

October 15th-16th, 2022

ETUDE SUR LES EFFET DE SOLVANTS ET L'IMPACT DES REJETS DE MOLECULES PHARMACEUTIQUES DANS L'EAU

Amel ILES^{1*}, Farouk HAMZA REGUIG², Mohamed AMRANI³, Fouad LEBSIR²

¹Laboratoire de synthèse organique appliquée LSOA-Université Oran1 Ahmed Ben Bella

²Laboratoire de chimie- physique macromoléculaire LCPM-Université Oran1 Ahmed Ben Bella

³Département de chimie-Université Oran1 Ahmed Ben Bella

Adresses e-mails: ilesamel261@gmail.com
hamza_rf70@hotmail.com
amramed261@gmail.com
flebsir@gmail.com

I. INTRODUCTION

En terme pharmacocinétique et processus ADME, chaque médicament consommé est à la fin éliminé[1]. Certaines substances non complètement métabolisées et excrétées par l'organisme se trouvant dans les eaux usées [3].

D'après certaines études précédentes, de nombreux résidus médicamenteux subsistent après passage dans la station d'épuration[2] ; ce qui peut compromettre la qualité de l'eau, et ainsi être un facteur dans l'apparition d'autres maladies.

Les calculs ont été réalisés par dynamique moléculaire, qui est une technique utilisée pour la simulation des propriétés des fluides en général, constituant ainsi un lien entre les descriptions microscopiques et macroscopiques dans ce milieu [4].

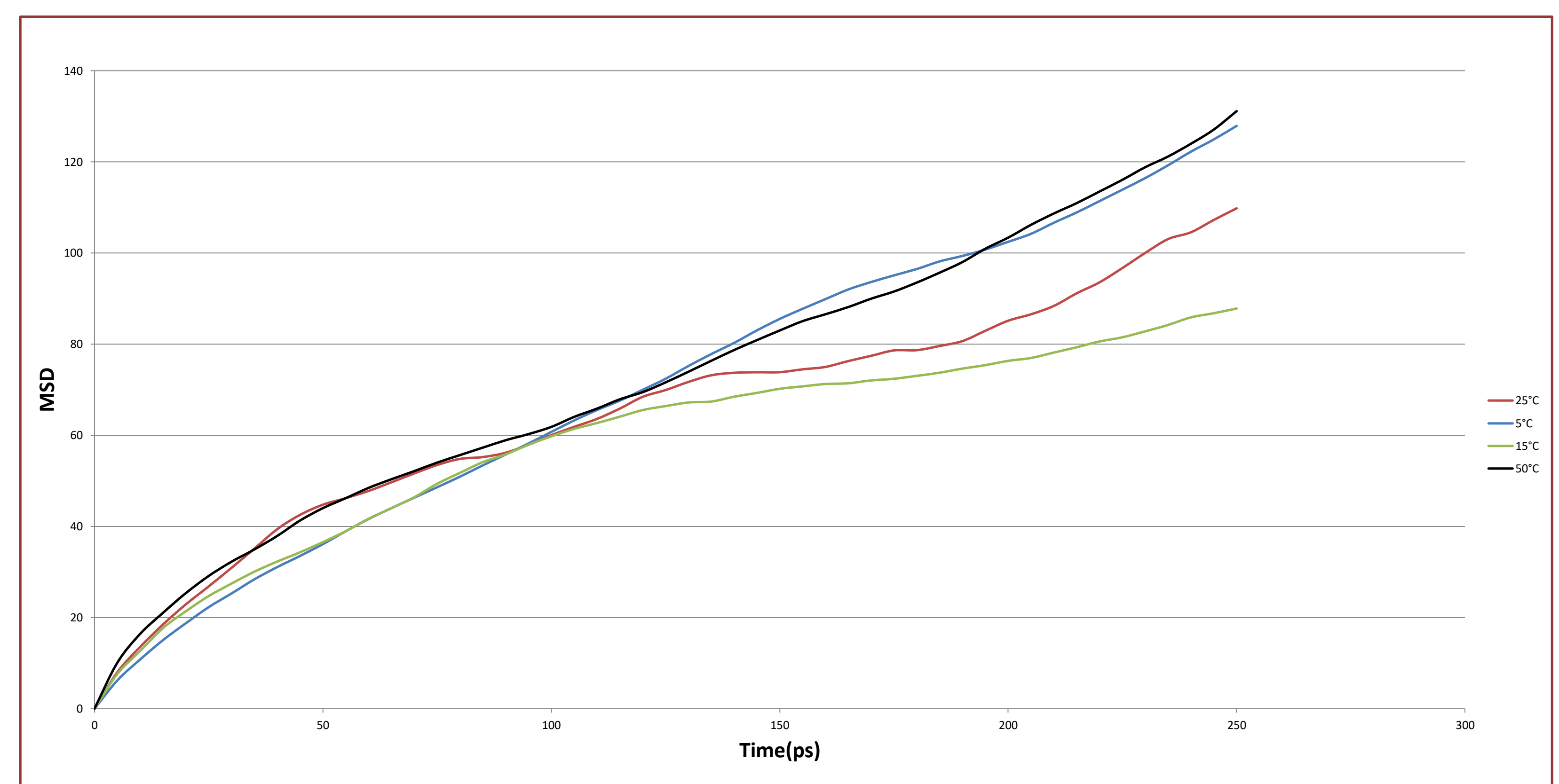


Figure 2 : Déplacement quadratique moyen des molécules à des différentes températures (5°C,15°C,25°C et 50°C).

III. RÉSULTATS ET DISCUSSION

Le déplacement quadratique moyen (MSD) représente le déplacement des particules de leurs positions initiales à une position nôt [4].

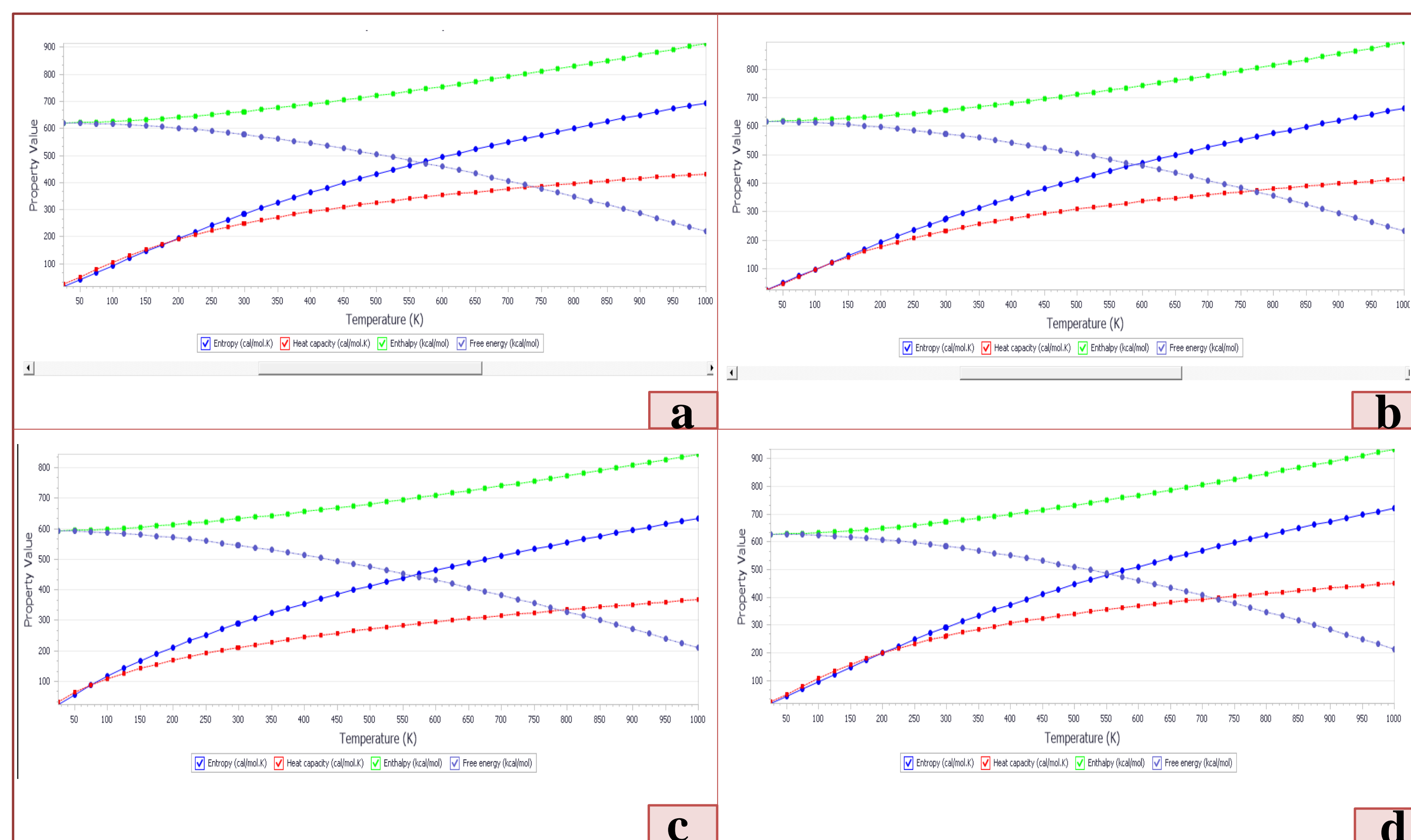


Figure 1 : Propriétés thermodynamiques du système
(a) 5°C , (b) 15°C , (c) 25°C , (d) 50°C

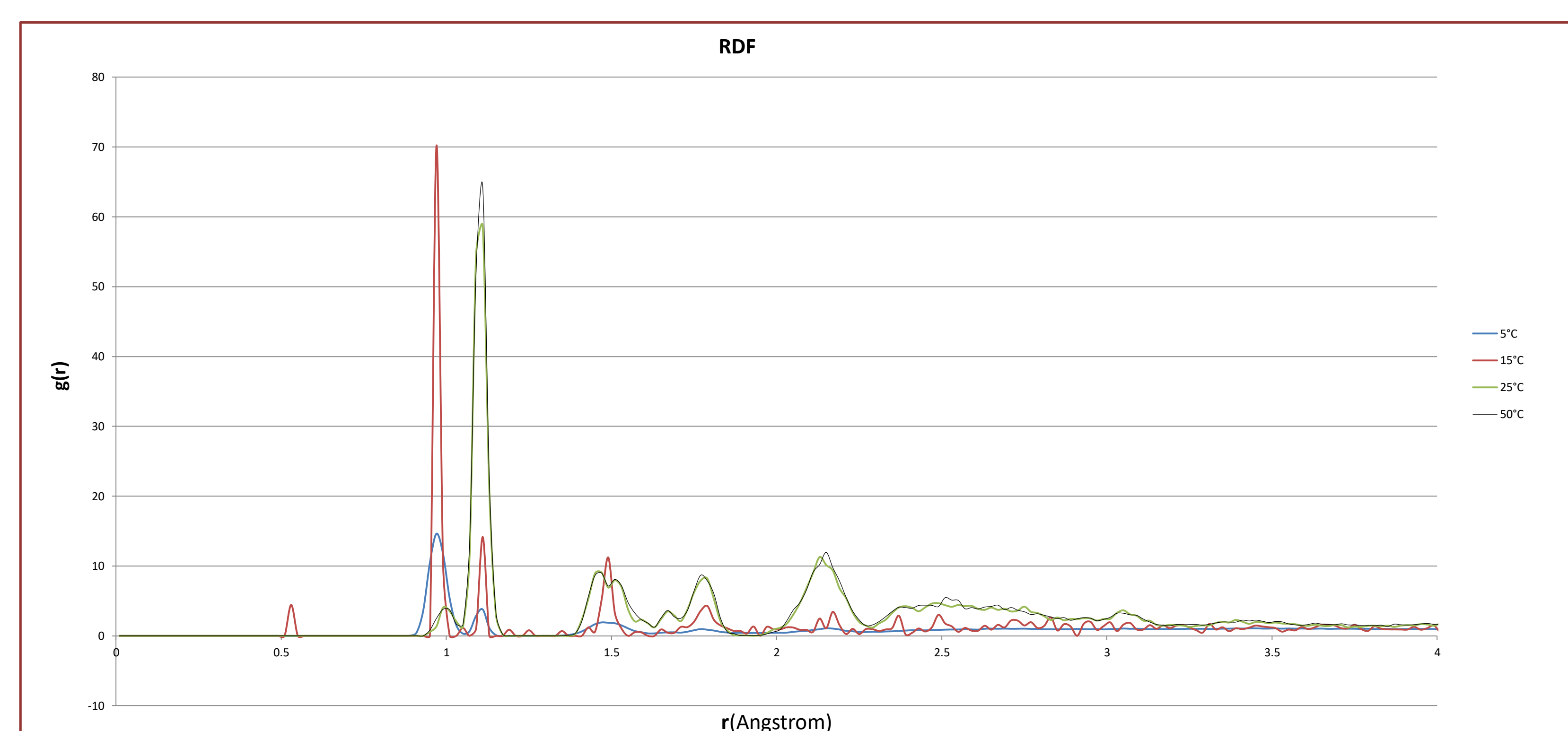


Figure 3 : Fonction de distribution radiale des molécules à des différentes températures (5°C,15°C,25°C et 50°C).

RÉFÉRENCES:

- [1] N.Hamitouche, « Modélisation Pharmacocinétique / Pharmacodynamique de la Fludrocortisone par approche de population », Thèse de doctorat, Université de RENNES,2017.
[2] G.Maillot, « Etat des lieux et impact de la contamination des milieux hydriques par les rejets hospitaliers de médicaments anticancéreux »,Thèse de doctorat, Université de ROUEN,2011.
[3] M.Nicolas Mater , « Evaluation de l'impact (eco)toxicologique de résidus médicamenteux présents dans les effluents hospitaliers, urbains et dans l'environnement a l'aide d'une batterie de bioessais et de biomarqueurs », Thèse de doctorat, Université de TOULOUSE,2014.
[4] A.Adda , « Etude Comparative des Modèles de L'eau Par Simulation de Dynamique Moléculaire », Mémoire de magister, Université Oran1,2012.

IV. CONCLUSION

Les premiers résultats obtenus par simulation numérique effectués sur les molécules à usage pharmaceutique, montrent le choix judicieux des méthodes de modélisation de nos systèmes moléculaires choisis, qui nous ont permis de comprendre les mécanismes de la solvation.