
Etude théorique des réactions d'époxydation des molécules de coumarines

Sameh Ayadi*¹

¹Laboratoire matériaux molécules et applications, IPEST, Boite postale 51, 2070 la Marsa, Tunisie – Tunisie

Résumé

Résumé : La coumarine est une substance naturelle organique, se trouve dans certaines familles de plantes telles que la Fabaceae, Asterceae, Ombellifrae et Rutaceae [1-3]. Elle se localise dans toutes les parties de la plante et surtout dans les fruits et les huiles essentielles des graines [3]. Plusieurs travaux de recherche ont montré que la plante Ruta est très riche en coumarines tels que la chalepine, Gravelliférone, etc...[4-6]. D'autres travaux ont montré l'importance des réactions d'époxydation des alcaloïdes se trouvant dans la plante Ruta [7]. Dans ce travail, nous avons trouvé intéressant d'étudier les réactions d'époxydation des molécules de coumarines tels que la chalepine 1 et les dérivés de Gravelliférone de type 2a-d par l'acide métachloroperbenzoïque 3. En utilisant la méthode de calcul DFT avec la fonctionnelle B3LYP et la base standard 6-311G, nous avons comparé la réactivité de ces molécules de coumarines vis-à-vis de la molécule de peracide 3. Par la suite, nous avons comparé la réactivité de ces trois doubles liaisons appartenant à une même molécule vis-à-vis de la molécule 3.

Références :

(epoxy) Y. Hubert-Brierre, D. Herlem, F. Khuong-Huu, Tetrahedron, 1975, 31(24), 3049-3054.

D. Herlem, A. Florès-Parra, F. Khuong-Huu, tetrahedron, 1982, 38 (2), 271-278.

(epoxy) M. Bénèche, F. Khuong-Huu, Tetrahedron, 1976, 32 (6), 701-707.

J. Santamaria, D. Herlem, F. Khuong-Huu, tetrahedron, 1977, 33 (18), 2389-2392.

Y. Kaçar, E. Alpay, V.K. Ceylen, Water Reserch, 2003, 37 (5), 1170-1176.

Bruneton J., 1999, Pharmacognosie, Photochimie Des Plantes Médicinales, 3ème Ed.,

Technique et Documentation Lavoisier, Paris 230.

Gray A.I., Wataman P.G., 1978, Phytochemistry, 17, 845.

*Intervenant

Mots-Clés: alcaloïdes, coumarines, DFT