

# TP3 – Dossier moléculaire : choix d'actifs/excipients

## CORRIGÉ DÉTAILLÉ

### Partie A – Lecture des représentations

#### Question 1 (0,5 pt)

Identifier le type de représentation utilisé pour les actifs A/B/C/D.

Les actifs A, B et C sont représentés en **formule topologique** (ou représentation simplifiée avec indication des fonctions). L'actif D est décrit de manière **qualitative** (« plusieurs O/N, groupements capables de liaisons H »).

Barème :

- 0,5 pt : identification correcte

#### Question 2 (1,5 pt)

Pour chaque actif (A, B, C, D), relever 2 indices microscopiques utiles.

Actif A (glycérol) :

- 3 fonctions alcool ( $-\text{OH}$ )
- Chaîne courte (3 carbones)

Actif B (éthanol) :

- 1 fonction alcool ( $-\text{OH}$ )
- Chaîne très courte (2 carbones)

Actif C (acide oléique) :

- **1 fonction acide carboxylique** ( $-\text{COOH}$ )
- **Chaîne carbonée très longue** (18 carbones) + 1 double liaison C=C

**Actif D (allantoïne) :**

- **Plusieurs atomes O/N**
- **Plusieurs fonctions** capables de liaisons H ( $-\text{NH}_2$ ,  $-\text{CO}-\text{NH}-$ , C=O)

**Barème :**

- 0,25 pt par indice correct (0,5 pt par actif  $\times$  4 actifs = 2 pts, mais on donne 1,5 pt pour cette question)

## Partie B – Lire une Lewis fournie

### Question 3 (1 pt)

**Sur la Lewis de  $\text{H}_2\text{O}$ , indiquer :**

- **Nombre de doublets non liants sur l'oxygène : 2**
- **$\text{H}_2\text{O}$  peut être donneur de liaison H :  oui** (le H est lié à O)
- **$\text{H}_2\text{O}$  peut être accepteur de liaison H :  oui** (l'O a des doublets non liants)

**Barème :**

- 0,25 pt : nombre de doublets (2)
- 0,25 pt : donneur oui
- 0,5 pt : accepteur oui (plus important car moins évident)

### Question 4 (0,5 pt)

**Sur la Lewis de l'éthanol, entourer le groupement responsable des interactions avec l'eau :**

*Le groupement **-OH** (hydroxyle, fonction alcool).*

**Barème :**

- 0,5 pt : identification correcte du groupe -OH

## Question 5 (1 pt)

Éthanol : donneur / accepteur de liaison H ?

- **Donneur** :  oui (le H du –OH est lié à O)
- **Accepteur** :  oui (l'O du –OH possède des doublets non liants)

Justification :

L'éthanol peut être donneur de liaison H car le H du groupe –OH est lié à un oxygène électronégatif. Il peut aussi être accepteur car l'oxygène possède des doublets non liants (visibles sur la Lewis fournie) qui peuvent attirer un H d'une autre molécule.

Barème :

- 0,25 pt : donneur oui
- 0,25 pt : accepteur oui
- 0,5 pt : justification cohérente

## Question 6 (1 pt)

Conclure : l'éthanol est-il plutôt hydrophile / lipophile / mixte ?

Intermédiaire ("mixte")

Justification :

L'éthanol est **mixte** car il possède une partie **hydrophile** (le groupe –OH qui peut former des liaisons H avec l'eau) et une partie **lipophile** (la chaîne carbonée –CH<sub>2</sub>–CH<sub>3</sub>, même si elle est courte). Cette structure lui confère une solubilité à la fois dans l'eau et dans les solvants organiques. C'est pour ça qu'il est utilisé comme **co-solvant** en cosmétique.

Barème :

- 0,5 pt : choix "mixte"
- 0,5 pt : justification (partie hydrophile + partie lipophile)

# Partie C – Polarité et interactions des actifs

## Question 7 (2 pts)

Compléter pour A, B, C, D : polarité globale attendue + justification.

Actif A (glycérol) :

**Hydrophile**

*Justification : Le glycérol possède **3 fonctions alcool** ( $-OH$ ) qui peuvent former de nombreuses **liaisons H** avec l'eau. La chaîne carbonée est très courte (3 C), donc l'effet hydrophile domine largement.*

Actif B (éthanol) :

**Mixte**

*Justification : L'éthanol a **1 fonction alcool** ( $-OH$ ) hydrophile et une **petite chaîne** carbonée (2 C) lipophile. Les deux effets sont comparables, d'où un caractère mixte (soluble dans l'eau ET dans les huiles).*

Actif C (acide oléique) :

**Lipophile**

*Justification : L'acide oléique a une **très longue chaîne carbonée** (18 C) lipophile. Le groupe  $-COOH$  (polaire) est présent mais ne suffit pas à compenser l'effet hydrophobe de la longue chaîne. Résultat : globalement lipophile.*

Actif D (allantoïne) :

**Hydrophile**

*Justification : L'allantoïne possède **plusieurs atomes O/N** et **plusieurs groupements** capables de liaisons H ( $-NH_2$ ,  $-CO-NH-$ ,  $C=O$ ). Ces nombreux sites hydrophiles rendent la molécule très polaire et hydrophile.*

Barème :

- 0,5 pt par actif (choix + justification)  $\times$  4 = 2 pts

## Question 8 (1 pt)

Expliquer en 3-5 lignes le lien : polarité → interactions avec l'eau → dispersion/stabilité.

Une molécule **polaire** (avec groupes –OH, –COOH, –NH<sub>2</sub>...) peut former des **liaisons hydrogène** avec les molécules d'eau. Ces liaisons H sont suffisamment fortes pour compenser les interactions eau-eau et permettre à la molécule de se **dispenser** dans l'eau (solubilisation). Résultat : la formulation est homogène et stable dans le temps. À l'inverse, une molécule **lipophile** (peu ou pas de groupes polaires) ne forme pas assez de liaisons H avec l'eau, donc elle se sépare de la phase aqueuse → instabilité (démixtion, sédimentation).

Barème :

- 0,5 pt : lien polarité → liaisons H avec eau
- 0,5 pt : lien interactions → dispersion/stabilité

## Question 9 (1 pt)

Pour chaque actif, indiquer les interactions possibles avec l'eau (cocher).

| Actif | London                              | Dipôle-dipôle                       | Liaison H                                    |
|-------|-------------------------------------|-------------------------------------|--|
| A     | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/>          |
| B     | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/>          |
| C     | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> (faible) |
| D     | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/>          |

Explications :

- **London** : toutes les molécules (toujours coché)
- **Dipôle-dipôle** : molécules polaires (A, B, C, D tous polaires ou avec partie polaire)
- **Liaison H** : molécules avec –OH, –NH<sub>2</sub>, –COOH (A, B, C, D)
  - Pour C (acide oléique), la liaison H est possible via le –COOH, mais elle est **faible** car la longue chaîne empêche un bon contact avec l'eau.

Barème :

- 0,25 pt par ligne correcte × 4 = 1 pt

## Question 10 (1,5 pt)

Expliquer en 4-6 lignes pourquoi un actif lipophile se disperse mal dans l'eau.

Un actif **lipophile** (longue chaîne carbonée, peu de groupes polaires) ne peut former que très peu de **liaisons H** avec les molécules d'eau. Or, les molécules d'eau sont liées entre elles par de nombreuses liaisons H très fortes. Pour qu'un actif lipophile se dissolve, il faudrait **casser** ces liaisons eau-eau, mais les interactions eau-actif (seulement London, faibles) ne sont pas suffisamment fortes pour compenser cette dépense énergétique. Résultat : l'eau "préfère" rester avec l'eau, et l'actif lipophile se sépare de la phase aqueuse → **démixtion** (séparation de phases). C'est le principe « le semblable dissout le semblable » : polaire dissout polaire, apolaire dissout apolaire.

Barème :

- 0,5 pt : liaisons H eau-eau fortes
- 0,5 pt : interactions eau-actif lipophile faibles (London)
- 0,5 pt : conclusion : séparation de phases (démixtion)

## Partie D – Exploitation E2

### Question 11 (0,5 pt)

Quel actif correspond le mieux à l'extrait du document 5 ?

A (glycérol) ou  D (allantoïne)

Justification (au moins 2 arguments) :

Pour A (glycérol) :

1. Le document 5 mentionne « bonne affinité avec la phase aqueuse » et « groupements polaires ». Le glycérol possède **3 groupes -OH** qui sont très polaires.

2. Le document indique « interactions avec les molécules d'eau ». Le glycérol peut former de **nombreuses liaisons H** avec l'eau grâce à ses 3 fonctions alcool.

Pour D (allantoïne) :

1. Le document 5 parle de « groupements polaires » et « bonne dispersion ». L'allantoïne possède **plusieurs atomes O/N** et **plusieurs fonctions** ( $-NH_2$ ,  $-CO-NH-$ ) capables de liaisons H → très polaire.

2. Ces nombreux groupements polaires favorisent une **bonne dispersion** et une **stabilité physique** dans la phase aqueuse.

**Barème :**

- 0,5 pt si 2 arguments cohérents fournis (peu importe A ou D, les deux sont acceptables)

## Tableau de synthèse (4 pts)

Compléter le tableau pour A, B, C et D.

### Actif A – Glycérol

| Colonne                    | Réponse attendue  |
|----------------------------|---|
| Indices microscopiques (2) | 3 × –OH ; chaîne C3   |
| Polarité globale           | Hydrophile  |
| Interactions avec l'eau    | London + dipôle + liaison H   |
| Phase cohérente            | Aqueuse   |
| Excipient si besoin        | Aucun (déjà soluble)  |
| Justification (2 lignes)   | <i>Le glycérol possède 3 fonctions alcool qui forment de nombreuses liaisons H avec l'eau. Il est donc très hydrophile et se dissout facilement dans une phase aqueuse.</i> |

### Actif B – Éthanol

| Colonne                    | Réponse attendue    |
|----------------------------|---------------------|
| Indices microscopiques (2) | 1 × –OH ; chaîne C2 |
| Polarité globale           | Mixte               |

| Colonne                         | Réponse attendue   |
|---------------------------------|--|
| <b>Interactions avec l'eau</b>  | London + dipôle + liaison H  |
| <b>Phase cohérente</b>          | Les deux (mixte) → utilisé comme <b>co-solvant</b>   |
| <b>Excipient si besoin</b>      | N/A (c'est lui-même un excipient)  |
| <b>Justification (2 lignes)</b> | <i>L'éthanol est mixte (partie polaire –OH + partie apolaire C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>). Il est soluble dans l'eau ET dans les huiles, ce qui en fait un excellent <b>co-solvant</b> pour solubiliser des actifs lipophiles dans une phase aqueuse.</i> |

## Actif C – Acide oléique

| Colonne                           | Réponse attendue   |
|-----------------------------------|--|
| <b>Indices microscopiques (2)</b> | 1 × –COOH ; chaîne C <sub>18</sub> (longue)  |
| <b>Polarité globale</b>           | Lipophile  |
| <b>Interactions avec l'eau</b>    | London + dipôle faible + liaison H faible  |
| <b>Phase cohérente</b>            | Huileuse   |
| <b>Excipient si besoin</b>        | <b>Tensioactif/émulsifiant</b> (pour émulsionner dans une phase aqueuse)   |
| <b>Justification (2 lignes)</b>   | <i>L'acide oléique a une très longue chaîne carbonée (C<sub>18</sub>) qui domine le comportement de la molécule. Le groupe –COOH ne suffit pas à compenser l'effet hydrophobe. Résultat : lipophile, adapté à une phase huileuse. Pour l'intégrer à une phase aqueuse, il faut un tensioactif.</i> |

## Actif D – Allantoïne

| Colonne                    | Réponse attendue  |
|----------------------------|---|
| Indices microscopiques (2) | Plusieurs O/N ; fonctions $-NH_2$ , $-CO-NH-$   |
| Polarité globale           | Hydrophile  |
| Interactions avec l'eau    | London + dipôle + liaison H   |
| Phase cohérente            | Aqueuse   |
| Excipient si besoin        | Aucun (déjà soluble)  |
| Justification (2 lignes)   | <i>L'allantoïne possède plusieurs atomes O/N et plusieurs groupements capables de liaisons H (<math>-NH_2</math>, <math>-CO-NH-</math>). Elle est donc très polaire et hydrophile, adaptée à une phase aqueuse.</i> |

Barème tableau :

- 1 pt par actif (colonnes cohérentes entre elles)  $\times$  4 = 4 pts

## Synthèse détaillée (Q12-13) – 3 pts

### Question 12 (2 pts)

Rédiger une conclusion argumentée (6-8 lignes) : Cet actif est-il plus adapté à une formulation aqueuse ou huileuse ?

Exemple de réponse pour l'actif A (glycérol) :

Le glycérol (actif A) est **adapté à une formulation aqueuse**. D'après le **Document 1**, il possède **3 fonctions alcool** ( $-OH$ ) sur une chaîne courte (C3). Ces groupes  $-OH$  sont des **groupements polaires** (Document 3 et 5) qui peuvent former de **nombreuses liaisons hydrogène** avec les molécules d'eau (Document 2 et 4). Résultat : le glycérol est très **hydrophile** et se dissout facilement dans l'eau. Le **Document 5** confirme qu'un actif avec « groupements polaires » et « bonne affinité avec la phase aqueuse » correspond bien au glycérol. Je recommande donc une **formulation aqueuse** : crème, serum, lotion. Aucun excipient n'est nécessaire car le glycérol est déjà très soluble dans l'eau.

**Barème :**

- 0,5 pt : exploitation d'au moins 2 documents (citatio explicite)
- 0,5 pt : mobilisation polarité (hydrophile/lipophile)
- 0,5 pt : mobilisation interactions (liaisons H)
- 0,5 pt : choix professionnel clair et cohérent (« Je recommande... »)

## Question 13 (1 pt)

Si l'actif choisi est lipophile, proposer un type d'excipient et justifier (3-4 lignes).

Exemple de réponse pour l'actif C (acide oléique) :

**Tensioactif / émulsifiant**

L'acide oléique est **lipophile** (longue chaîne C18). Pour l'intégrer à une lotion aqueuse, je recommande un **tensioactif/émulsifiant**. Le tensioactif possède une partie hydrophile (qui interagit avec l'eau) et une partie lipophile (qui interagit avec l'acide oléique). Il va entourer les gouttelettes d'acide oléique et les stabiliser dans l'eau sous forme d'**émulsion** (huile dans eau, H/E). Exemples : polysorbate 80, lécithine.

**Barème :**

- 0,5 pt : choix correct (tensioactif pour un actif lipophile dans phase aqueuse)
- 0,5 pt : justification (stabilisation gouttelettes, émulsion H/E)

## Barème récapitulatif (sur 20)

| Partie | Question | Points |
|--------|----------|--------|
| A      | Q1       | 0,5    |
| A      | Q2       | 1,5    |
| B      | Q3       | 1      |
| B      | Q4       | 0,5    |
| B      | Q5       | 1      |
| B      | Q6       | 1      |

| <b>Partie</b> | <b>Question</b> | <b>Points</b> |
|---------------|-----------------|---------------|
| C             | Q7              | 2             |
| C             | Q8              | 1             |
| C             | Q9              | 1             |
| C             | Q10             | 1,5           |
| D             | Q11             | 0,5           |
| D             | Tableau         | 4             |
| D             | Q12             | 2             |
| D             | Q13             | 1             |
| <b>TOTAL</b>  |                 | <b>/20</b>    |

## Critères de réussite E2

| <b>Critère</b>                    | <b>Indicateur</b>  |
|-----------------------------------|--|
| <b>Exploitation des documents</b> | Au moins 2 documents cités explicitement dans Q12                    |
| <b>Argumentation</b>              | Au moins 2 arguments cohérents (structure + interactions)            |
| <b>Posture professionnelle</b>    | Recommandation claire (« Je recommande... », « Je propose... »)      |
| <b>Cohérence</b>                  | Lien logique structure → polarité → interactions → phase → excipient |