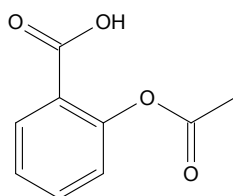


ÉTUDE DE QUELQUES PRINCIPES ACTIFS DE MÉDICAMENTS

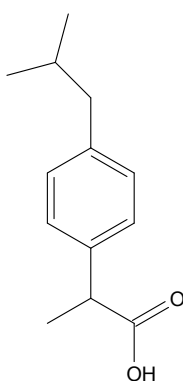
1. Quelques molécules de la santé

Les figures ci-dessous représentent 7 molécules très couramment utilisées dans des médicaments en raison de leurs vertus thérapeutiques. Dans l'industrie pharmaceutique, ces molécules sont appelées « principes actifs ».

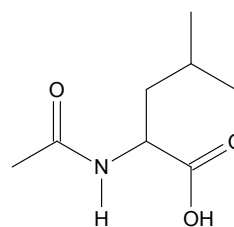
Dans les 6 premières formules des molécules données ci-dessous, appelées formules topologiques, tous les atomes figurent sauf les atomes de carbone (qui se trouvent aux angles ou aux extrémités) et les atomes d'hydrogènes implicites (ceux directement liés à des atomes de carbone).



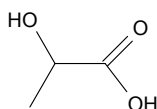
Molécule A



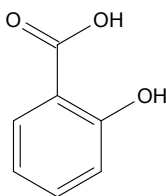
Molécule B



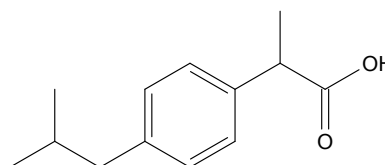
Molécule C



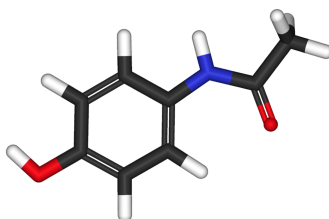
Molécule D



Molécule E



Molécule F



Molécule G

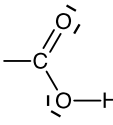
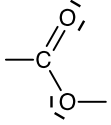
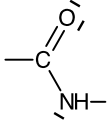
Votre mission consiste à utiliser les modèles moléculaires pour construire les représentations tridimensionnelles de ces molécules et à exploiter les documents ci-dessous afin de trouver le nom de chacune des molécules A à G.

Votre rapport d'expertise sera rédigé de façon soignée et rigoureuse en répondant aux questions posées à la fin de ce feuillet.

2. Documents à disposition

Document 1

Les molécules utilisées pour leurs vertus thérapeutiques comportent des groupes d'atomes leur conférant des propriétés chimiques spécifiques. Ces groupes d'atomes sont appelés **groupes caractéristiques**. En voici quelques exemples ainsi que leur nom :

—OH			—NH_2	
Hydroxyle	Carboxyle	Ester	Amine	Amide

Document 2

L'acétyl-leucine, dont l'action sur le vertige de la souris a été découverte en 1957, est utilisée depuis avec succès en clinique humaine comme médicament symptomatique des états vertigineux. Cette molécule comporte un groupe carboxyle et un groupe amide.



Document 3

La kératose pileuse est une maladie de la peau se caractérisant par une sécheresse importante et la présence de squames (écailles de peau) très fines, ressemblant à des écailles de poisson, ce qui donne à la peau un aspect rêche. Certains traitements thérapeutiques préconisent l'utilisation de modificateurs de la kératinisation tels que l'acide salicylique et l'acide lactique. Ces deux molécules possèdent les mêmes groupes caractéristiques : un groupe carboxyle et un groupe hydroxyle. L'acide salicylique est une molécule cyclique, contrairement à l'acide lactique.



Document 4

Le paracétamol, l'aspirine et l'ibuprofène sont des espèces chimiques utilisées en médecine pour leurs propriétés antalgique (ou analgésique) et antipyrétique (ou fébrifuge). Elles constituent le principe actif de nombreux médicaments commercialisés sous des noms variés. La molécule d'ibuprofène ne comporte qu'un seul groupe caractéristique : le groupe carboxyle. Les molécules d'aspirine et de paracétamol ont chacune deux groupes caractéristiques différents : carboxyle et ester pour l'aspirine, amide et hydroxyle pour le paracétamol.



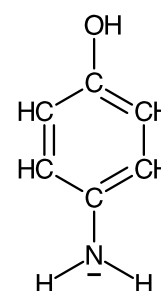
Document 5

L'aspirine est le nom usuel de l'acide acétylsalicylique. Cette molécule est synthétisée par transformation chimique de l'acide salicylique. Au cours de cette synthèse, le groupe hydroxyle de l'acide salicylique est transformé en groupe ester ; le reste de la molécule ne change pas.



Document 6

Contrairement à l'aspirine, le paracétamol peut généralement être utilisé par les personnes qui suivent un traitement anticoagulant. La synthèse du paracétamol est effectuée par transformation chimique du para-aminophénol (ci-contre). Au cours de cette réaction, le groupe amine du para-aminophénol est transformé en groupe amide ; le reste de la molécule ne change pas.

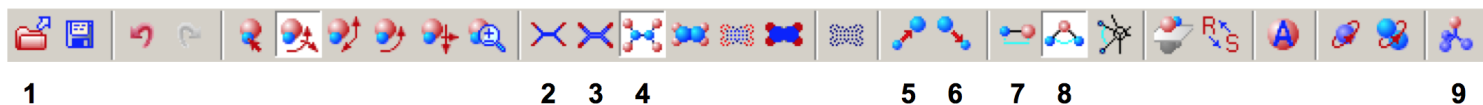


3. Rapport d'expertise

- 3.1. Définir les termes suivants : thérapeutique, antalgique, antipyrétique, anticoagulant, synthèse chimique
- 3.2. Nommer les 7 molécules citées dans les documents pour leurs vertus thérapeutiques.
- 3.3. Construire les représentations tridimensionnelles des 7 molécules présentées dans la première partie.
- 3.4. Donner les formules semi-développées des 7 molécules présentées dans la première partie.
- 3.5. Donner les formules brutes des 7 molécules présentées dans la première partie.
- 3.6. En rédigeant une argumentation, attribuer à chaque molécule de A à G le nom qui lui correspond.

4. Logiciel de représentation tridimensionnelle des molécules

À l'aide du mode d'emploi simplifié ci-dessous, construire dans le logiciel mol3D les 7 molécules précédentes à l'aide de la représentation « bâtonnets » et comparer aux modèles moléculaires construits précédemment.



Icône 1 : charger une molécule

Icône 2 : représentation en « fil de fer »

Icône 3 : représentation en bâtonnets

Icône 4 : modèle moléculaire compact

Icône 5 : Augmenter le rayon des sphères représentant les atomes

Icône 6 : Diminuer le rayon des sphères représentant les atomes

Icône 7 : Mesurer la distance entre deux atomes (l'unité utilisée n'est pas une unité légale ; il s'agit de l'angström, noté Å, dont la valeur est $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$; vous convertirez les mesures dans une unité SI)

Icône 8 : Mesurer la valeur de l'angle formé par trois atomes

Icône 9 : Optimiser la représentation 3D - Toujours appuyer sur ce bouton après l'ouverture d'un fichier