

Stabilité de l'Ibuprofène avec la β -cyclodextrine (β -CD) dans le vide et dans le solvant

BEZZINA Belgacem, ABED GHARS Med Tayeb, BENDJAMA Hocine, KHATMI Djameleddine

Abstract : Le procédé d'inclusion de l'ibuprofène dans la β -cyclodextrine (β -CD) a été étudié expérimentalement de manière intensive [1, 2, ...], contrairement à l'étude théorique. Nous avons étudié le procédé d'inclusion de l'ibuprofène (IBP) dans la β -cyclodextrine (β -CD) en utilisant les différentes méthodes à savoir : PM3, HF et DFT. Dans cette étude nous avons tenu compte seulement de la stoechiométrie (1:1) [1, 2, 3]. Pour évaluer l'effet du solvant sur le phénomène de complexation [4], les énergies de complexation et d'interaction pour les deux orientations considérées sont étudiées dans le vide (gas) puis dans le solvant (implicite (COSMO) et explicite). Toutes les méthodes quantiques ont prouvé que l'orientation 2 est favorisée, compte tenu de l'énergie de complexation dans le cas où : ? Le cycle benzénique de l'ibuprofène est totalement incluse dans la cavité hydrophobe de β -CD avec ? Le radical isobutyl situé près de l'ouverture primaire et ? Le groupement d'acide propionique du côté de l'ouverture secondaire. En outre, il existe plusieurs liaisons d'hydrogènes intermoléculaires entre l'hôte et l'invité. Ici, la liaison H est définie comme C-H ... O ou O-H ... O avec une distance variable entre O et H, de 1,79 à 3,00 Å, laquelle joue un rôle important dans la stabilité des complexes. Les statistiques thermodynamiques par la méthode PM3 à P=1 atm et T=298.15 K ont montré que le complexe IBP/ β -CD est enthalpiquement favorable.

Keywords : Procédé d'inclusion, Ibuprofène, β -cyclodextrine, Solvation