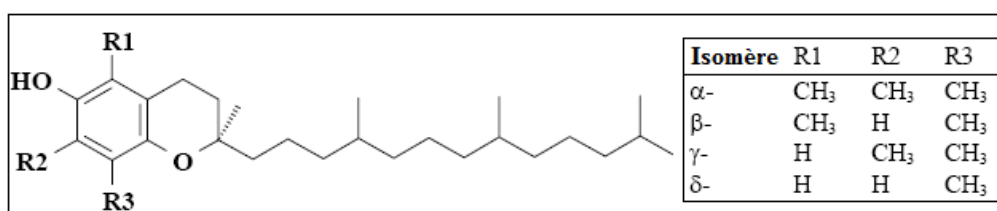


# Etude DFT et TDDFT de la structure et des propriétés optiques du tocophérol

Kahina Bakhouche, Dalila Hammoutène

Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire,  
USTHB BP 32, El Alia 16111 Bab Ezzouar, Alger  
[kahinabak@yahoo.fr](mailto:kahinabak@yahoo.fr)

La vitamine E est reconnue comme antioxydant efficace grâce à sa capacité à inhiber les peroxydations lipidiques [1]. Elle protège les cellules contre les dommages causés par les radicaux libres. La vitamine E se compose de deux familles: les tocophérols (Figure 1) et les tocotrienols [2], se présentant chacune sous quatre formes ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  et  $\delta$ ) qui diffèrent par le nombre et la position du groupement méthyle sur le cycle aromatique. Le  $\alpha$ -tocophérol, qui est la vitamine E proprement dite, représente le composé le plus actif de la vitamine E [3] et l'un des meilleurs antioxydants phénoliques.



**Figure 1:** Structure de tocophérols.

Dans ce travail, nous avons utilisé la mécanique quantique pour étudier les propriétés spectroscopiques de tocophérols. Tous les calculs sont réalisés au moyen du code GAUSSIAN, en utilisant la méthode de la DFT. Pour chaque molécule nous avons optimisé l'état fondamental au niveau PBE0/6-31G\*, puis déterminé les dix premiers états excités singlets, en utilisant une base plus étendue de type 6-311+G\*. Les résultats obtenus montrent que c'est le  $\gamma$ -tocophérol qui a une longueur d'onde d'absorption la plus importante, avec une géométrie plane, comparativement aux autres formes.

D'autre part, les énergies d'excitation, les longueurs d'onde ainsi que les forces d'oscillateurs du  $\gamma$ -tocophérol sont déterminées puis comparées à celles provenant des données expérimentales disponibles [4].

**Mots clés:** Tocopherol, excited states, TD-DFT, PESs.

## Références

- [1]- E.O. Aluyor, C.E. Ozigagu, O.I. Oboh, P. Aluyor, Scientific Research and Essay, **4** (2009) 191.
- [2]- M.C. Seppanen, Q. Song, A.S. Csallany, J Am Oil Chem Soc, **87** (2010) 469.
- [3]- E. Klein, V. Lukeš, M. Ilčin, Chemical Physics, **336** (2007) 51.
- [4]- A.M. Hossu, M.F. Maria, M. Ilie, A. Stoica, Chemistry & Chemical Engineering, Biotechnology, Food Industry, **12** (2011) 025.