

# CHAPITRE 2 : LES MOLÉCULES DANS LES MÉDICAMENTS

## COURS



### I. LES MOLÉCULES ET LEURS REPRÉSENTATIONS

Hormis les gaz nobles (aussi appelés rares ou inertes), qui sont très stables, les atomes doivent gagner ou perdre des électrons pour augmenter leur stabilité. Pour cela, deux possibilités s'offrent à eux:

- devenir des ions (voir chapitre « de l'atome à l'ion »)
- s'assembler avec d'autres atomes pour former une molécule (traité dans ce chapitre)

La formulation d'un médicament fait intervenir de nombreuses molécules : celle de la (ou des) substance(s) active(s), appelée(s) aussi principe(s) actif(s), et celles des excipients.

Une molécule est une association de plusieurs atomes. C'est un édifice électriquement neutre : l'ensemble n'a aucune charge, ni positive ni négative.

#### a. Les liaisons chimiques covalentes

Pour former une molécule, chaque atome fournit un des électrons de sa couche externe. Entre 2 atomes, il y a donc 2 électrons.

On appelle « liaison covalente » ou « liaison chimique » cette mise en commun de deux électrons par deux atomes et on la schématise par un trait entre les deux atomes.

**Avantage :** les électrons mis en commun sont comptés dans la structure électronique de chaque atome. Ils sont donc considérés comme appartenant aux deux atomes liés. Chaque liaison chimique permet par conséquent à l'atome de gagner un électron !

Pour gagner plusieurs électrons, chaque atome peut :

- se lier à plusieurs atomes
- partager plusieurs électrons avec le même atome (liaison double ou triple)

Ex : molécules de dihydrogène  $H_2$



• électron  
○ formation d'une liaison  
- liaison covalente

Ex : molécules de dioxyde de carbone  $CO_2$



#### b. Formule brute

La formule brute d'une molécule indique la nature des atomes qui la constituent et le nombre de chacun de ces atomes. Ce nombre est précisé **en indice et à droite** du symbole de chaque atome. Le nombre 1 est sous-entendu, on ne l'écrit jamais.

Ex : la molécule de chloral, connue pour avoir des effets soporifique et anesthésique, est l'association de 2 atomes de carbone, 1 atome de d'hydrogène, 3 atomes de chlore et 1 atome d'oxygène. Sa formule brute est donc  $C_2HCl_3O$

#### c. Formule développées et semi-développées

Dans la formule développée d'une molécule, toutes les liaisons entre les atomes apparaissent.

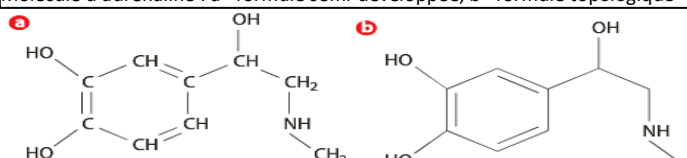
Dans la formule semi-développée d'une molécule, les liaisons entre l'atome d'hydrogène H et les autres atomes ne sont pas représentées

Molécule	chloral	urée (formée dans le foie, éliminée par les urines)	éthanol (alcool du vin ; pur, est utilisé comme désinfectant)
Formule développée			
Formule semi-développée			$CH_3 - CH_2 - OH$

#### d. Formule topologique

Quand la formule est complexe, les chimistes utilisent la représentation topologique : non seulement on ne représente pas les liaisons entre l'atome d'hydrogène H et les autres atomes (comme pour la formule semi-développée), mais on en représente pas non plus les atomes de carbone C et les hydrogène H qui sont liés à ces carbone.

Molécule d'adrénaline : a= formule semi-développée, b= formule topologique

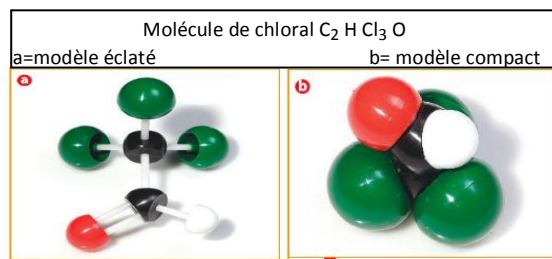


## e. Modèles moléculaires

Les modèles moléculaires sont des assemblages de billes de couleurs qui permettent de modéliser (représenter) les molécules afin de visualiser l'arrangement à 3 dimensions des atomes qui les constituent.

Dans les modèles éclatés : les liaisons sont matérialisées par des tiges et les atomes par des boules colorées.

Dans les modèles compacts, les liaisons n'apparaissent pas mais les proportions sont mieux respectées.



**Codes couleurs à connaître :** Carbone (C) en noir, hydrogène (H) en blanc, oxygène (O) en rouge, chlore (Cl) ou fluor (F) en vert, azote (N) en bleu, soufre (S) en jaune.

Des logiciels de représentation de molécules permettent également de modéliser les molécules et de les faire tourner (voir TP)

La molécule de formule  $H_3C-CH_2-OH$  est représentée ci-dessous à l'aide d'un logiciel 3D sous deux angles différents.

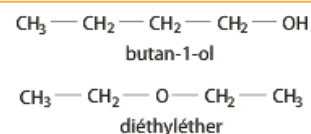


## II. LES MOLÉCULES ISOMERES

Ce sont des molécules qui ont la même formule brute mais des enchainements d'atomes différents, donc des formules développées et semi-développées différentes.

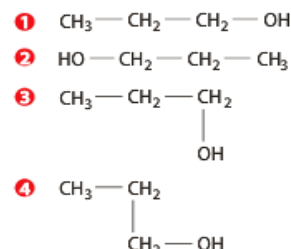
Conséquences : le fait que les atomes ne soient pas arrangés dans le même ordre donnent aux isomères des propriétés physiques différentes (ils ne changent pas d'état aux mêmes températures, ils ne se solubilisent pas de la même façon...) mais aussi des propriétés chimiques différentes (ils ne réagissent pas avec les mêmes substances, ils n'ont pas les mêmes effets sur le corps humain)

Ex : le butan-1-ol est un alcool qui bout à  $117^{\circ}C$  alors que le diéthyléther est un anesthésique qui bout à  $35^{\circ}C$  seulement. Ils ont la même formule brute :  $C_4H_{10}O$ .



Il y a plusieurs façons d'écrire la formule semi-développée (ou développée) d'une molécule. La forme peut changer, mais pour savoir s'il s'agit de molécules isomères ou non il faut vérifier si elles ont la même formule brute et si l'enchainement des atomes est différent.

Ex :  $C_3H_8O$  peut être représentée de 4 façons différentes, mais en la retournant on s'aperçoit que l'enchainement des atomes est toujours le même donc ce ne sont pas des isomères, c'est toujours la même molécule !

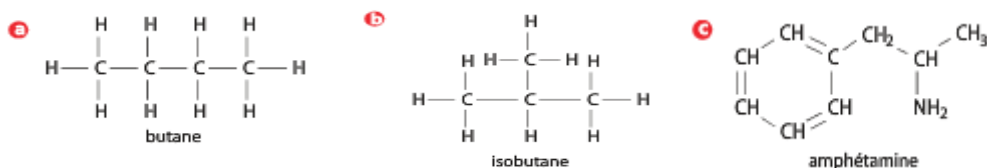


## III. STRUCTURES ET GROUPES CARACTÉRISTIQUES

### a. Le squelette carboné

C'est l'enchainement des atomes de carbone dans une molécule : c'est sa colonne vertébrale

Ex : les molécules de butane (a) et d'isobutane (b) sont des isomères, ils ont la même formule brute  $C_4H_{10}$  mais des enchainements d'atomes différents donc des squelettes carbonés différents. La molécule d'amphétamine a un squelette carbone dont une partie est cyclique



### b. Les groupes caractéristiques

Ce sont des groupes d'atomes qui donnent des propriétés spécifiques aux molécules qui les possèdent.

Les molécules qui ont le même groupe caractéristique forment une même famille chimique (voir activité)