

DÉTERMINATION DE COEFFICIENT DE PARTAGE PAR RMN

1 Protocole

1.1 Produit

1. Octan-1-ol
2. Acétone
3. THF
4. Ethanol

1.2 Matériel

- Micropipettes
- Tubes RMN propres

1.3 Manipulation

1. Introduire 200 μL d'acétone et exactement 500 μL d'eau dans un tube RMN propre. Faire l'acquisition du spectre RMN ; normaliser le pic de l'eau à 1. Relever l'intégration du pic de l'acétone noté I_{ref}
2. Ajouter exactement 500 μL d'octan-1-ol dans le tube. On obtient un mélange biphasique. Agiter vigoureusement le tube RMN pendant 2-3 minutes. Laisser reposer pour que les phases puissent bien se séparer.
3. Faire l'acquisition d'un spectre RMN du tube. Relever l'intégration I du pic de l'acétone

Répéter cette mesure 3-4 fois et faire la même chose en remplaçant l'acétone par un autre solvant

2 Exploitation

L'octan-1-ol et l'eau ne sont pas miscibles : on a un équilibre de partage entre l'acétone dans la phase organique et la phase aqueuse. Cet équilibre est caractérisé par le coefficient de partage :

$$K_{OW} = \frac{[\text{acétone}]_{\text{orga}}}{[\text{acétone}]_{\text{aq}}}$$

Comme on a la même quantité d'eau et d'octan-1-ol, et comme les intégrations des pics sont proportionnelles aux concentrations on a :

$$K_{OW} = \frac{I_{\text{ref}} - I}{I}$$

K_{OW} représente la différence d'affinité du composé entre la phase organique et la phase aqueuse. Cette mesure est utilisée en toxicologie :

- Si $K_{OW} > 1$: le composé a plus d'affinité avec la phase organique, il a tendance à s'accumuler dans les graisses et peut être difficile à éliminer

- Si $K_{OW} < 1$: le composé a plus d'affinité avec la phase aqueuse : il sera plus facilement éliminé par l'organisme.

On choisit l'octan-1-ol car il permet de simuler efficacement les membranes des cellules.

On peut également travailler avec le $\log(K_{OW})$ appelé, solubilité différentielle