

Evaluation et calcul de coefficient de partage de quelques composés ferrocéniques

Derdache Noura
 Email: derdanor@yahoo.fr

Encadreur : benabdessalem soulef
 Email: Ben_soulef@yahoo.fr

Résumé:
 Le coefficient de partage dans le système octanol-eau, exprimée par P, est une propriété physico-chimique principale, sur laquelle se base plusieurs domaines scientifique telles que Pharmacologie et chimie agricole . Ce travail décrit une simple méthode de détermination des valeurs de LogP pour un grand nombre de dérivés de ferrocène expérimentalement.

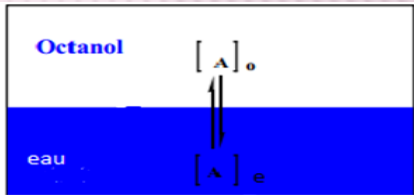


Figure I : Le coefficient de partage

Introduction:
 Le partage d'une substance entre une phase aqueuse et une phase organique constitue une propriété physico-chimique très importante de cette substance, notamment en ce qui concerne sa nature lipophile ou hydrophile, la propriété de partage conditionne en partie les propriétés biologiques de la molécule considérée, telles que le transport, la diffusion à travers les membranes (une molécule qui présente un partage élevée sera très lipophile et diffusera donc beaucoup à travers la membrane et inversement), la biodisponibilité (distribution et accumulation), l'affinité pour un récepteur et la fixation par une protéine, l'activité pharmacologique ou encore la toxicité, s'agissant de contaminants, ce même partage conditionne leur devenir dans notre environnement en particulier leur accumulation dans les organismes aquatiques.
 Dans notre étude, on va évaluer le coefficient de partage (logp) de quelques dérivés ferrocéniques par deux méthodes, une spectrophotométrique et l'autre électrochimique.

Détermination expérimentale de coefficient de partage eau/n-octanol (logP eau/octanol):

I. Méthode spectrophotométrie :
le mode opératoire:
 dissoudre dans un 10 ml de l' octanol (saturé en eau) une quantité exactement connue de soluté, après l'obtention des solutions octanoliques homogènes sont mis en contact dans un ampoule à décanter avec 50ml (Vaq) d'eau, (préalablement saturé en octanol). On agite pendant 15 minute chaque ampoule est laissée décanter d'au moins 24 heures pour que les phases se séparent. Une fois que le système biphasique est à l'équilibre (cf. Figure 2), on va prélever une petite quantité de chaque phase. La concentration dans les deux phases séparées est alors déterminée par spectrophotométrie.



Figure II: eau +octanol

II. Méthode électrochimiques voltampérométrie:
principe:
 La voltampérométrie cyclique est une méthode expérimentale qui consiste à mesurer les variations du courant en fonction de la tension appliquée entre l'électrode de travail et l'électrode de référence dans une cellule électrochimique.

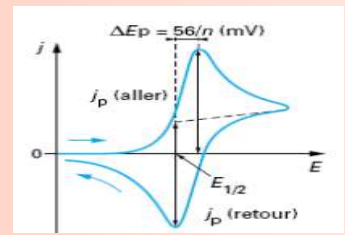


Figure III: La voltampérométrie cyclique,

Conclusion :
 Le coefficient de partage peut être déterminer au moyen des méthodes expérimentales, ou par prédiction à l'aide des relations empiriques.

Référence
 [1] Boussebaa Walid. Contribution à l'étude antioxydante et l'étude de structure-activité de quelques dérivés dithioliques Mémoire de magister ;Université Kasdi Merbeh Ouargla; 30/10/2012.
 [2] Capry.A, Importance de la lipophilie en modélisation moléculaire, LPTC, UFR de chimie, Université de Bordeau I, France 1999.