluorés (CF_3CO_2^-) sont très intéressants notamment en catalyse organométallique.

Les dérivés sulfoniques : CF_3SO_3^- , $\text{C}_4\text{F}_9\text{SO}_3^-$, $(\text{CF}_3\text{SO}_2)_2\text{N}^-$ et $(\text{CF}_3\text{SO}_2)_3\text{C}^-$ sont également très étudiés pour leur stabilité thermique et leur pouvoir faiblement coordonnant. Récemment d'autres anions à propriétés spécifiques ont été développés tels que des anions chiraux, ou des anions fonctionnalisés par des nitriles, des hydroxyborates ou des bases de Lewis. Des systèmes anioniques à base d'hétéropolyanions ou de sels métalliques sont également étudiés. [3]

Tableau (I.1) : Exemple d'anions des LIs. [3]

Anions inorganiques	Anions organiques	
F ⁻ , Cl ⁻ , Br ⁻ , I ⁻ , BF ₄ ⁻ , PF ₆ ⁻ , SbF ₆ ⁻ , AsF ₆ ⁻ , NO ₃ ⁻ , ClO ₄ ⁻ , Al _x Cl _(3x+1) ⁻ , Al _x Et _x Cl _(2x+1) ⁻ , CuCl ₂ , AuCl ₂ , ZnCl ₃ , SnCl ₃	CH ₃ CO ₂ ⁻ , CH ₃ SO ₄ ⁻ , C ₆ H ₅ SO ₃ ⁻ (=OTs), CF ₃ CO ₂ ⁻ , C(CF ₃ SO ₂) ₃ ⁻ , CF ₃ SO ₃ ⁻ (=OTf), N(SO ₂ CF ₃) ₂ ⁻ (=NTf ₂), BR ₄ ⁻ , R ₃ BOH ⁻	I.2 .2. Hi

historique :

En 1888, *Gabriel* et *Weiner* rapporte la découverte du liquide ionique d'Ethanolammonium nitrate (EtNH₃NO₃) qui a un point de fusion 52-55°C. [4] La description du premier liquide ionique date du milieu du 19^{ème} siècle lors de la réaction de Friedel et Craft entre le benzène et le chlorométhane catalysée par un acide de Lewis, AlCl₃, une seconde phase apparaît sous la forme d'une « huile rouge ».

La structure de ce composé sera identifiée plus tard par le Pr. *Jerry Atwood* à l'université du : Missouri grâce à l'apparition de la RMN et correspond au complexe intermédiaire .Jusqu'a alors présumé, de la réaction de Friedel et Craft : Le sel d'heptadichloroaluminate des sels liquides de nitrate d'alkylammoniums furent- ensuite découverts au début du 20^{ème} siècle en particulier le nitrate d'éthylammonium dont le point de fusion est de 12°C.

Ces découvertes furent le début de l'ère des liquides ioniques tels qu'ils sont connus à ce jour. [2]. En 1934, *Grenash* obtint l'ingéniosité de l'invention d'utiliser les fluides ioniques comme solvant pour la cellulose. Dans les années 1960, *John Yok* développa une méthode pour préparer un liquide à partir d'une combinaison de deux chlorures de cuivre solide et de deux chlorures d'ammonium. Exactement en 1961, *Bloom* était le terme « liquides ioniques » sur les sels fondus. Au début des années 1970, l'US Air Force a lancé un projet scientifique visant à améliorer les propriétés des batteries thermiques contenant de l'électrolyte chloruré en fusion (LiCl - KCl) avec un point de fusion de 355°C. Ce projet est directement allé à l'utilisation de chloroammonium avec un point de fusion de 107°C.

Base du chlorure d'aluminium et de l'halogénure 1 - alkyl pyridinium, cependant, il a été observé que la vitesse de réduction du pyridinium, ce qui a permis de lancer un nouveau projet de recherche à la fin des années 1980 visant à obtenir des sels fondus liquides à température normale et consistant en un cation plus rigide.

Au début des années 1990, les [LIs] ont vu leurs applications grandir et couvrir des domaines d'applications plus larges, comme dans la synthèse organique, la catalyse, l'électrochimie, la solvataion [5]. Du point de vue industriel, en 1998, l'Institut Français du Pétrole (IFP) a lancé procédé industriel pour la production de nickel (iso –octane) se dissout dans le liquide ionique catalyseur.

En 2000, plus de 65 chercheurs ont organisé un atelier de travail de l'OTAN sur les liquides ioniques industriels, intitulé "Application industrielle verte des liquides ioniques". En 2005, la première conférence sur la grippe ionique s'est tenue à Salzbourg, en Autriche. Plus de 400 participants de 33 pays, dont Rogers, Sidon et Holberry, représentants de la US Environmental Protection Agency, ont assisté à la réunion et sont les premiers ingénieurs chimistes à avoir mis au point des solvants pouvant être récupérés.

En 2010, des applications ont été introduites TSILs : " tâche Liquides ioniques spécifiques".

À ce jour, des découvertes sont en cours pour expliquer comment les liquides ioniques interagissent avec les espèces pour modifier leur activité.

La figure ci-dessous illustre les recherches menées au cours des 20 dernières années. [4]

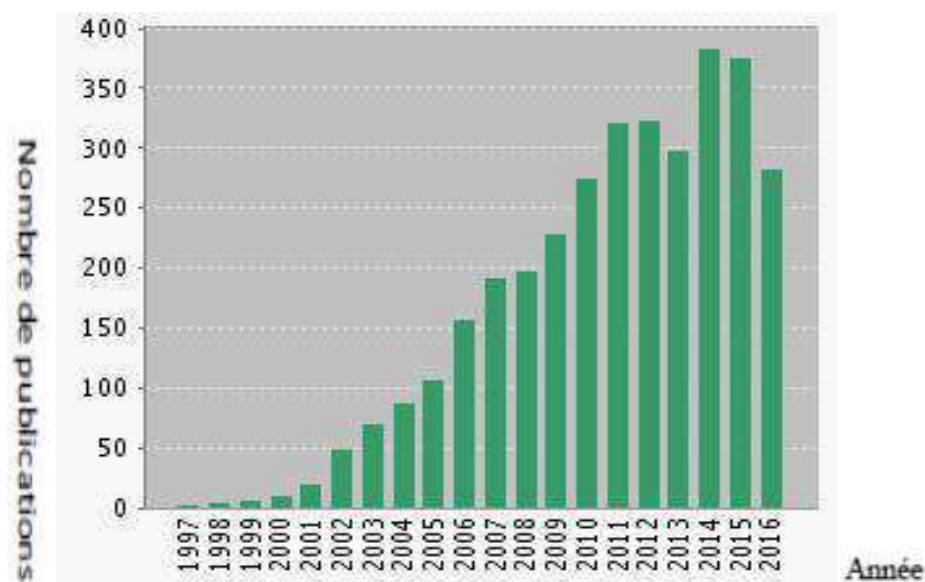


Figure (I.3) : Nombre de publications entre 1997 et 2016 concernant le sujet "ionique liquide inorganique synthèse" dans Web of Science. [4]

I.3. Nomenclature et acronymes des LI :

La dénomination des cations imidazolium ($R_1R_2R_3IM$) utilisés par la suite est présentée dans le tableau suivant :

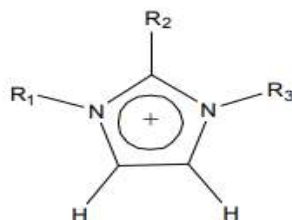


Figure (I. 4) : Cations imidazolium

Tableau(I.2) : Nomenclature utilisée pour la dénomination des cations imidazoliums.

Nom de cation	Acronyme	R ₁	R ₂	R ₃
1-éthyl-3-méthylimidazolium	EMIM	CH ₃	H	C ₂ H ₅
1-butyl-3-méthylimidazolium	BMIM	CH ₃	H	C ₄ H ₉
1-hexyl-3-méthylimidazolium	HMIM	CH ₃	H	C ₆ H ₁₃
1-octyl-3-méthylimidazolium	OMIM	CH ₃	H	C ₈ H ₁₇
1-décyl-3-méthylimidazolium	DMIM	CH ₃	H	C ₁₀ H ₂₁
1,3-dibutylimidazolium	BBIM	C ₄ H ₉	H	C ₄ H ₉
1-butyl-2,3diméthylimidazolium	BMMIM	CH ₃	CH ₃	C ₄ H ₉

Les anions (X) bis (trifluorométhanesulfonyl) imides et Trifluoromethylsulfonate seront désignés par NTf₂et OTf respectivement. [2]

I.4. Propriétés des liquides ioniques :

Les propriétés physico-chimiques sont très dépendantes de la pureté du produit et varient beaucoup avec la présence d'eau ou d'ions halogénures.

Les propriétés des liquides ioniques purs dépendent de la taille et de la nature des ions qui les composent ; ainsi par exemple :

- avec des anions Cl⁻, Br⁻ ou trifluoroacétates ils sont hydrophiles (solubles dans l'eau)
- avec PF₆⁻ ou bis (triflyl) amidure ils sont hydrophobes et forment deux phases liquides avec l'eau.

- Une des raisons qui explique leur faible point de fusion, alors que leur nature ionique pouvait faire penser le contraire, est que leurs constituants sont généralement asymétriques ; cette asymétrie rend plus difficile leur arrangement en structure fortement ordonnée avec, donc, un réseau de grande énergie. De fait, leur structure cristalline de faible énergie entraîne un point de fusion relativement bas.

La distribution des charges sur les ions est aussi un facteur intervenant sur le point de fusion. Plus la taille des ions n'est importante et donc la charge délocalisée dans l'espace et plus le point de fusion est bas. On remarque ce phénomène par exemple, avec des structures aromatiques qui participent à cette délocalisation.

- LIs ont une forte viscosité ; elle s'explique par les importantes interactions entre les ions qui les composent et qui entraînent une moins grande mobilité de l'ensemble.
- LIs ont une stabilité thermique et chimique élevée.

Les liquides ioniques ayant un anion faiblement nucléophile sont stables jusqu'à 400°C.

Ils sont ininflammables sauf les nitrates et les picrates.

- LIs sont bons conducteurs de l'électricité.

La conductivité ionique d'un électrolyte est l'aptitude qu'il a à se laisser traverser par un courant électrique ; plus celle-ci est grande et meilleure est la qualité du liquide ionique comme électrolyte. En général une forte viscosité diminue la conductivité ionique.

Ainsi EMIM-BF₄ a une viscosité à 25°C de 25,7.10⁻³ Pa.s et une conductivité à 25°C de 14 mS.cm⁻¹ tandis que BMIM-BF₄ (même anion avec un groupement butyle à la place d'un groupement éthyle dans le cation) a une viscosité à 25°C de 180.10⁻³ Pa.s et une conductivité à 25°C de 3,5 mS.cm⁻¹ ; on voit donc qu'on a intérêt à utiliser des liquides ioniques de faible viscosité si on les destine à être des électrolytes.

- LIs possèdent une tension de vapeur très faible et donc une faible volatilité qui permet une séparation facile des produits dissous, par distillation, et évite une exposition aux vapeurs non contrôlées.

On peut facilement les régénérer et les recycler.

- LIs sont relativement peu coûteux et faciles à synthétiser. Toutes ces qualités vont dans le sens d'une chimie propre. Leur toxicité dépend de leur composition. Sont notablement toxiques ceux ayant PF₆⁻ comme anion ou les ions imidazolium comme cation, la toxicité augmentant avec la longueur des chaînes alkyles. [6]

Tableau (I.3) : Comparaison des liquides ioniques avec solvant organique. [7]

Propriétés	Solvants Organiques	Liquides ioniques
Nombre de Solvants	>1000	>1000 000
Applicabilité	Function unique	Multifonction
Capacité catalytique	Rare	Commun et accordable
Chiralité	Rare	Commun et accordable
pression de vapeur	Respect les équations de Clausiu – Clapeyron	Négligeable dans des conditions normales
Inflammabilities	Généralement inflammable	Généralement ininflammable
Salvation	Faiblement solvatant	Fortement solvatant
Tenabilité	Gamme limitée de Solvants disponibles	Gamme illimitée signifie «Solvants de concepteur»
Polarité	Les concepts conventionnels de Polarité s'appliquent	Concept de Polarité discutable
Coût	Normalement bon Marché	2 à 100 Fois le coût des Solvants organiques
Recyclabilité	Impératif vert	Impératif économique
Viscosité [cP]	0.2–100	22–40 000
Densité [g · cm ⁻³]	0.6–1.7	0.8–3.3
Indice de réfraction	1.3–1.6	1.5–2.2

I.5. Génération de liquides ioniques :

Le premier liquide ionique (nitrate d'ammonium) a été découvert en 1914 par *Walden*. La première génération de liquides ioniques était caractérisée par l'utilisation de cations tels que les dérivés de dialkylimidazolium et d'alkylpyridinium et d'anions tels que les chloroaluminates et d'autres halogénures métalliques décrits comme toxiques et non biodégradables.

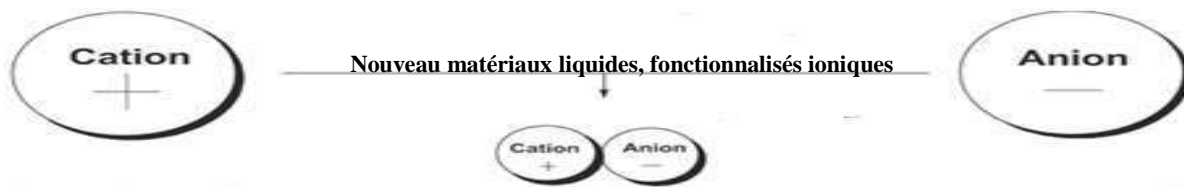
Cette génération d'LI's était sensible à l'oxygène (instable dans l'eau et l'air) et ne pouvait être traitée que sous l'influence d'AlCl₃.

La deuxième génération de la première génération se caractérisait par sa stabilité dans l'eau et dans l'air, les anions eau-oxygène étant remplacés par des halogénures (Cl⁻, Br⁻, I⁻) ou des anions tels que BF₄⁻, PF₆⁻ et C₆H₅CO₂⁻. Des cations tels que dialkylimidazolium ou alkylpyridinium ont été conservés et de l'ammonium et du phosphonium ont été ajoutés. Cela a attiré une grande attention dans divers domaines.

La troisième génération de liquides ioniques est basée sur des anions plus stables et stables telles que [2-CF₃SO₂]⁻, des sucres, des acides aminés ou organique ou du sulfate d'alkyle.

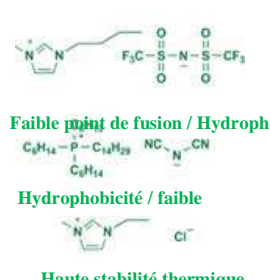
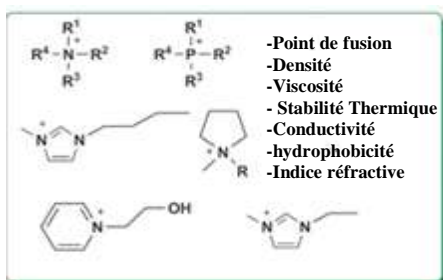
Les cations et / ou les anions utilisés sont biodégradables, facilement disponibles et présentent une toxicité moindre. Il est plus imperméable que la deuxième génération. [8]

- La figure(I.5) : représente Evaluation des liquides ioniques. [9]

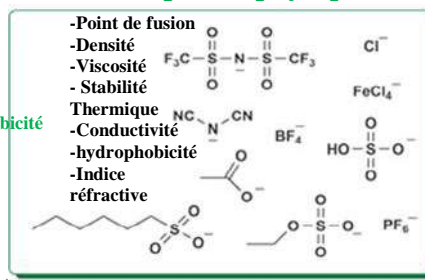


Génération 1 : ILs avec des propriétés physiques

Propriétés physique



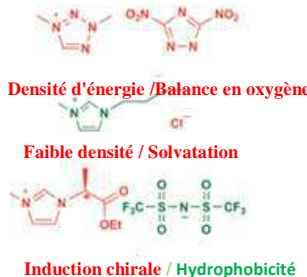
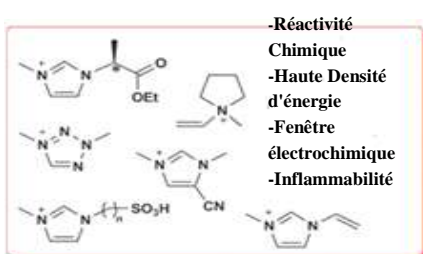
Propriétés physique



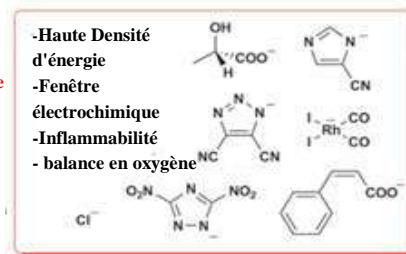
Génération 2 :

ILs avant des propriétés chimiques ciblées combinés avec des propriétés physiques

Propriété chimique



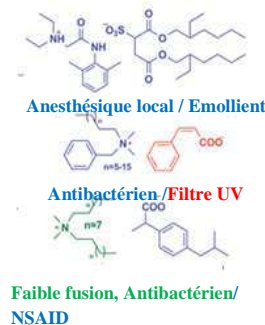
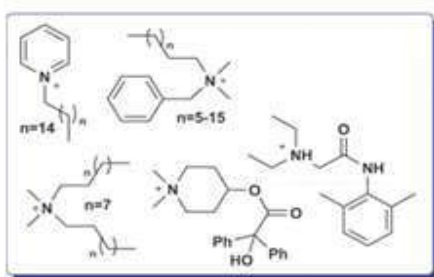
Propriété chimique



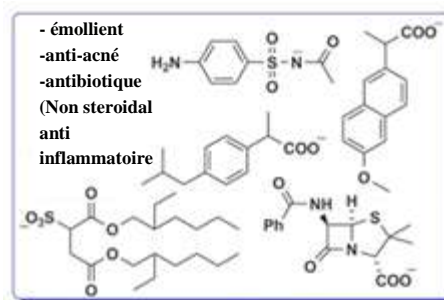
Génération 3 :

ILs avec des propriétés biologiques ciblées combinés choisis physiques et chimiques

Propriété biologique



Propriété biologique



I.6. Prix des liquides ioniques :

Holberry et al (2002) ont tenté de préparer des liquides ioniques peu coûteux pour l'anion (1-méthylmazoleum), 65 USD pour le diméthyle de sulfate (250 g) et 30 USD pour le Diethylsulfate (250 g). De toute évidence, la préparation de fluide est beaucoup plus chère que les solvants et les catalyseurs conventionnels. Où le prix du liquide ionique (1-butyl-3-methylimidazolium chloride) actuellement au (23-03-2019) est de 101 euros par (50g) et de 364 euros par (250g) basé sur la société *Sigma Aldrich*. Signifie que le prix des liquides ioniques est 25 fois le prix de solvant traditionnel vendu dans la même entreprise. [10]

I.7. Méthodes d'estimation des propriétés des liquides ioniques :

Plusieurs méthodes ont été trouvées pour estimer et prédire certaines propriétés de la formule détaillée *groupe contribution (GC)* et *la relation structure-propriété quantitative (QSPR)*.

I.7.1. Méthode QSPR :

Le principe des méthodes *QSPR* est, comme leur nom l'indique, de mettre en place une relation mathématique reliant de manière quantitative des propriétés moléculaires aussi bien électroniques que géométriques, appelées descripteurs, avec une observable macroscopique (activité biologique, toxicité, propriété physico-chimique, etc.), pour une série de composés chimiques similaires à l'aide de méthodes d'analyses de données. Aussi la forme générale de modèle est :

$$\text{Propriété} = f(\text{structure})$$

L'objectif d'une telle méthode est donc d'analyser les données structurales afin de détecter les facteurs déterminants pour la propriété mesurée. [11]

I.7.2. Méthode GC :

De cette manière facturer la molécule se compose de plusieurs groupes de fonctions et d'une propriété composite pouvant être estimée sous forme de somme des contributions. Tous les groupes fonctionnels d'une partie contribuent à une propriété pouvant être obtenue à l'aide de données empiriques ou de matériaux contenant un groupe fonctionnel. Cette méthode est difficile à identifier les groupes. [12]

I.8.Applications :

Les LIs sont devenus largement utilisés dans des domaines allant de l'industrie chimique à l'alimentaire. Citons leurs rôles comme solvants dans des catalyses variées, comme électrolytes dans des batteries, et comme matériaux pour dissoudre les pulpes de banane gelées. Certains LIs a anions présentant un spin magnétique prononcé, sont particulièrement utilisés en tant que liquides magnétiques : par exemple, le composé [Bmim] + [FeCl₄] a une susceptibilité de $40 \cdot 10^6 \text{emu.g}^{-1}$. Les LIs interviennent :

- dans les processus de séparation.
- dans la synthèse des nano-objets comme les nano-fils d'argent.
- dans le stockage de l'hydrogène.
- dans la fonctionnalisation des nanotubes de carbones.
- et finalement en pharmacie pour l'extraction des composés cosmétiques et pour isoler et extraire la drogue anti-malaria des plantes.

Les LIs sont aussi utilisés pour produire des miroirs liquides. Signalons finalement que les LIs sont aussi devenus incontournables dans le processus de recyclage et surtout dans les réactions de séparation des composés synthétiques du métal comme la séparation des polymères des déchets plastiques. Cette révolution a permis de sauver des tonnes de composés plastiques recyclés tous les ans. [13]

- La figure suivante illustre de quelques applications des liquides ioniques.



Figure (I. 6) : Quelques applications des liquides ioniques.

I.9. Conclusion :

Dans ce chapitre on a essayé de réaliser une étude bibliographique sur liquides ioniques par la projection de la lumière sur leur définition, leur historique et on a présenté certaines propriétés physico-chimiques ,avec génération et Prix des LIs.

Les [LIs] sont des liquides formés généralement par un cation organique volumineux et un anion organique ou inorganique. Les propriétés ont éveillé un grand intérêt due à leurs applications potentielles dans des nombreux domaines industriels.

Le grand manque de connaissances accumulées sur les propriétés de ces nouveaux composés, laisse des lacunes sur les avantages de ces dernies par rapport aux solvants organiques traditionnels dont les propriétés peuvent être aussi bien rationalisés

Chapitre II

Outil et techniques utilisée

II.1.Introduction :

Dans ce chapitre, nous allons projeter la lumière sur les descriptions des méthodes proposées. On discute également sur la base des données expérimentales et les groupes des contributions qui sont utilisés dans cette méthode et certaines études antérieures pour estimer des propriétés toxiques de liquide ionique.

II.2.Descriptions de méthode :

Dans ce travail, les propriétés des composés sont considérées pour être des modèles mathématiques en fonction des paramètres dépendant de la structure moléculaire.

Ces propriétés peuvent être calculées par la sommation du nombre de fois de chaque interaction des groupes, présents dans la molécule.

II.2.1.Principe de la méthode :

Le principe de base utilisé pour fragmenter la structure moléculaire des [LIs], prend en considération les interactions entre deux groupes simples (par exemple CH₃-&-CH₂-) et les interactions entre un cation et anion (interactions des groupes simples >N<+ & Cl⁻) et du second ordre utilise les contributions d'interactions binaires entre des groupes de liaison (par exemple : CN- & -N- & -CN-). La méthode a été proposée par Marrero-Morejón et Pardillo-Fontdevila (1999). [12] et Mokadem et al (2016). [14] [15].

La procédure du calcul utilisée pour élaborer les modèles qui est présentée à la Fig (II.1). Et l'équation (II.1) est prédite des propriétés (**P**) en utilisant une équation suivante :

$$P = A + \sum_j n_j \Delta c_j + \sum_k m_k \Delta c_k \quad \text{Eq. (II. 1)}$$

Où **n_j** et **m_k** sont le nombre du premier ordre et du second ordre des groupes de type **j** et **k** dans la molécule respectivement.

Δc_j et **Δc_k** sont des contributions d'interactions pour le premier ordre et le second ordre respectivement. **A** est constante.

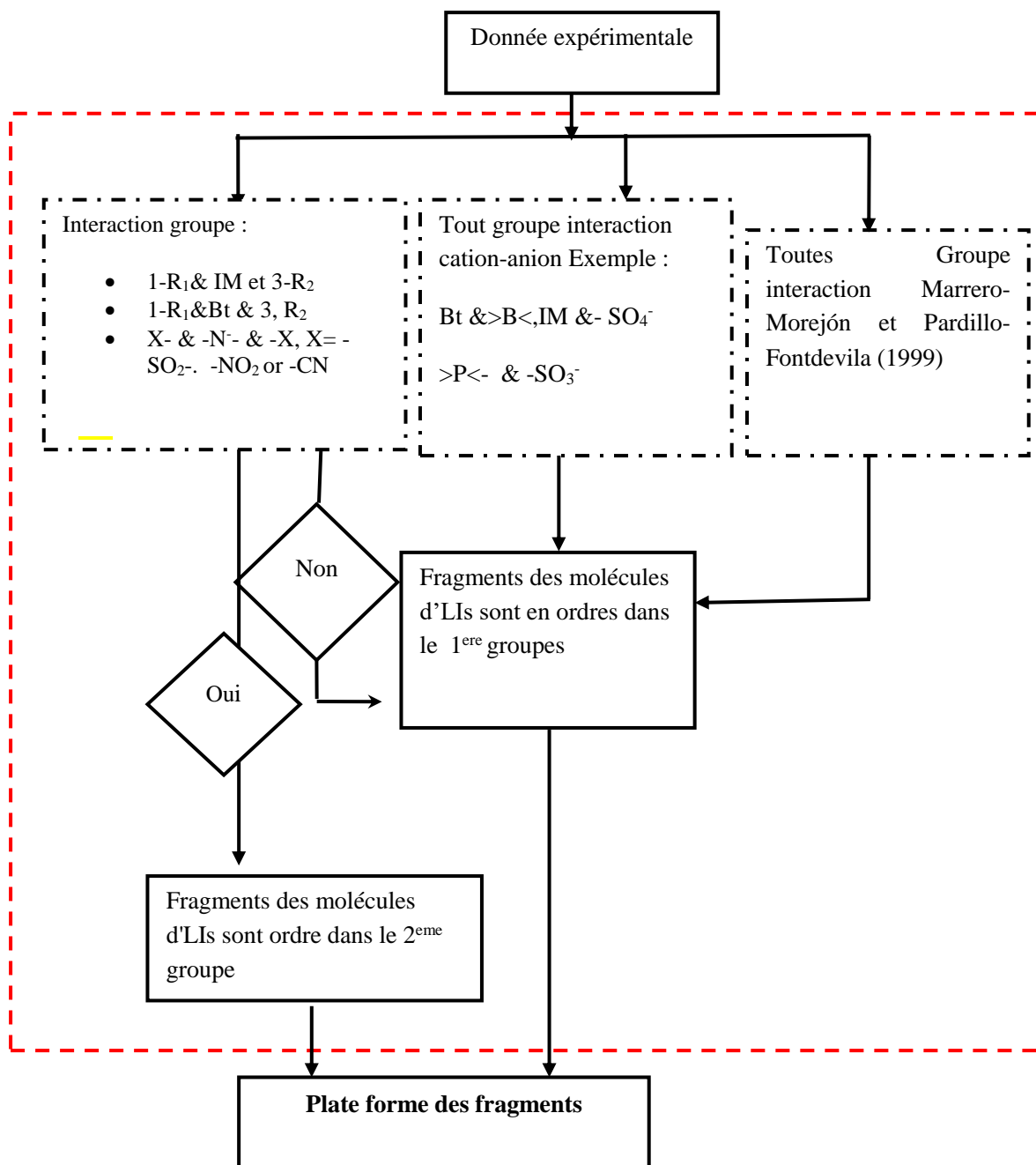
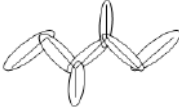

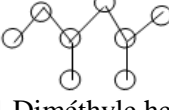
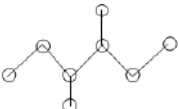
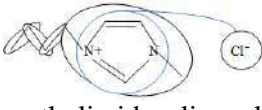

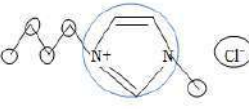
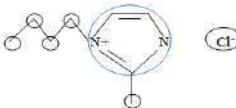


Figure (II.1) : Algorithme utilise pour estimer des propriétés.





Tableau (II.1) : Comparaison entre la méthode de contribution d'interaction de groupes et contribution des groupes.

	méthode	Formule	Groupes	
Composes Organique Octane C_8H_{18}	Contribution interaction des groupes (CIG)	 3,4-Diméthyle hexane	CH ₃ & -CH ₂ - 2 CH ₂ - &>CH- 2 CH ₃ &>CH- 2 >CH- &>CH- 1	
		 2,4-Diméthyle hexane	CH ₃ - &>CH- 3 >CH- & -CH ₂ - 3 CH ₃ -CH ₂ - 1	
	Contribution des groupes (CG)	 2,4-Diméthyle hexane	CH ₃ - 4 -CH ₂ - 2 >CH- 2	
		 3,4-Diméthyle hexane		
	Liquide ionique $C_8H_{15}ClN_2$	Contribution interaction des groupes (CIG)	 1-Butyl-3-methylimidazolium chloride	CH ₃ & -CH ₂ - 1 -CH ₂ - & -CH ₂ - 2 CH ₃ & IM & -CH ₂ - 1 IM & Cl- 1
			 1-Butyl-2-methylimidazolium chloride	CH ₃ & -CH ₂ - 1 CH ₃ & IM & -CH ₂ 1 IM & 2-CH ₃ 1 IM & Cl- 1
Contribution des groupes (CG)		 1-Butyl-3-methylimidazolium chloride	CH ₃ 2 CH ₂ 3	
		 1-butyl-2-methylimidazolium Chloride	IM 1 Cl 1	

II.3. Propriétés de traitement du système biologique :

Les propriétés de traitement du système biologique sélectionné pour le développement de ce travail sont présentées en détail dans le tableau (II.2) ci-dessous :

Tableau(II.2) : Définition les Propriétés traitées de système biologique choisie.

	Définitions	Système biologique choisie	Figure
CL50/EC50	La concentration l'étale (CL50) c'est une concentration d'une substance qui cause 50 % de mortalité dans la population testée [16].	<p><u>Daphnia magna :</u> La daphnie magna est un microcrustacé d'eau douce de l'ordre des cladocères et est utilisée pour la détermination de la toxicité des effluents industriels depuis de nombreuses années. Cette espèce est sensible à une large gamme de contaminants et est relativement facile à conserver en laboratoire. [16]</p>	
		<p><u>vibrio fischeri :</u> La bactérie vibrio fischeri est bioluminescente et hétérotrophe. C'est une bactérie à Gram négatif trouvée dans les eaux tempérées et subtropicales. Elle vit dans les profondeurs en symbiose avec les poissons et les calmars. Elle Fournit de la lumière tandis que les nutriments et l'oxygène sont fournis par l'hôte. [17]</p>	
	La concentration efficace (CE50) qui inhibe 50 % d'une réponse biologique de type binaire (tout ou rien : mobile-immobile) [16].	<p><u>Acétylcholinestérase :</u> L'acétylcholinestérase (AChE) est une protéine exprimée dans le système nerveux et sanguin des eucaryotes supérieurs. Le principal rôle biologique de l'acétylcholinestérase est la régulation de la transmission de l'influx nerveux en assurant l'hydrolyse rapide de l'acétylcholine au niveau des synapses cholinergiques centrales et périphériques. [18]</p>	
		<p><u>Leukemia rat cell :</u> La leucémie est un cancer des tissus responsables de la formation du sang, c'est -à- dire des cellules sanguines immatures se trouvant dans la moelle osseuse. [19]</p>	

II.4.Base des données :

La base des données utilisée pour effectuer cette tâche contient **652 LIs**, nous trouvons :

09 espaces cationiques :

- Imidazolium (**IM**),
- Pyrrolidinium (**Pyr**),
- Sulfonium (**S**),
- Guanidinium(**GU**),
- Pipéridinium (**PiP**),
- Phosphonium(**P**),
- Ammonium(**N**),
- Pyrimidine (**PY**),
- Morpholinium(**Mor**).

Et **24** espaces anioniques:

- Hexafluorophosphate(**PF₆**),
- Nitrate(**NO₃**),
- Bicarbonate(**HCO₃**),
- Halide(**Cl,Br,I**),
- Trifluoromethylsulfonate(**CF₃SO₃**),
- trifluoroacétates(**CF₃COO**),
- Thiocyanate (**SCN**),
- Tétrafluoroborate(**BF₄**),
- bis (trifluoromethylsulfonyl) imide(**CF₃SO₂**)₂**N**,
- Borate(**R₁R₂R₃R₄B**),
- Alkylsulfate(**RSO₄**),
- Dicyanamide (**N(CN)₂**),
- Dialkylphosphate(**R₁R₂PO₄**),
- Tricyanomethanide(**M(CN)₃**),
- Carboxylates (**RCOO**) ,
- bis(fluorosulfonyl) imide (**(FSO₂)₂N**),
- Perchlorate(**ClO₄**),
- Nitrite (**NO₂**),
- Hexafluoroarsenate (**ASF₆**),
- bis(methylsulfonyl)imide(**([MSI]**),
- Dinitramide(**[N(NO₂)₂]**),
- Sulfonate (**RSO₃**),
- Tetrachloroaluminate (**AlCl₄**),
- 1, 1, 1, 5,5,5-hexafluoro-2,4-pentanedionate (**[(CF₃CO)₂CH]**).

- Le tableau (II.3) ci-dessous présente les structures chimiques des cations et les anions dans liquides ioniques.

Le Tableau (II.3) : Les structures chimiques des cations et les anions dans liquides ioniques.

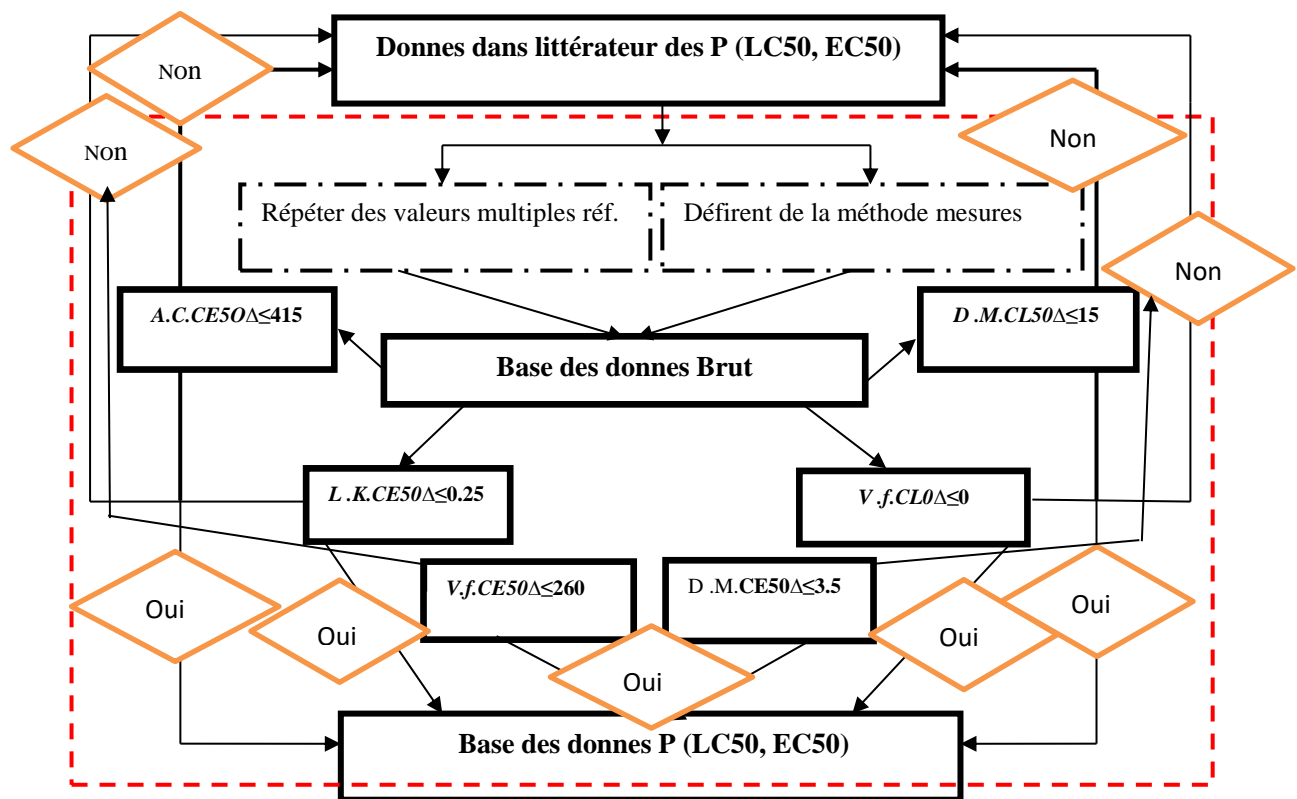
Cations				
	Pyrrolidinium	Sulfonium	Guanidinium	
	Pipéridinium	Phosphonium	Ammonium	
Imidazolium	Morpholinium	Pyrimidine		
Anions				
	Hexafluorophosphate	bis(methylsulfonyl) imide	Bicarbonate	Trifluoromethylsulfonate
	Cl^- , Br^- , I^-	CF_3COO^-		BF_4^-
	Halide	Trifluoroacétates	Dinitramide	Tétrafluoroborate
			$S^- \equiv N$	
	bis(trifluoromethylsulfonyl) imide	Sulfonate	Thiocyanate	Borate
	Alkylsulfate	Dicyanamide	Dialkylphosphate	Tricyanomethanide
	R_1COO^-		ClO_4^-	NO_3^-
	Carboxylates	bis(fluorosulfonyl) imide	Perchlorate	Nitrate
$AlCl_4^-$			NO_2^-	
Tetrachloroaluminate	Hexafluoroarsenate	1,1,1,5,5,5-hexafluoro-2,4-pentanedionate	Nitrite	

II.5. Choisir une base des données :

Une très large gamme de bases des données, sous des nombreuses formes (livres, sites web, etc.). Ces bases de données contiennent des données expérimentales et estimées pour des composés purs et complexes.

La qualité des valeurs expérimentales pour le développement de modèles est très importante pour de bons résultats. Le critère de base pour la sélection des valeurs expérimentales pour un ensemble de données est le nombre, la variété et la présence des valeurs expérimentales dans plusieurs références et doit être mesuré avec les mêmes conditions expérimentales avec une grande précision. 80% des bases de données ont été utilisées pour obtenir le modèle et les autres pour tester la validation.

- Le diagramme précédant montre les étapes de la base de données sélectionnée utilisée procédure de prédiction propriétés étudiés (CL50, CE50)



Figure(II.2) : Diagramme de choisie de base des données.

II.5.1. Propriété CL 50 :

L'étude de cette propriété, on utilise base des données contient **87** valeur expérimental de liquides ioniques tel que : 52 et 35 valeur expérimental de liquides ioniques suffisant avec système biologie : Daphnia magana et bactérie vibrio fischeri. [20] [21] [22] [23].

II.5.2. Propriété CE50 :

Contient la base des données sur **565** valeur expérimental de liquides ioniques et avec Acétylcholinestérase, Daphnia magana, Bactérie vibrio fischeri et Leukemia rat celles valeurs expérimental de liquides ioniques est 219, 42, 107,197 respectivement. [21] [26] [27] [28] [29] [30].

Tableau(II.4) : Les propriétés toxiques et les points de données des liquides ioniques.

Propriétés/ Points de données		Log LC50				Log EC50							
		D. magna		V. fischeri		Leukemia rat cell		AChE		D. magna		V. fischeri	
		N° LIs	LIs%	N° LIs	LIs%	N° LIs	LIs%	N° LIs	LIs%	N° LIs	LIs%	N° LIs	LIs%
Groupes		[0.02-3.82]		[0.54-3.98]		[0.01-3.42]		[0.01-2.50]		[0.04-9.66]		[0.02-3.23]	
Imidazolium	IM	26	50	35	100	80	40.60	96	43.83	24	57.14	66	61.68
Pyrrolidinium	Pyr	06	11.53	00	00	25	12.69	23	10.50	00	00	10	9.14
Sulfonium	S	00	00	00	00	02	1.01	00	00	00	00	01	0.93
Pipéridinium	PiP	01	1.92	00	00	16	8.12	00	00	00	00	02	1.86
Phosphonium	P	02	3.84	00	00	01	0.50	02	0.91	03	7.14	00	00
Morpholinium	Mor	00	00	00	00	09	4.56	00	00	01	2.38	02	1.86
Pyrimidine	PY	10	19.23	00	00	53	26.90	71	32.42	12	28.57	18	16.82
Guanidinium	GU	00	00	00	00	01	0.50	00	00	00	00	00	00
Ammonium	N	07	13.46	00	00	20	10.15	27	12.32	02	4.76	08	0.93
Total		52		35		197		219		42		107	

II.6.Fonction d'objectif :

La fonction d'objectif a été donnée par l'équation suivante :

$$F = \sum_{i=1}^n P_i^{Exp} - P_i^{cal}^2 \quad \text{Eq. II. 2}$$

Les fonctions Exp et Cal font référence à des valeurs expérimentales et calculées, respectivement. Bien que i représente un liquide ionique

II.6.1.Optimisation :

Nous avons testé et comparé le modèle optimal pour tester les meilleurs paramètres ; deux valeurs d'ajustement ont été calculées pour chaque paramètres :

- Le 1^{ere} coefficient de corrélation R^2 est estimée proche 1.
- La valeur de l'écart relatif moyen (AAD%) min.

II.6.2.Précision :

La précision de la méthode a été évaluée en utilisant l'écart absolu moyen (AAD), l'écart relatif moyen (AARD%) et le coefficient de corrélation (R^2) qui ont été calculés comme suit :

$$AAD = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n |p_i^{exp} - p_i^{cal}| \quad \text{Eq. (II. 3)}$$

$$\%AARD = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{p_i^{cal}}{p_i^{exp}} - 1 \right| \quad \text{Eq. (II. 4)}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n \left| \frac{p_i^{cal}}{(p_i^{ext} - p_i^{exp})} \right|^2}{\sum_{i=1}^n \left| \frac{p_i^{cal}}{(p_i^{exp} - \text{average}(p_i^{exp}))} \right|^2} \quad \text{Eq. (II. 5)}$$

II.6.3.Validation :

La validation du test est une méthode d'estimation de la performance réelle du modèle, car si tout le test est correctement identifié, il correspond exactement à l'utilisation future du modèle.

Les substances qui sont complètement inconnues du modèle sont prédites et généralement obtenus sur base :

- Sélectionnez des points pour la validation aléatoire.
- Les nombres points des validations super 20% qui obtenu max du R^2 .
- Plus par des familles intégrées aux points de validation.

II.7. Quelques études pour estimer les propriétés toxiques des liquides ioniques :

Après le rejet de la troisième génération de liquides ioniques qui ont adopté les propriétés biologiques de [Rogers et al en (2002)] en raison du nombre croissant de liquides ioniques.

La méthode QSPR a été utilisée pour estimer la toxicité de ces composés car c'était le travail principal de [Ranke et al en (2004)] les substitués méthyle et éthylène sont substitués à R1 et R2 (Imidazolium). Et avec l'anion :

[PF6], [BF4], [Br], [Cl], le Toluenosulfonate [PTSO]

Avec une méthode de modélisation linéaire.

Le tableau donne plus de détails sur quelques études antérieures pour estimer la toxicité de certain liquide ionique.

CLS	Systeme	Méthode	R ²	Parametre	N°.	ARD	Reference
0	Biologie				LIs		Page 25

	D. magna	QSAR	0.86	Pyridinium, ammonium, Imidazolium, phosphonium	16 LIs	-	[David et al. (2006)]. [20]
		QSAR	0.81	Imidazolium bromide ; Pyrimidine bromide	70 (36) LIs	0.42	[Chul et al. (2017)]. [21]
		QSAR	0.99	Imidazolium hexafluorophosphate ; pyridinium tris (trifluoromethylsulfonyl) methide	16 LIs	0.15	[Johannes et al. (2009)]. [22]
	V. fischeri	QSAR	0.93	Imidazolium chloride	35 LIs	0.17	[Li et al. (2017)]. [23]
CE50	L. rat cell	GC	0.70	Imidazolium Tétrfluoroborate ; Pyrimidine bis (trifluorométhanesulfonyl) imide	199 (197) LIs	0.47	[Chul et al. (2017)]. [21]
		GC	0.07	Imidazolium Hexafluorophosphate ; Pyrimidine Chloride ; Pyrrolidinium bis (trifluorométhanesulfonyl) imide	226 (219) LIs	0.65	[Chul et al. (2017)]. [21]
	V. fischeri	GC	0.81	Imidazolium bis (trifluorométhanesulfonyl) imide	108 (107) LIs	0.35	[Chul et al. (2017)]. [21]
		GIC	0.90	Pyrimidine; Morpholinium; Guanidinium.	68 LIs	0.69	[Mokhedem et al. (2016)]. [24]
		QSPR	0.97	Pyrrolidinium ; Morpholinium	64 LIs	0.02	[Luis et al. (2010)]. [25]
		QSAR	0.81	Imidazolium Tétrfluoroborate	29 LIs	-	[Eduardo et al. (2017)] [26]
	D. magna	QSAR	0.88	Imidazolium bromide ; Pyrimidine bromide	17 LIs	-	[Couling et al (2006)] [27]

Tableau(II.5) : Quelques études pour estimer les propriétés toxiques des liquides ioniques

II.8.Conclusion :

Avant d'intervenir dans notre travail, il est nécessaire de préparer les outils de mise en œuvre :

- Fournir les étapes de modélisation et les techniques utilisées dans notre travail.
- L'ordre de la base de données, contenant 652 composants de liquide ionique.
- Expliquer les propriétés les de l'environnement traité.
- Description du système de traitement biologique.

Chapitre III

Résultats et discussions

III.1.Introduction :

De plus en plus d'études font référence à la toxicité des liquides ioniques, sans toutefois mentionner le liquide ionique moléculaire actif responsable de la toxicité et de l'interaction avec les biomolécules. Plusieurs études ont publié une tentative de prédire l'impact de (**LI**s) sur les environnements marins terrestres.

L'objectif de ce travail est de développer un modèle mathématique basé sur des données expérimentales disponibles en fonction de la structure moléculaire, permettant d'estimer l'étude et de déterminer les caractéristiques environnementales des liquides ioniques.

III.2.Résultats :

III.2.1.Concentration l'étale(CL50) :

Les équations suivantes montrent les performances du modèle **CIG** pour la stagnation de la concentration de chaque système biologique :

- **Daphnia magna :**

$$\text{LogCL50} = A + \sum_j n_j \Delta C_j + \sum_k m_k \Delta D_k \quad \text{Eq(III. 1)}$$

- **Vibro fischeri :**

$$\text{LogCL50} = B + \sum_j n_j \Delta C_j + \sum_k m_k \Delta D_k \quad \text{Eq(III. 2)}$$

III.2.2.Concentration efficace (CE50) :

Les équations corrélation utilisées pour concentration efficace (CE50) par la méthode **CIG** pour chaque système biologique :

- **Acetylcholinesterase :**

$$\text{LogEC50} = C + \sum_j n_j \Delta C_j + \sum_k m_k \Delta D_k \quad \text{Eq(III. 3)}$$

Daphnia magna :

$$\text{LogEC50} = D + \sum_j n_j \Delta C_j + \sum_k m_k \Delta D_k \quad \text{Eq(III. 4)}$$

- **Vibro fischeri :**

$$\text{LogEC50} = E + \sum_j n_j \Delta C_j + \sum_k m_k \Delta D_k \quad \text{Eq(III. 5)}$$

- **Leukemia rat cell :**

$$\text{LogEC50} = F + \sum_j n_j \Delta C_j + \sum_k m_k \Delta D_k \quad \text{Eq (III. 6)}$$

Donc :

- **Log (LC50, EC50) :** Logarithmes de la base sur 10
- **n_j :** Le nombre de Contribution des interactions des groupes de la première classe dans molécule.
- **ΔC_j :** Contribution des interactions des groupes de la première classe dans molécule
- **m_k :** Le nombre de Contribution des interactions des groupes de la seconde classe dans molécule.
- **ΔD_k :** Contribution des interactions des groupes de la seconde classe dans molécule

Exemple N°01:

Estime **LC50** de système biologie « Daphnia Magna » pour :

[1-methyl-3-octylimidazolium tétrafluoroborate] l'aide de la méthode : **(GIC)**

Solution N°01 :

[1-methyl-3-octylimidazolium tétrafluoroborate] à la structure moléculaire :



Cette fragment représente par :

CH₃-& IM &-CH₂-, CH₃-&-CH₂, 6-CH₂-& -CH₂, IM& -BF₄⁻

L'équation Eq(III. 1) sont données la valeur réelle log LC50 =2.340 et valeur calcule

log LC50 = 2.221 ; l'erreur relative dont ce composé est : **5.34%**

Exemple N°02 :

Estime **LC50** de système biologie « Vibrio fischeri » pour :

[1-Hexyl-3-methylimidazolium bromide] l'aide de la méthode : **(GIC)**

Solution N°02 :

[1-Hexyl-3-methylimidazolium bromide] à la structure moléculaire :



Cette fragment représente par :

CH₃-& IM &-CH₂-, CH₃-&-CH₂-, 4- CH₂-& -CH₂, IM &Br⁻

L'équation Eq(III. 2) sont données la valeur réelle log LC50 = 1.730 et valeur calcule

log LC50 =1.702, l'erreur relative dont ce composé est : **1.63%**

Exemple N°03 :

Estime **EC50** de système biologique « Acetylcholinesterase » pour :

[1-Butyl-3-methylimidazoliumN-cyanocyanamide] l'aide de la méthode : **(GIC)**

Solution N°03 :

[1-Butyl-3-methylimidazoliumN-cyanocyanamide] à la structure moléculaire :



Cette fragment représente par :

CH₃-&-CH₂, CH₃-& IM &-CH₂-, -CN &-N⁺-&-CN, 2-CH₂-& -CH₂, IM & -N⁺

L'équation Eq(III. 3) sont données la valeur réelle log EC₅₀ = 1.070 et valeur calcule

log EC₅₀ = 1.062 ; l'erreur relative dont ce composé est : **0.68%**

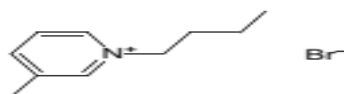
Exemple N°04:

Estime **EC50** de système biologique« Daphnia Magna » pour :

[1-butyl-3-méthylpyridinium bromide] l'aide de la méthode : **(GIC)**

Solution N°04 :

[1-butyl-3-méthylpyridinium bromide] à la structure moléculaire :



Cfragment représente par :

CH₃-&-CH₂, 2-CH₂-& -CH₂, Py-& -3-CH₃, Py-&-1-CH₂, Py-&-Br⁻

L'équationEq(III. 4)sont données la valeurréelle log EC₅₀ = 1,99 et valeur calcule

log EC₅₀ = 0.098 ; l'erreur relative dont ce composé est : **1920.08 %**

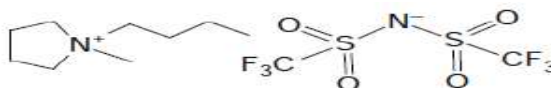
Exemple N°05 :

Estime **EC50** de système biologie « Vibrio fischeri » pour :

[N-méthyl-N-butyl-Pyrrolidinium bis ((trifluorométhyl) sulfonyl) imide] : **(GIC)**

Solution N°05:

[N-méthyl-N-butyl-Pyrrolidinium bis ((trifluorométhyl) sulfonyl) imide]



Cette fragment représente par :

CH₃- et -CH₂-, 2-CH₂-et -CH₂, CH₃- et- N⁺, N⁻ et -N⁻

-SO₂- et -N⁻ et -SO₂-, 6 >C< et - F, 2 >C< ou et >C⁻- SO₂-

L'équation Eq(III. 4) sont données la valeur réelle log EC50 = 0.454 et Valeur calcule log EC50 = 0.066 ; l'erreur relative dont ce composé est : **85.46%**

Exemple N°06:

Estime **EC50** de système biologie «Leukemia rat cell » pour :

[1-hexylpyridinium bis(trifluorométhanesulfonyl)imide] l'aide de la méthode : **(GIC)**

Solution N°06:

[1-hexylpyridinium bis(trifluorométhanesulfonyl)imide] à la structure moléculaire :



Cette fragment représente par :

CH₃-&-CH₂, 4-CH₂-& -CH₂,-SO₂- & -N⁻ et -SO₂-,

2 >C<ou>>C⁻- -SO₂-, 6 >C<& -F, Py - & -N⁻

L'équation Eq(III. 6) sont données la valeur réelle log EC50 (linière) = 0.132 et valeur calcule log EC50 (linière) = 0.579 ; l'erreur relative dont ce composé est : **337.50%**

III.3. Discussions :

III.3.1. Graphes du (CL50) :

Les résultats suivant montrent les graphes pour chaque système biologique :

- *Daphnia magna* :

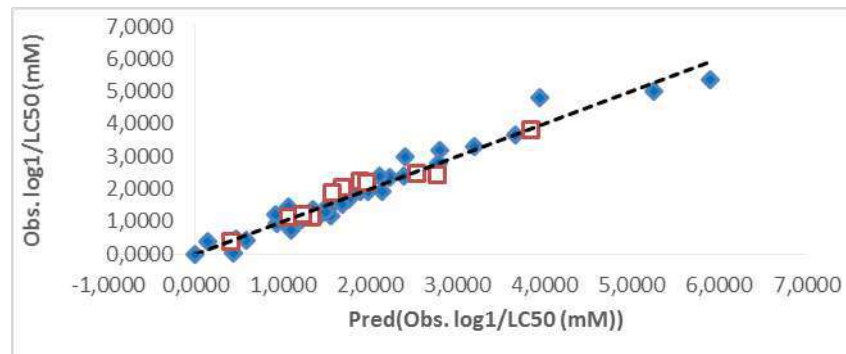


Fig (III.1) : Comparaison entre les données de LC50 prédit et expérimentale pour (◆) et l'ensemble de validation (□) du système biologique *Daphnia magna*.

- *Bactérie vibrio fischeri* :

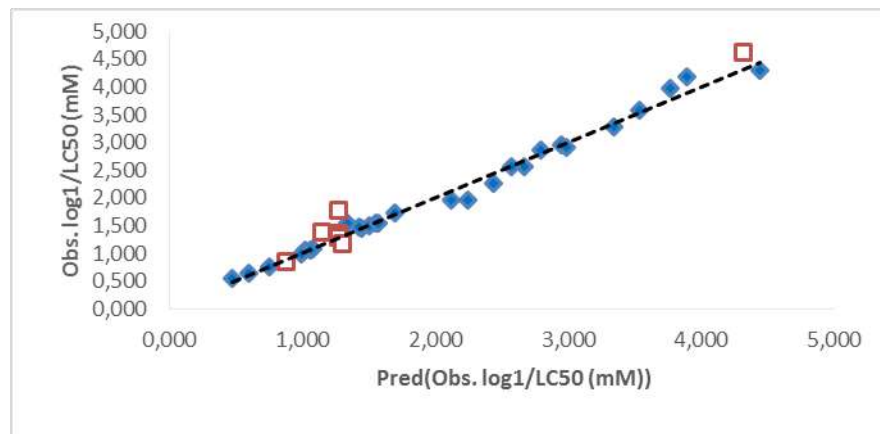


Fig (III.2) : Comparaison entre les données de LC50 prédit et expérimentale pour (◆) et l'ensemble de validation (□) du système biologique *Vibrio fischeri*.

- Les figures (III.1), (III.2) montrent la relation entre les valeurs calculées et les valeurs expérimentales, comme en témoigne le plus grand nombre de points proches de la ligne comme centre de la courbe, indiquant que l'harmonie entre valeurs d'estimation et valeurs expérimentales.

III.3.2. Graphes du (EC50) :

Pour comparer les valeurs expérimentales aux valeurs calculées, les quatre figures (III.3), (III.4), (III.5), (III.6) respectivement montrent la relation entre les valeurs calculées et les valeurs expérimentales de la propriété (EC50). Dans un premier temps, nous observons la convergence des valeurs calculées et expérimentales au centre de la courbe. Nous constatons que :

- 12 valeurs d'une erreur relative de 20% ou 5,47% du nombre total de bases de données EC50. de système biologie *Acetylcholinesterase*
- Les valeurs des diagrammes d'erreur 05 et 07 sont estimées à 20% ou 0,37% et 0,49% du nombre total de bases de données biologiques CE50 : *Daphnia magna* et bactérie *Vibrio fischeri*.
- 11 valeurs d'une erreur relative de 20% ou 0,77% du nombre total de bases de données EC50 de système biologie *Leukemia rat cell*.

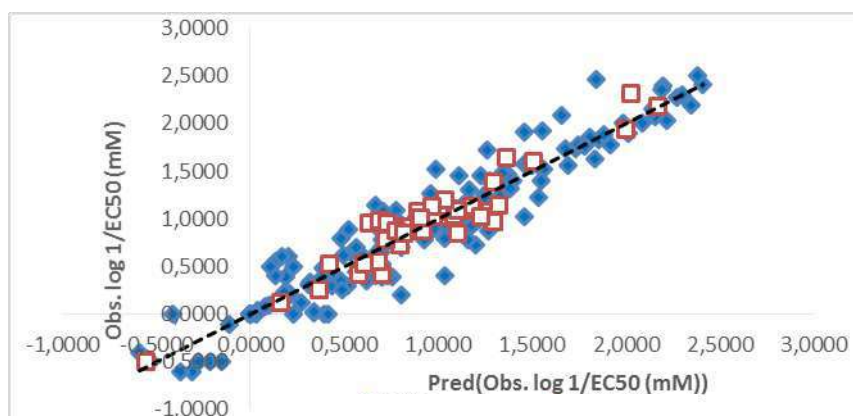


▪ Acetylcholinesterase :

Fig (III.3) : Comparaison entre les données de EC50 prédit et expérimentale pour ( et l'ensemble de validation () du système biologie *Acetylcholinesterase*.

- *Daphnia magna* :

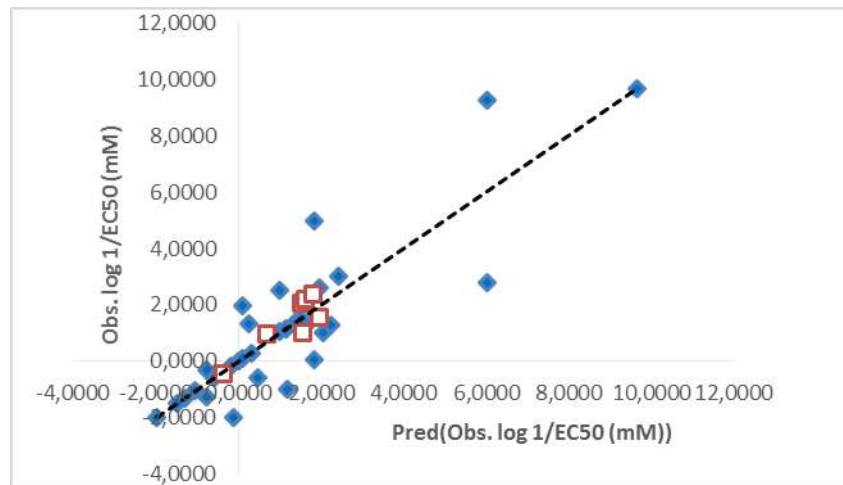


Fig (III.4) : Comparaison entre les données de EC50 prédit et expérimentale pour (\blacklozenge) et l'ensemble de validation (\square) du système biologique *Daphnia magna*.

- *Bactérie Vibrio fischeri* :

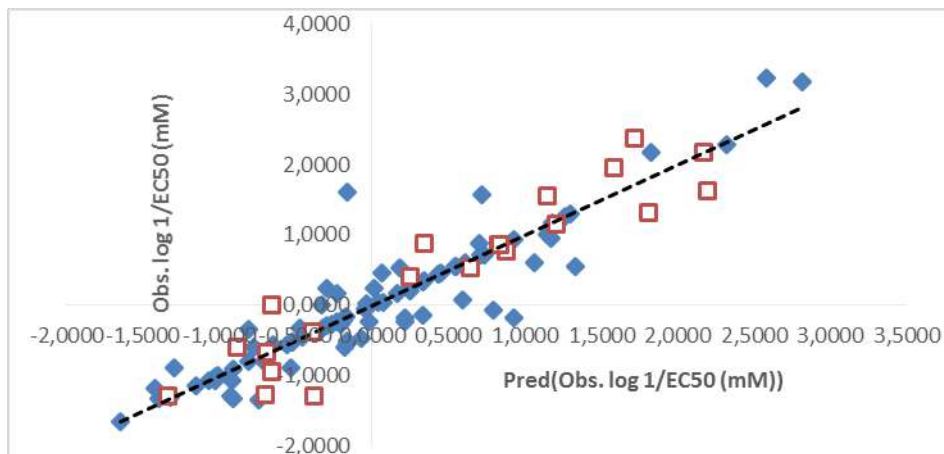


Figure (III.5) : Comparaison entre les données de EC50 prédit et expérimentale pour (\blacklozenge) et l'ensemble de validation (\square) du système biologique *Vibrio fischeri*.

▪ Leukemia rat cell :

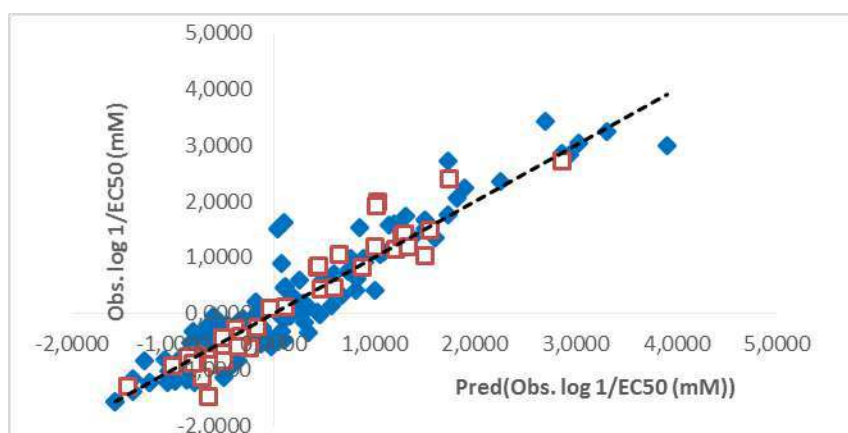


Figure (III.6) : Comparaison entre les données de EC50 prédit et expérimentale pour (◆) et l'ensemble de validation (□) du système biologique Leukemia rat cell.

Pour analyser les propriétés en profondeur, le tableau (III.1) présente les étapes à suivre pour estimer les statistiques.

Tableau (III.1) : Les résultats de modèles statistiques proposé de méthode (GIC).

propriétés /Système biologique		LogLC50		LogEC50			
		D. magna	V. fischeri	AChE	Leukemia rat cell	D. magna	V. fischeri
Activation	R ²	0.95	0.97	0.90	0.89	0.76	0.87
	AARD%	0.956	0.669	2.375	27.065	110.584	54.120
	AAD	1.150	00	00	0.922	00	1.099
	N° LIs	41	28	176	157	34	86
Validation	R ²	0.95	0.98	0.90	0.91	0.77	0.87
	AARD%	4.314	8.960	0.945	16.575	13.366	7.402
	AAD	0.680	1.007	0.674	0.717	0.938	0.046
	N° LIs	11	07	43	40	08	21
Total	R ²	0.95	0.97	0.90	0.89	0.76	0.85
	AARD%	8.227	2.328	2.095	17.725	92.066	42.045
	AAD	0.6802	1.001	0.675	3.112	0.938	1.052
	N° LIs	52	35	219	197	42	107

Tableau (III.2) : Les résultats de l'erreur relative proposé de méthode (GIC)

Groupe / Propriétés Traité		Log LC50				Log EC50							
		D. magna		V. fischeri		Leukemia rat cell		AChE		D. magna		V. fischeri	
		N° LI	AARD %	N° LI	AARD %	N° LI	AARD %	N° LI	AARD %	N° LI	AARD %	N° LI	AARD %
Imidazolium	IM	26	6.002	35	2.327	80	16.372	96	2.990	24	12.234	66	73.136
Pyrrolidinium	Pyr	06	4.250	00	00	25	126.654	23	7.362	00	00	10	25.425
Sulfonium	S	00	00	00	00	02	132.527	00	00	00	00	01	1.243
Pipéridinium	PiP	01	3.333	00	00	16	7.746	00	00	00	00	02	4.329
Phosphonium	P	02	10.782	00	00	01	3.330	02	1.110	03	11.328	00	00
Morpholinium	Mor	00	00	00	00	09	11.515	00	00	01	1743.137	02	11.413
Pyrimidine	PY	10	1.548	00	00	53	19.574	71	17.530	12	154.939	18	3.447
Guanidinium	GU	00	00	00	00	01	2.331	00	00	00	00	00	00
Ammonium	N	07	25.192	00	00	27	2.217	27	17.492	02	50	08	9.174

Le tableau (III.2) montre que la plus forte proportion de liquides ioniques est constituée de liquides à base de pyrimidine et d'imidazolium, qui contiennent une erreur relative inférieure à l'erreur relative de la modélisation, ce qui indique que l'augmentation de l'erreur relative due aux anomalies de la base de données.

Tableau(III.3) : Comparaison du LC50 et EC50 proposés dans ce travail avec les Certaines études pour estimer des propriétés toxique de liquide ionique.

Modelé		R ²	ARD	No. IIs	R ²	ARD	No. IIs	Modelé	
LC50	D. magna	QSAR	0.81	0.42	70 (36) LI s	0.95	0.68	52 LI s	GIC
	V. fischeri	QSAR	0.93	1.15	35 LI s	0.97	1.00	35 LI s	
EC50	Leukemia rat cell	GC	0.70	0.47	199 (197) LI s	0.89	3.11	199 (197) LI s	GIC
	AChE	GC	0.07	0.65	226 (219) LI s	0.90	0.67	226 (219) LI s	
	D. magna	QSAR	0.88	-	17 LI s	0.76	0.93	64 (42) LI s	
	V. fischeri	GC	0.69	0.35	108 (107) LI s	0.85	1.05	108 (107) LI s	
Autre travail					Notre travail				

III.4. Conclusions :

Les analyses statistiques de valeurs prédéfinies (propriétés)_{préd.} (propriétés)_{exp} et l'interprétation des graphiques permettent de constater que les valeurs de résidus varient et que les valeurs situées au-delà de l'intervalle de confiance représentent des anomalies faisant référence à des molécules non apparentées.

La qualité du modèle dépend de nombreuses valeurs extrêmes et de nombreuses variables (paramètres). La valeur de R² nous indique que le degré de corrélation des propriétés avec les paramètres structurels de différents blocs est très petit, la base de données est très étroite et ne spécifie pas qu'un bon modèle correspond à la prédiction des propriétés.

| *Conclusion générale*

Conclusion général

Le travail réalisé dans ce mémoire avait pour objectif de descriptions de méthode qui permettent la prédiction des propriétés toxique des composés de type liquide ionique.

L'approche choisie la contribution des interactions de groupes a offert une bonne représentation à la relation structure-propriété, cette approche a basé principalement sur le type de la liaison dans le choix des groupes structurels, ainsi que les liquides ioniques, ce qui montre que cette approche inclut un aspect théorique.

Les données expérimentales totales de deux propriétés (2) qui ont été structurées sous forme d'une base de données, ces données ont été employées pour l'obtention des interactions de groupes.

Les résultats avancés ont montré une bonne représentation des relations entre les groupes structurels et les propriétés.

La comparaison entre les performances des modèles proposés dans ce travail et certaines études visant à estimer les propriétés toxique de liquide ionique a montré que les résultats obtenus étaient excellents.

Pour améliorer la manière dont ce travail est développé, nous allons développer la base de données, augmenter le nombre de valeurs expérimentales de propriétés et ajouter d'autres propriétés pour étendre l'application de cette méthode.

Références bibliographiques

- [1] Wasserscheid, P.; Welton, T. *Ionic Liquids in Synthesis*; Wiley-VCH: Weinheim, 2003.
- [2] Thibaut, G. *Les Liquides Ioniques, Leur utilisation et leur rôle comme solvants de Réaction catalytique*. Catalyse. Université Claude Bernard - Lyon I, 2007. Français.
- [3] Welton, T., Coord, C. *Structure – Based Design of Artificial Metalloenzymes and Beyond*, 248, 2459-2477, 2004.
- [4] Bouchardy, L. *Elaboration de Liquides Ioniques (chiraux) réversibles et application en Catalyse organique et en glycochimie. Carbenes n-heterocycliques chiraux : Synthèse et Application dans la réaction d'addition conjuguées* ; L'université paris-Saclay ; Soutenues le 10 Novembre 2016.
- [5] Wilkes, J., Zaworotko, S. *Physical Properties of Ionic Liquids: Databases and Evaluation*, 965-967, 1992.
- [6] Th. Gutel, *les Liquides Ioniques leur utilisation et leur rôle Comme solvants de réaction catalytique*, université claudesbernard – Lyon I, Soutenue le 12 Octobre, 2007.
- [7] Vashchuk, A., Fainleib, O., Starostenko, and D. *Application of ionic liquids in thermosetting polymers: Epoxy and Cyanate ester resins*, 899 -901, 2018.
- [8] Tavares, A., Rodriguez, O., Maacedo, E. *Generation of Ionic Liquids applied to enzymatic Catalysis*, 2013.
- [9] Hough, Y and Jinghong li. *Ionique Liquide in surface electrochemistry*, *Physical Chemical Physics* , Vol.12, PP.1685-1697, 2010.
- [10] <https://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/aldrich/23-03-2019>
- [11] Leardi, R., *Chemometr. Instrumental Methods for the Analysis and Identification of Bioactive Molecules*, 15, 559-569, 2001.
- [12] Marrero M.J ., And Pardillo. *Estimation of pure compounds properties using group interaction contribution* . 45-615-621, 1999.
- [13] Bachiraoun. 'Liquides Ioniques Structure et Dynamique'. Thèse de Doctorat, Université D'orléans, 2010.
- [14] Mokadem ,K ., Korichi ,M. *Group-Interaction Contribution approach for prediction of electrochemical properties of ionic liquids*, *Computer aided chemical engineering*, 2016, 38, 451-456. <https://dx.doi.org/10.1016/b978-0-444-63428-3.50080-1>
- [15] Marrero-Morejón, J., Pardillo-Fontdevila, E. *Estimation of pure compound properties using Group-Interaction Contributions*, *AIChE J.*, 45, 615-621, 1999.
- [16] Centre d'expertise en analyse environnementale du québec. *Détermination de la toxicité L'étale c150 48h Daphnia Magna*. Ma. 500 – D.Mag. 1.1, Rév. 2, Ministère du Développement

durable, De l'Environnement et de la Lutte contre les changements Climatiques du Québec, 18, 2016.

[17] Djouder, H. Efficacité d'un procédé membranaire pour le traitement des Eaux Usées, Mémoire du Master, Université du Québec, 16, 2011.

[18] Laouar, I. Etude des interactions Enzyme-Ligand. Cas des inhibiteurs de L'acétylcholinestéras, Mémoire du Master, Université D'EL-Oued, P 32-33, 2014.

[19] <https://www.maxisciences.com> 25-02-2019.

[20] David, J., Couling, A., Randall, J., Bernot, b., Kathryn, M., Docherty, B., JaNeille, K., Dixon and Edward, J. Maginn Assessing the factors responsible for ionic liquid toxicity to aquatic organisms via quantitative structure–property relationship modeling 2005.

[21] Chul-Woong, C., Stefan, S., Yeung-Sang, Y. Comprehensive approach for predicting toxicological effects of ionic liquids on several Biological systems using unified descriptors, 425. May 22, 2017.

[22] Johannes, R., Alaa, O. Ping Fan and Anja Muller-Explaining Ionic Liquid Water Solubility in Terms of Cation and Anion Hydrophobicity, 2009.

[23] Li-ya, L; Ying-jie, Z; Jie-Jie, C; Zhong-Hua. Tong- Toxicity of Selected Imidazolium-based Ionic Liquids on *Caenorhabditis elegans*, A Quantitative Structure-Activity Relationship Study 2017.

[24] Mokadem, K. Approche multi-échelles de la conception des liquides ioniques, application aux problèmes industriels, Thèse doctorat, Université Kasdi Merbah, 2017.

[25] Luis, This is the author's final version of the work, as accepted for publication following peer review but without the publisher's layout or pagination. The definitive version is available at, 2010.

[26] Eduardo, P., Laura, L., María, G ; Escudero., Esther, S., Carlos, E., Lafuente And Beatriz Gine ; Toxicological Study of some ionic liquids ; Green process synth; 7, 287-295, 2018.

[27] Couling, D., Bernot, V., Docherty, K., Dixon, M. Assessing the Factors responsible for ionic liquid toxicity to aquatic organisms via Quantitative Structure–Property Relationship Modeling. Green Chemistry 8-92-90, 2006.

[28] Rogers, R., D & Seddon. Ionic Liquids – Solvents of the future? Science 302(5646), 792–793, 2003.

[29] Latała, A., Nędzi, M & Stepnowski, P. Toxicity of imidazolium and pyridinium based on Ionic Liquids towards algae, *Chlorella Vulgaris*, *Oocystes Submarina* (Green Algae) and *Cyclotella Meneghiniana*, *Skeletonema Marinoi* (Diatoms). Green Chemistry 11, 580–588, 2009.

[30] Plechkova, N. V. & Seddon, K. R. Application of Ionic Liquids in the Chemical industry. Chemical Society Reviews 37,123–150, 2008.

| *Annexes*

Tableau 01 : Formules structurales des (valeurs experimental, predecete et eueur) par méthode de contribution des interactions des groupes pour propreté LC50 de système biologique : Diaphane magna :

Liquide ionique	Reference
1-butyl-1-methylpyrrolidinium Methylsulphate	[20]
1-hexyl-4-piperidinopyridinium bromide	[20]
Methoxycholine bis ((trifluoromethyl) sulfonyl) imide	[20]
3-methyl-1-octylpyridinium bromide	[20]
Triethylmethylammonium Methylsulphate	[20]
1-Decyl-3-methylimidazolium bromide	[20]
1-Dodecy-3-methylimidazolium chloride	[20]
1-Hexadecyl-3-methylimidazolium chloride	[20]
1-Octadecyl-3-methylimidazolium chloride	[20]
1-Ethyl-3-methylimidazolium bromide	[20]
3-(2-methylethyl)-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[20]
3-(2-methylethyl)-3-methylimidazolium N-cyanocyanamide	[20]
1-(3-hydroxypropyl)-3-methylimidazolium chloride	[20]
1-Butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate	[20]
1-Butyl-3-methylimidazolium bis ((trifluoromethyl) sulfonyl) imide	[20]
1-butyl-2,3-dimethylimidazolium bromide	[20]
1-Hexyl-3-methylimidazolium bromide	[20]
1-Hexyl-3-methylimidazolium chloride	[20]
1-hexyl-2,3-dimethylimidazolium bromide	[20]
1-methyl-3-octylimidazolium tétrafluoroborate	[20]
Methoxycholine Sulfonate	[20]
Methoxycholine Methylsulphate	[21]
Butyl triméthylammonium Sulfonate	[21]
Tributylethylphosphonium Diethyl phosphate	[21]
1-butylpyridinium bis ((trifluoromethyl) sulfonyl) imide	[21]
1-butylpyridinium chloride	[21]
1-Butyl-3-methylpyridinium bromide	[21]
1-Butyl-3,5-dimethylpyridinium bromide	[21]
1-hexylpyridinium bromide	[21]
1-hexyl-3-methylpyridinium bromide	[21]
1-octylpyridinium bromide	[21]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium bromide	[21]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethylsulfonyl) imide	[21]
1-hexyl-1-methylpyrrolidinium bromide	[21]
1-butyl-1-methylpiperidinium bromide	[21]

1-n-Hexyl-3-methyl-4-dimethylaminopyridinium bromide	[22]
1-methyl-1-octylpyrrolidinium bromide	[22]
1-Butyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[22]
Butyl triméthylammonium bis ((trifluorométhyl) sulfonyl) imide	[22]
Tetrabutylammonium bromide	[22]
1-butylpyridinium bromide	[22]
1-methyl-3-octylimidazolium bromide	[22]
1-Dodecyl-3-methylimidazolium bromide	[22]
1-Hexyl-3-methylimidazolium bromide	[22]
1-methyl-3-(triméthylsilyl) methyl-imidazolium bromide	[22]
3-methyl-1-octylpyridinium bromide	[22]
Tetrabutylphosphonium bromide	[22]
1-hexyl-2,3-dimethylimidazolium bromide	[22]
1-Hexyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[22]
1-Butyl-3-methylimidazolium chloride	[22]
1-butyl-1-méthylpyrrolidinium Méthylsulphate	[22]
1-Butyl-3-methylimidazolium bromide	[22]

Tableau 02 : Formules structurales des (valeurs expérimental, prédicte et eueur) par méthode contribution des interactions des groupes pour propriété LC50 de système biologique : V.Fischeri

Liquide ionique	Reference
1-Ethyl-3-methylimidazolium bromide	[23]
1-Hexyl-3-methylimidazolium bromide	[23]
1-Octyl-3-methylimidazolium bromide	[23]
1-Dodecyl-3-methylimidazolium bromide	[23]
1-Tetradecyl-3-methylimidazolium bromide	[23]
1-Hexadecyl-3-methylimidazolium bromide	[23]
1-Propenyl-3-methylimidazolium chloride	[23]
1-Butyl-3-methylimidazolium chloride	[23]
1-Octyl-3-methylimidazolium chloride	[23]
1-Decyl-3-methylimidazolium chloride	[23]
1-Tetradecyl-3-methylimidazolium chloride	[23]
1-Butyl-3-methylimidazolium acétate	[23]

1-Butyl-3-methylimidazolium dibutyl phosphate	[23]
1-Butyl-3-methylimidazolium iodide	[23]
1-Butyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[23]
1-Butyl-3-methylimidazolium dicyanamide	[23]
1-Butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[23]
1-Butyl-3-methylimidazolium tosylate	[23]
1-Butyl-3-methylimidazolium Thiocyanate	[23]
1-Butyl-3-methylimidazolium trifluoroacétates	[23]
1-Pentyl-3-methylimidazolium bromide	[23]
1-Ethyl-3-methylimidazolium chloride	[23]
1-Hexyl-3-methylimidazolium chloride	[23]
1-Decyl-3-methylimidazolium bromide	[23]
1-Butyl-2-methyl-3-methyl-imidazolium bromide	[23]
1-Octyl-2-methyl-3-methyl-imidazolium bromide	[23]
1-Decyl-2-methyl-3-methyl-imidazolium bromide	[23]
1-Dodecyl-2-methyl-3-methyl-imidazolium bromide	[23]
1-Propenyl-3-methylimidazolium bromide	[23]
1-Butyl-3-methylimidazolium perchlorate	[23]
1-Butyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethylsulfonyl) imide	[23]
1-Butyl-3-methylimidazolium nitrate	[23]
1-Hexadecyl-3-methylimidazolium chloride	[23]
1-Pentyl-3-methylimidazolium chloride	[23]
1-Butyl-3-methylimidazolium bromide	[23]

Tableau 03 : Formules structurales des (valeurs expérimental, prédécrite et eueur) par méthode contribution des interactions des groupes pour propriété EC50 de système biologique : *D. magna*

Liquide ionique	Reference
1-octadecyle-3-méthylimidazolium chloride monohydrate	[26]
1-Butyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethyl sulfonyl) imide	[26]

1-benzyl-3-methylimidazole tétrafluoroborate	[26]
1.2-dimethyl-3-propylimidazole bis-(trifluoromethylsulfonyl)-imide	[26]
trihexyltetradecylphosphoniumbis-(trifluoromethylsulfonyl)-amide	[26]
1-methyl-propoctylammonium bis (trifluoromethyl sulfonyl) imide	[26]
1-octyl-3-méthylimidazolium bromide	[26]
1-Décyl-3-méthylimidazolium bromide	[26]
1-dodecyl-3-méthylimidazolium bromide	[26]
1-Hexadécyle-3-méthylimidazolium chloride monohydrate	[26]
1-n-octyl-3-methylimidazolium bromide	[26]
1-ethyl-1butylmorpholinium bromide	[26]
1-butyl-pyridinium chloride	[27]
1-butylxymethyl-3-buthylimidazole bis-(trifluoromethylsulfonyl)-imide	[27]
1-Butyl-2,5-dihydroxybenzoate bis (trifluoromethyl sulfonyl) imide	[27]
1-butyl-pyridinium chloride bis (trifluoromethyl sulfonyl) imide	[27]
1-Butyl-3-methylimidazolium bromide	[27]
1-Hexyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[27]
1-Octyl-3-methylimidazolium chloride	[27]
1-Hexyl-3-methylimidazolium chloride	[27]
1-Butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate	[27]
1-n-octyl-3-methylpyridinium bromide	[28]
1-n-hexyl-3-methylpyridinium bromide	[28]
1-n-butyl-3-methylpyridinium bromide	[28]
1-n-hexyl-3-methylimidazolium bromide	[28]
1-n-hexyl-4-piperidino pyridinium bromide	[28]
1-n-hexyl-4-dimethylamino pyridinium bromide	[28]
1-n-hexyl-3-methyl-4-dimethylamino pyridinium bromide	[28]
1-n-hexylpyridinium bromide	[28]
1-n-butyl-3-methylimidazolium chloride	[29]
1-n-butyl-3-methylimidazolium bromide	[29]
1-n-butyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[29]
1-n-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate	[29]
Tetrabutyl ammonium bromide	[29]
Tetrabutyl phosphonium bromide	[30]
1-methyl-3-octyloxymethylimidazole tétrafluoroborate	[30]
1-methyl-3-octyloxymethylimidazole bis-(trifluoromethylsulfonyl)-imide	[30]
1-butyl-3-méthylpyridinium bis (trifluoromethyl sulfonyl) imide	[30]
1-n-butyl-3,5-dimethylpyridinium bromide	[30]
1-n-hexyl-2,3-dimethylimidazolium bromide	[30]
1-dodecyl-3-méthylimidazolium chloride	[30]

Tableau 04 : Formules structurales des (valeursexpremental, predecete et eureur) par méthode contribution des interactions des groupes pour propreté EC50 de système biologie : V.Fischeri

Liquide ionique	Reference
4-(ethoxymethyl)-4-methylmorpholinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
Bis (2-methoxyethyl) ammonium Sulfamate	[26]
Ethyle (2-methoxyethyl) dimethylammonium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
butylethyldimethylammonium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
(Ethoxycarbonylmethyl) ethyldimethylammonium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-butyl-1-methylpiperidinium Bromide	[26]
butylethyldimethylammonium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
Hexyltriethylammonium Bromide	[26]
1-butyl-3-methylimidazolium Octylsulphate	[26]
1-butyl-1-methylpiperidinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-(3-hydroxypropyl) pyridinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-butylpyridinium N-cyanocyanamide	[26]
1-butyl-2-methylimidazolium N-cyanocyanamide	[26]
1-butyl-4-methylimidazolium Tétrafluoroborate	[26]
1-butyl-4-(dimethylamino) pyridinium Chloride	[26]
1-butyl-3-methylimidazolium Tétrafluoroborate	[26]
1-hexyl-4-methylpyridinium Bromide	[26]
tetramethylguanidium-cellulose acétate propionate	[26]
1-(2-ethoxy-2-oxoethyl)-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-(2-ethoxy-2-oxoethyl)-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-(2-ethoxy-2-oxoethyl)-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium Chloride	[26]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-hexyl-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
tetramethylguanidium-Trifluoromethanesulfonate	[26]
1-(3-hydroxypropyl)-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-butyl-2-methylimidazolium Bromide	[26]
1-butylpyridinium Chloride	[26]
1-decyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate Chloride	[26]
1-butyl-3-methylimidazolium Chloride	[26]
1-hexyl-3-methylimidazolium	[26]
1-hexyl-3-methylimidazolium Bromide	[26]
1-heptyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[26]
1-ethyl-3-butylimidazolium tétrafluoroborate	[26]
1-butyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate	[26]
1-methyl-3-octylimidazolium tétrafluoroborate	[26]
pentyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[26]

1-(3-methoxypropyl)-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium Trifluoridotris (pentafluoroethyl) phosphate	[26]
Trifluoromethanesulfonate	[26]
butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[26]
tetramethylguanidium- Acétate	[26]
Triethylsulfonium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-ethyl-3-methylimidazolium perfluoroalkylphosphinate	[26]
cellulose acetate propionate	[26]
Trifluoromethanesulfonate	[26]
Trifluoroacétates	[26]
méthylimidazolium Acetate	[26]
méthylimidazolium Trifluoroacétates	[26]
Trifluoromethanesulfonate	[26]
méthylimidazolium cellulose acetate propionate	[26]
méthylimidazolium hydroacetate	[26]
butyl-3-methylimidazolium Acetate	[26]
butyl-3-methylimidazolium cellulose acetate propionate	[26]
butyl-3-methylimidazolium hydroacetate	[26]
butyl-3-methylimidazolium Trifluoroacetate	[26]
1-decyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[26]
1-(cyan méthyl)-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-(ethoxyméthyl)-3-methylimidazoliumbis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-(ethoxyméthyl)-3-methylimidazoliumbis Chloride	[26]
1-ethyl-3-methylimidazolium-	[26]
1-ethyl-3-methylimidazolium Chloride	[26]
1-ethyl-3-methylimidazolium Thiocyanate	[26]
1-ethyl-3-methylimidazolium Tetracyanidoboranuide	[26]
3-(2-méthylethyl)-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
3-(2-méthylethyl)-3-methylimidazolium Chloride	[26]
1-(2-ethoxyéthyl)-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-(2-hydroxyéthyl)-3-methylimidazolium Iodide	[26]
1-(2-hydroxyéthyl)-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-(3-methoxypropyl)-3-methylimidazolium Chloride	[26]
1-(3-hydroxypropyl)-3-methylimidazolium Bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[26]
1-butyl-3-methylimidazolium 4-méthylbenzenesulfonate	[26]
1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[26]
1-butyl-3-methylimidazolium Bromide	[26]
1-butyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-butyl-3-methylimidazolium Iodide	[26]
1-hexyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[26]
1-hexyl-3-methylimidazolium Chloride	[26]

1-hexyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-hexyl-2,3-dimethylimidazolium Chloride	[26]
1-methyl-3-octylimidazolium Hexafluorophosphate	[26]
1-methyl-3-octylimidazolium Chloride	[26]
1-methyl-3-nonylimidazolium tétrafluoroborate	[26]
Melamine Acetate	[26]
Melamine Trifluoroacetate	[26]
4-butyl-4-methylmorpholinium Bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-(2-hydroxyethyl)-3-methylimidazolium Acetate	[26]
1-butyl-4-(dimethylamino) pyridinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-hexyl-4-methylpyridinium Chloride	[26]
4-(dimethylamino)-1-hexylpyridinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-ethyl-3-hexylimidazolium Tétrafluoroborate	[26]
1-methyl-3-octylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[26]
1-methyl-3-octylimidazolium Chloride	[26]
1-methyl-3-octylimidazolium Bromide	[26]
1-hexyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate	[26]
1-methyl-3-propylimidazoliumTétrafluoroborate	[26]
1-(2-ethoxyethyl)-3-methylimidazolium Bromide	[26]
1-ethyl-3-methylimidazolium Methylsulphate	[26]
1-butyl-3-methylimidazolium N-cyanocyanamide	[26]
1-butylpyridinium Bromide	[26]
utyl-3,5-dimethylimidazolium N-cyanocyanamide	[26]
utyl-3,5-dimethylimidazolium Bromide	[26]
1-hexyl-1-methylpyrrolidinium Chloride	[26]
1-octylpyridinium Chloride	[26]
Imidazolium Acetate	[26]

Tableau 05 : Formules structurales des (valeurs experimental, predecete et eueur) par méthode contribution des interactions des groupes pour propreté EC50 de systbiologie : Lekumia rat cell

Liquide ionoque	Reference
Benzyldecyldimethylammonium Chloride	[21]
1-methyl-3-(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctyl)imidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-methyl-3-propylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
Diethylmethylsulfonium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium N-cyanocyanamide	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium Trifluoridotris (pentafluoroethyl) phosphate	[21]
1-butylpyridinium Hexafluorophosphate	[21]
4-(3-hydroxypropyl)-4-methylmorpholinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium tétrafluoroborate	[21]
1-(2-methoxyethyl)-1-methylpiperidinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-octylquinolinium tétrafluoroborate	[21]

1-octylquinolinium Bromide	[21]
1-ethyl-3-butylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-hexylpyridinium Hexafluorophosphate	[21]
1-(2-ethoxyethyl)-3-methylimidazolium Bromide	[21]
(Ethoxycarbonylmethyl) ethyldimethylammonium Trifluoridotris (pentafluoroethyl) phosphate	[21]
1-(2-hydroxyethyl) pyridinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-methyl-1-octylpyrrolidinium Chloride	[21]
Triethylsulfonium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-(3-methoxypropyl)-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Thiocyanate	[21]
1-(cyanomethyl)-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-hexyl-2,3-dimethylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-(ethoxymethyl)-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Octylsulphate	[21]
1-butyl-4-methylimidazolium Chloride	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Trifluoridotris (pentafluoroethyl) phosphate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Bromide	[21]
4-(dimethylamino)-1-methylpyridinium Iodide	[21]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium Trifluoridotris (pentafluoroethyl) phosphate	[21]
1-(2-ethoxy-2-oxoethyl)-1-methylpyrrolidinium Trifluoridotris (pentafluoroethyl) phosphate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium O-2-(2-methoxyethoxy) éthyles sulfate	[21]
1-hexyl-1-methylpyrrolidinium Chloride	[21]
1-decyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-methyl-3-tetradecylimidazolium imidazolium Chloride	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium perfluoroalkylphosphinate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Acetate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Methylsulphate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Octylsulphate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Trifluoroacetate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Hydrogen sulfate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-(2-ethoxyethyl)-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-(2-hydroxyethyl)-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Methylsulphate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Hexafluoroantimo nate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Iodide	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-heptyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-methyl-3-octylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-methyl-3-nonylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-methyl-3-nonylimidazolium Chloride	[21]

1-ethyl-3-butylimidazolium Trifluoroacetate	[21]
4-(ethoxymethyl)-4-methylmorpholinium Chloride	[21]
4-(2-methoxyethyl)-4-methylmorpholinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
4-(2-hydroxyethyl)-4-methylmorpholinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
(Cyanomethyl) ethyldimethylammonium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
(Ethoxycarbonylmethyl) ethyldimethylammonium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
Ethyl (2-methoxyethyl) dimethylammonium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
Ethyl (2-methoxyethyl) dimethylammonium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
butylethyldimethylammonium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
Tetrabutylammonium Bromide	[21]
Tetrabutylphosphonium Bromide	[21]
1-(cyanomethyl)-1-methylpiperidinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-(ethoxymethyl)-1-methylpiperidinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-(2-hydroxyethyl)-1-methylpiperidinium Iodide	[21]
1-(3-methoxypropyl)-1-methylpiperidinium Chloride	[21]
1-(cyanomethyl) pyridinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-(ethoxymethyl) pyridinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-ethylpyridinium Chloride	[21]
1-(2-ethoxyethyl) pyridinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-propylpyridinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-(3-hydroxypropyl) pyridinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-butylpyridinium Methylsulphate	[21]
1-butyl-2-methylimidazolium N-cyanocyanamide	[21]
1-butyl-2-methylimidazolium Chloride	[21]
1-butyl-3,4-dimethylimidazolium Chloride	[21]
1-butyl-3,5-dimethylimidazolium Chloride	[21]
1-butyl-4-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-pentylpyridinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-hexylpyridinium bis (trifluoromethanesulfonate) imide	[21]
1-hexylpyridinium Chloride	[21]
1-octylpyridinium Chloride	[21]
4-methyl-1-octylpyridinium tétrafluoroborate	[21]
1-(2-ethoxy-2-oxoethyl)-1-methylpyrrolidinium Bromide	[21]
1-(ethoxymethyl)-1-methylpyrrolidinium Chloride	[21]
1-(2-hydroxyethyl)-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-(3-hydroxypropyl)-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium N-cyanocyanamide	[21]
1,1- dihexylpyrrolidinium tétrafluoroborate	[21]
1-decyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-decyl-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-octadecyl-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-methyl-3-(phenylmethyl) imidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium O-2-(2-methoxyethoxy) ethyl sulfate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium 4-methylbenzenesulfonate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Tetracyanidoboranuide	[21]

1-ethyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium N-cyanocyanamide	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Thiocynate	[21]
1-(2-hydroxyethyl)-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Trifluoridotris (pentafluoroethyl) phosphate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Methylsulphate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium 4-methylbenzenesulfonate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-heptyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-methyl-3-octylimidazolium Chloride	[21]
1-ethyl-3-butylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[21]
4-(ethoxymethyl)-4-methylmorpholinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
4-ethyl-4-methylmorpholinium 4-methylbenzenesulfonate	[21]
4-(2-ethoxyethyl)-4-methylmorpholinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
4-(3-methoxypropyl)-4-methylmorpholinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
Benzyltetradecyldimethylammonium Chloride	[21]
(Ethoxycarbonylmethyl) ethyldimethylammonium Bromide	[21]
(Ethoxymethyl) ethyldimethylammonium Chloride	[21]
(2-ethoxyethyl) ethyldimethylammonium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-(cyanomethyl)-1-methylpiperidinium Chloride	[21]
1-(2-ethoxyethyl)-1-methylpiperidinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-(2-hydroxyethyl)-1-methylpiperidinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-butyl-1-methylpiperidinium Bromide	[21]
1-(ethoxymethyl) pyridinium Chloride	[21]
4-(dimethylamino)-1-ethylpyridinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-(2-methoxyethyl) pyridinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-(2-ethoxyethyl) pyridinium Bromide	[21]
1-(2-hydroxyethyl) pyridinium Iodide	[21]
1-(3-methoxypropyl) pyridinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-butylpyridinium tétrafluoroborate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-butyl-3,4-dimethylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-butyl-3,5-dimethylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-butyl-4-methylimidazolium Tetracyanidoboranuide	[21]
1-pentylpyridinium Bromide	[21]
1-hexylpyridinium trifluoromethanesulfonate	[21]
1-hexyl-3-methylpyridinium Chloride	[21]
1-hexyl-4-methylpyridinium Chloride	[21]
3-methyl-1-octylpyridinium Chloride	[21]
1-(2-ethoxy-2-oxoethyl)-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-(ethoxymethyl)-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-(2-methoxyethyl)-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-(3-methoxypropyl)-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]

1-butyl-1-methylpyrrolidinium Bromide	[21]
1-Purinium trifluoromethanesulfonate	[21]
1-decyl-3-methylimidazolium Bromide	[21]
1-hexadecyl-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-butyl-2,3-dimethylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
Tetramethylammonium Trifluoridotris (pentafluoroethyl) phosphate	[21]
4-(dimethylamino)-1-hexylpyridinium Chloride	[21]
Tetramethylguanidium Trifluoridotris (pentafluoroethyl) phosphate	[21]
méthylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Ethylsulphate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[21]
4-(cyanomethyl)-4-methylmorpholinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
(Ethoxymethyl) ethyldimethylammonium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
Pyridinium Chloride	[21]
4-(dimethylamino)-1-ethylpyridinium Bromide	[21]
1-butylpyridinium trifluoromethanesulfonate	[21]
1-butylpyridinium Bromide	[21]
1-hexyl-4-methylpyridinium tétrafluoroborate	[21]
4-(dimethylamino)-1-hexylpyridinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-(2-methoxyethyl)-1-methylpyrrolidinium Trifluoridotris (pentafluoroethyl) phosphate	[21]
1-hexyl-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-methyl-3-octylimidazolium Octylsulphate	[21]
1-methyl-3-octylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[21]
1-methyl-3-nonylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
Benzyl dodecyldimethylammonium Chloride	[21]
1-(3-methoxypropyl)-1-methylpiperidinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-butylpyridinium Hexafluorophosphate	[21]
1-butyl-4-(dimethylamino) pyridinium Chloride	[21]
1-(3-methoxypropyl)-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-(3-hydroxypropyl)-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-heptyl-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-methyl-3-octylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
Butyl triméthylammonium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-(2-ethoxyethyl)-1-methylpiperidinium Bromide	[21]
1-butyl-1-methylpiperidinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-butyl-4-(dimethylamino) pyridinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
3-(2-methylethyl)-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-methyl-3-octylimidazolium Trifluoridotris (pentafluoroethyl) phosphate	[21]
Ethyl (3-hydroxypropyl) dimethylammonium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-(3-hydroxypropyl)-1-methylpiperidinium bis (trifluoromethanesulfone) imide	[21]
1-(cyanomethyl) pyridinium Chloride	[21]
1-(3-sulfopropyl) pyridinium trifluoromethanesulfonate	[21]
4-methyl-1-octylpyridinium Chloride	[21]
1-methyl-3-octylimidazolium tétrafluoroborate	[21]

1-methyl-1-octylpyrrolidinium tétrafluoroborate	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium Tris (trifluoromethylsulfonyl) methanide	[21]

Tableau 06 : Formules structurales des (valeurs expérimental, prédéfini et euré) par méthode de contribution des interactions des groupes pour propriété EC50 de système biologique : Acétylcholinestérase

Liquide ionique	Reference
1-methyl-3-(3-oxobutyl) imidazolium Chloride	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Bromide	[21]
1-(2-ethoxyethyl)-3-methylimidazolium Bromide	[21]
1-(2-ethoxyethyl)-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-(2-hydroxyethyl)-3-methylimidazolium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-methyl-3-(phenylmethyl) imidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-(8-hydroxyoctyl)-3-methylimidazolium Bromide	[21]
1-(3-hydroxypropyl)-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium Trifluoridotriss (pentafluoroéthyl) phosphate	[21]
3-(3-carboxypropyl)-1-methylimidazolium Chloride	[21]
Bis (2-ethoxyethyl) amide Sulfamate	[21]
Ethyl (3-hydroxypropyl) diméthylammonium Bis (trifluorométhylsulfonyl) amide	[21]
(Cyanométhyl) éthyl diméthylammonium Chloride	[21]
1-(7-carboxyheptyl)-3-methylimidazolium Bromide	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Thiocyanate	[21]
1-éthyl-3-methylimidazolium Hydrogène sulfate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Trifluoridotriss (pentafluoroéthyl) phosphate	[21]
1-(cyanométhyl) pyridinium Bis (trifluorométhylsulfonyl) amide	[21]
1-(4-hydroxybutyl)-3-methylimidazolium Chloride	[21]
(Éthoxyméthyl) éthyl diméthylammonium Bis (trifluorométhylsulfonyl) amide	[21]
1-méthyl-3-octylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-éthyl-3-hexylimidazolium Bromide	[21]
1-méthyl-3-(2-propényl) imidazolium Chloride	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Bis (trifluorométhyl) amide	[21]
1-propylpyridinium Bis (trifluorométhylsulfonyl) amide	[21]
1-éthyl-3-methylimidazolium Trifluoroacétate	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium Tris (trifluorométhylsulfonyl) méthanide	[21]
1-Butyl-4-méthylpyridinium Trifluoridotriss (pentafluoroéthyl) phosphate	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium Trifluoridotriss (pentafluoroéthyl) phosphate	[21]
1-(2-hydroxyéthyl)-1-méthylpyrrolidinium Bis (trifluorométhylsulfonyl) amide	[21]
1-(2-éthoxyéthyl)-1-méthylpyrrolidinium Bis (trifluorométhylsulfonyl) amide	[21]
1-(3-hydroxypropyl) pyridinium Chloride	[21]
1-(3-méthoxypropyl)-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-hexyl-1-méthylpyrrolidinium Bis (trifluorométhylsulfonyl) amide	[21]

1-butyl-4-(dimethylamino) pyridinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-(3-methoxypropyl)-1-methylpyrrolidinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-(cyanomethyl)-3-methylimidazolium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Tetracyanidoboranuide	[21]
1-methyl-3-(phenylmethyl) imidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-methyl-3-(phenylmethyl) imidazolium Chloride	[21]
1-decyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-methyl-3-tetradecylimidazolium Chloride	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium O-2-(2-methoxyethoxy) ethyl sulfate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Bis [1,2-benzenediolato (2-)] borate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Bis (pentafluoroethyl) phosphate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Bis [oxalato (2-)] borate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Ethylsulphate	[21]
1-(2-hydroxyethyl)-3-methylimidazolium Iodide	[21]
1-(3-methoxypropyl)-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Methylsulphate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Sulfonate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium 4-methylbenzenesulfonate	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium 1,1-dioxo-1,2-dihydrobenzo[d]isothiazol-3-onate	[21]
1-hexyl-2,3-dimethylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-heptyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-heptyl-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-methyl-3-octylimidazolium Octylsulphate	[21]
1-methyl-3-octylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-methyl-3-octylimidazolium Chloride	[21]
1-methyl-3-nonylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-decyl-3-ethylimidazolium Bromide	[21]
1-ethyl-3- hexylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
Benzyldecyldimethylammonium Chloride	[21]
Butyl triméthylammonium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
(Ethoxymethyl) ethyldimethylammonium Chloride	[21]
(Ethoxymethyl) ethyldimethylammonium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
Ethyl (2-hydroxyethyl) dimethylammonium Iodide	[21]
Ethyl (2-hydroxyethyl) dimethylammonium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
Ethyl (3-methoxypropyl) dimethylammonium Chloride	[21]
butylethyldimethylammonium Chloride	[21]
Triméthylammonium Bis [1,2-benzenediolato (2-)] borate	[21]
Tetrabutylammonium Bromide	[21]
1-(ethoxymethyl) pyridinium Chloride	[21]
1-(ethoxymethyl) pyridinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
4-(dimethylamino)-1-ethylpyridinium Bromide	[21]
4-(dimethylamino)-1-ethylpyridinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-(2-methoxyethyl) pyridinium Chloride	[21]

1-(2-ethoxyethyl) pyridinium Bromide	[21]
1-(2-ethoxyethyl) pyridinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-(2-hydroxyethyl) pyridinium Iodide	[21]
1-(2-hydroxyethyl) pyridinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-(3-methoxypropyl) pyridinium Chloride	[21]
1-butylpyridinium methyl sulfate	[21]
1-Butyl-3-methylpyridinium tétrafluoroborate	[21]
1-Butyl-3,4-dimethylpyridinium tétrafluoroborate	[21]
1-Butyl-3,5-dimethylpyridinium tétrafluoroborate	[21]
1-Butyl-4-methylpyridinium Tetracyanidoboranuide	[21]
1-butyl-4-(dimethylamino) pyridinium Chloride	[21]
1-hexyl-4-methylpyridinium tétrafluoroborate	[21]
4-(dimethylamino)-1-hexylpyridinium Chloride	[21]
4-(dimethylamino)-1-hexylpyridinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-octylpyridinium Chloride	[21]
4-methyl-1-octylpyridinium tétrafluoroborate	[21]
4-methyl-1-octylpyridinium Chloride	[21]
1-(ethoxymethyl)-1-methylpyrrolidinium Chloride	[21]
1-(ethoxymethyl)-1-methylpyrrolidinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-(2-methoxyethyl)-1-methylpyrrolidinium Chloride	[21]
1-(ethoxymethyl)-1-methylpyrrolidinium Bromide	[21]
1-(2-hydroxyethyl)-1-methylpyrrolidinium Iodide	[21]
1-(3-methoxypropyl)-1-methylpyrrolidinium Chloride	[21]
1-(3-hydroxypropyl)-1-methylpyrrolidinium Chloride	[21]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium tétrafluoroborate	[21]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium Bromide	[21]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium Chloride	[21]
1-hexyl-1-methylpyrrolidinium Chloride	[21]
1-methyl-1-octylpyrrolidinium tétrafluoroborate	[21]
1-methyl-1-octylpyrrolidinium Chloride	[21]
1,1-dihexylpyrrolidinium tétrafluoroborate	[21]
1-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium 4-methylbenzenesulfonate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium 4-methylbenzenesulfonate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Octylsulphate	[21]
1-ethyl-3-propylimidazolium Bromide	[21]
(2-hydroxyethyl) triméthylammonium 2-hydroxypropanoate	[21]
(2-hydroxyethyl) triméthylammonium Hydroacetate	[21]
(Cyan méthyl) ethyldiméthylammonium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
(2-ethoxyethyl) ethyldiméthylammonium Chloride	[21]
Ethyl (2-methoxyethyl) diméthylammonium Chloride	[21]
Ethyl (2-hydroxyethyl) diméthylammonium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
Ethyldiméthylpropylammonium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]

Ethyl (3-methoxypropyl) dimethylammonium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
butylethyl dimethylammonium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
Tetrabutylammonium Chloride	[21]
(2-hydroxyethyl) dimethylammonium Acetate	[21]
(2-hydroxyethyl) dimethylammonium Hydroacetate	[21]
(2-hydroxyethyl) dimethylammonium Formate	[21]
Tetrabutylphosphonium Bis [1,2-benzenediolato (2-)] borate	[21]
Tetrabutylphosphonium Bromide	[21]
1-ethylpyridinium Chloride	[21]
1-propylpyridinium Bromide	[21]
1-(3-methoxypropyl) pyridinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-(3-hydroxypropyl) pyridinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-(3-sulfopropyl) pyridinium trifluoromethanesulfonate	[21]
1-butylpyridinium Chloride	[21]
1-butylpyridinium Bromide	[21]
1-butylpyridinium Hexafluorophosphate	[21]
1-Butyl-2-methylpyridinium Chloride	[21]
1-Butyl-3-methylpyridinium Chloride	[21]
1-Butyl-3-methylpyridinium N-cyanocyanamide	[21]
1-Butyl-3-methylpyridinium Hexafluorophosphate	[21]
1-Butyl-3,4-dimethylpyridinium Chloride	[21]
1-Butyl-3,5-dimethylpyridinium Chloride	[21]
1-Butyl-4-methylpyridinium tétrafluoroborate	[21]
1-Butyl-4-methylpyridinium Chloride	[21]
1-Butyl-4-methylpyridinium Hexafluorophosphate	[21]
1-pentylpyridinium Bromide	[21]
1-pentylpyridinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-hexylpyridinium trifluoromethanesulfonate	[21]
1-hexylpyridinium Chloride	[21]
1-hexylpyridinium Hexafluorophosphate	[21]
1-hexyl-4-methylpyridinium Chloride	[21]
3-methyl-1-octylpyridinium Chloride	[21]
1-(cyan méthyl)-1-methylpyrrolidinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-(2-methoxyethyl)-1-methylpyrrolidinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-(3-hydroxypropyl)-1-methylpyrrolidinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium N-cyanocyanamide	[21]
1-butyl-1-methylpyrrolidinium Trifluoridotris (pentafluoroethyl) phosphate	[21]
3-hydroxy-1-[(undecyloxy) methyl] pyridinium 1,1-dioxo-1,2-dihydrobenzo[d]isothiazol-3-onate	[21]
3-hydroxy-1-[(undecyloxy) methyl] pyridinium 6-méthyl-2,2-dioxo-1, 2,3-oxathiazin-4-onate	[21]
3-hydroxy-1-[(undecyloxy) methyl] pyridinium Chloride	[21]
3-hydroxy-1-(propoxyméthyl) pyridinium 1, 1-dioxo-1,2-dihydrobenzo[d]isothiazol-3-onate	[21]

3-hydroxy-1-(propoxymethyl) pyridinium Chloride	[21]
1-(butoxymethyl)-3-hydroxypyridinium 6-methyl-2,2-dioxo-1, 2,3-oxathiazin-4-onate	[21]
1-[(hexyloxy) methyl]-3-hydroxypyridinium 1,1-dioxo-1,2-dihydrobenzo[d]isothiazol-3-onate	[21]
1-[(hexyloxy) methyl]-3-hydroxypyridinium 6-methyl-2,2-dioxo-1, 2,3-oxathiazin-4-onate	[21]
1-[(heptyloxy) methyl]-3-hydroxypyridinium 1,1-dioxo-1,2-dihydrobenzo[d]isothiazol-3-onate	[21]
1-[(heptyloxy) methyl]-3-hydroxypyridinium 6-methyl-2,2-dioxo-1, 2,3-oxathiazin-4-onate	[21]
1-[(heptyloxy) methyl]-3-hydroxypyridinium Chloride	[21]
1-decyl-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-decyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-hexadecyl-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-methyl-3-(phenylmethyl) imidazolium Chloride	[21]
1-methyl-3-(phenylmethyl) imidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-ethyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
3-(2-methylethyl)-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-methyl-3-(2-phenylethyl) imidazolium Chloride	[21]
1-methyl-3-(2-phenylethyl) imidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-methyl-3-propylimidazolium Chloride	[21]
1-methyl-3-propylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-(3-methoxypropyl)-3-methylimidazolium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-(3-hydroxypropyl)-3-methylimidazolium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Hydrogen sulfate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Iodide	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium N-cyanocyanamide	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium 1,1-dioxo-1,2-dihydrobenzo[d]isothiazol-3-onate	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-methyl-3-octylimidazolium Chloride	[21]
1-methyl-3-octylimidazolium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-methyl-3-nonylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-ethyl-3-butylimidazolium tétrafluoroborate	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium O-2-(2-methoxyethoxy) ethyl sulfate	[21]
1-heptyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]

1-(cyanomethyl) pyridinium Chloride	[21]
1-butylpyridinium tétrafluoroborate	[21]
1-Butyl-2-methylpyridinium tétrafluoroborate	[21]
1-(cyanomethyl)-1-methylpyrrolidinium Chloride	[21]
1-(2-methoxyethyl) pyridinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-butylpyridinium trifluoromethanesulfonate	[21]
1-hexylpyridinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-hexyl-3-methylpyridinium Chloride	[21]
1-octylpyridinium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-(butoxymethyl)-3-hydroxypyridinium 6-methyl-2,2-dioxo-1, 2,3-oxathiazin-4-onate	[21]
1-octadecyl-3-methylimidazolium Chloride	[21]
1-(ethoxymethyl)-3-methylimidazolium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-methyl-3-(2-phenylethyl) imidazolium tétrafluoroborate	[21]
3-(2-methylethyl)-3-methylimidazolium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-(2-ethoxyethyl)-3-methylimidazolium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate	[21]
1-hexyl-3-methylimidazolium Bis (trifluoromethylsulfonyl) amide	[21]
1-methyl-3-nonylimidazolium Chloride	[21]
1-butyl-3-methylimidazolium O-2-(2-methoxyethoxy) ethyl sulfate	[21]

Résumé :

Les liquides ioniques, sels liquides qui répondent à la satisfaction de ces critères, ils sont envisagés comme alternatives. Dans ce travail, nous avons étudié de quelques propriétés toxiques (CL50 et CE50) des composés qui sont considération des modèles mathématique en fonction des paramètres dépendants de la structure moléculaire.

La base de données qui on utilise contient **652LIs**. Après les calculs et l'analyse des résultats, nous avons trouvé que le coefficient de détermination dans (CL50) tel que ($R^2 = 0.98$; $R^2 = 0.95$) suffisant avec *Daphnia magna* et Bactérie *Vibrio fischeri*, et avec *Acétylcholinestérase*, *Daphnia magna*, Bactérie *Vibrio fischeri* et *Leukemia rat cell* les Coefficient de détermination dans (CE50) est ($R^2 = 0.90$), ($R^2 = 0.76$), ($R^2 = 0.87$), ($R^2 = 0.89$) respectivement.

Les résultats obtenus étaient excellents para pour les certaines études visant à estimer les propriétés toxique de

Abstract :

Ionic liquids, liquid salts that meet the satisfaction of these criteria, they are considered as alternatives.

In this work, we have studied some toxic properties (LC50 and EC50) of compounds that are considered mathematical models depending on the parameters dependent on the molecular structure.

The database that we use contains **652 LIs**. After the calculations and analysis of the results, we found that the coefficient of determination in (LC50) such that ($R^2 = 0.98$; $R^2 = 0.95$) sufficient with *Daphnia magna* and Bacterium *Vibrio fischeri*, and with *Acetylcholinesterase*, *Daphnia magna*, Bacterium *Vibrio fischeri* and *Leukemia rat cell* Coefficient of determination in (EC50) is ($R^2 = 0.90$), ($R^2 = 0.76$), ($R^2 = 0.87$), ($R^2 = 0.89$) respectively.

The results obtained were excellent for some studies aimed at estimating the toxic properties of ionic liquid.

Key words : Ionic liquid (IL), LC50, EC50, Contribution of group interactions (GIC), Estimation.

ملخص :

تعرف السوائل الأيونية بالأملاح السائلة التي تعتبر بدائل للمذيبات العضوية. في هذا العمل، قمنا بتطوير نموذج رياضي وفقا للبيانات التجريبية للتركيب الجزيئي للسوائل الأيونية من أجل تقدير ودراسة بعض الخواص السامة للسوائل الأيونية: التركيز القاتل (LC50) والتركيز الفعال (EC50) في عدة أنظمة بيولوجية.

تحتوي قاعدة البيانات التي قمنا باستخدامها على حوالي (652 LIs). بعد الحسابات وتحليل النتائج، وجدنا أن معامل الارتباط في الخاصية (LC50) يقدر ب ($R^2 = 0.98$) ; ($R^2 = 0.95$) مع الأنظمة البيولوجية "دافنيا مانيا" و "بكتيريا فييرو فيشيري"

ومعامل الارتباط في الخاصية (EC50) مع "أستيل كولين ستراز" و "دافنيا مانيا" و "بكتيريا فييرو فيشيري" وخليية الفئران المسرطنة يقدر ب ($R^2 = 0.90$)، ($R^2 = 0.76$)، ($R^2 = 0.87$)، ($R^2 = 0.89$) على التوالي. النتائج التي تم الحصول عليها كانت جيدة لبعض الدراسات التي تهدف إلى تقدير الخواص السامة للسوائل الأيونية. الكلمات المفتاحية: السائل الأيوني (LI)، LC50، EC50، مساهمة التفاعلات الجماعية (GIC)، التقدير.