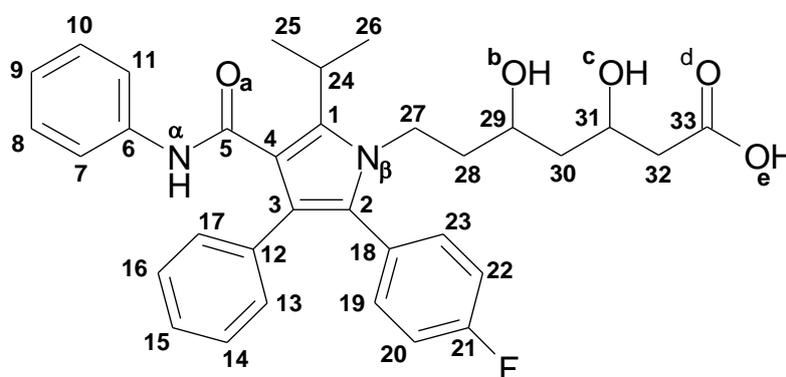


Documents autorisés : aucun document ni calculatrice autorisé
(modèles moléculaires, pâte à modeler ou pommes de terre et allumettes autorisés)

Atomistique – Chimie Structurale

L'**atorvastatine** est un médicament de type statine utilisé pour son action hypocholestérolémiante, notamment dans le cas de personnes qui risquent une maladie cardiovasculaire. La molécule est sous la marque commerciale Lipitor aux États-Unis.

Mémento => Rappel de numéros atomiques récurrents : H (Z = 1) C (Z = 6) ; N (Z = 7) ; O (Z = 8), F (Z = 9)



Molécule d'atorvastatine

Les atomes de carbone sont numérotés de **1** à **33**. Les atomes d'oxygène sont notés de **a** à **e**. Les atomes d'azote sont notés **α** et **β**.

1 - Considérons l'atome de fluor $^{19}_9\text{F}$. Donner les particules constituant cet atome. A quelle famille chimique appartient-il ? Ecrire sa structure électronique. Quel ion stable est-il susceptible de former ? Justifier votre réponse. Ecrire la structure électronique de cet ion. Comment varie l'électronégativité en descendant dans la famille du fluor ?

2 – Dessiner sur votre copie la structure de Lewis complète de la molécule d'atorvastatine (pour plus de clarté, n'hésitez pas à utiliser différentes couleurs).

3 - Classer les atomes de carbone, d'oxygène, d'azote et de fluor présents dans l'atorvastatine en différentes familles VSEPR distinctes. Donner la géométrie VSEPR idéale autour de l'atome central pour chacune de ces familles, en indiquant la valeur théorique des angles pour ces conformations VSEPR idéales.

En tenant compte de **la délocalisation maximale possible dans cette molécule**:

4 – Déterminer l'hybridation

- des atomes de carbones de C1 à C33.
- des atomes d'oxygène de Oa à Oe
- des atomes d'azote de Na à Nb
- de l'atome de fluor

Lorsque vous le jugerez nécessaire, justifier vos réponses.

5 – Pour chacun des atomes d'oxygène, d'azote et de fluor, spécifier dans quels types d'orbitales se trouvent les doublets libres (ou électrons non-liants). Justifier.

6 – Considérons le motif impliquant les atomes C_4 , C_5 , C_6 , O_a , N_α et l'hydrogène de cet atome d'azote. Dessiner, à l'aide de cases quantiques, le schéma de liaison entre ces différents atomes. Les électrons devront clairement apparaître dans votre schéma, notamment ceux des doublets libres s'il y a lieu.

7 - Combien existe-t-il de systèmes π dans cette molécule? Sur quels atomes se délocalise(nt) le(s) système(s) π ? Décompter le nombre d'électrons présents dans ce(s) système(s) π délocalisé(s). Justifiez vos réponses.

8 - Quels atomes de cette molécule sont susceptibles de former des liaisons hydrogène intra-moléculaires et inter-moléculaires ? Justifier votre réponse. Ne pas hésiter à utiliser des schémas pour expliciter vos réponses. Quels types d'interactions intermoléculaires de « faible énergie », cette molécule est-elle susceptible de former ?

9 – En fait, les trois cycles phényles, composés des atomes C_6 à C_{11} , C_{12} à C_{17} et C_{18} à C_{23} sont soumis à un encombrement stérique important et subissent des rotations importantes autour des liaisons C-C qui les relient au cycle central de type pyrrole. Précisez les sous-groupes d'atomes coplanaires.

10 – Les groupements $-O_bH$, $-O_cH$ et $-C_{33}O_dO_eH$ présentent-ils une acidité de Brønsted ? Si oui, quel est l'ordre attendu pour les pK_a de ces trois groupements ? Justifier votre réponse.