

TP 3 – Dossier moléculaire : choix d'actifs/excipients

✓ Corrigé – Logique E2 (S15 – TP3)

✦ Ce TP est **non évalué** : le corrigé sert de **référence d'attendus** (lecture de docs → argumentation → décision).

Partie A – Lecture des représentations (Document 1)

1. Type de représentations (Q1)

Attendus :

- Doc 1 fournit surtout :
 - des **formules semi-développées / écritures simplifiées** (A, B, C),
 - un **repère qualitatif** (D : plusieurs O/N, fonctions polaires).
- Ces représentations permettent de **repérer des groupements** et d'anticiper **polarité + interactions**.

✓ Formulations acceptées :

« formule semi-développée », « écriture simplifiée », « représentation structurale », « repère qualitatif ».

2. Deux indices microscopiques par actif (Q2)

Attendus (exemples possibles) :

- **A (glycérine)**
 - 3 groupes **-OH**
 - plusieurs atomes **O** (sites accepteurs)
 - forte capacité à faire des **liaisons H**
- **B (éthanol)**
 - 1 groupe **-OH**
 - petite chaîne carbonée **C2** (partie apolaire)
 - polarité **intermédiaire**
- **C (acide gras)**

- très longue chaîne **hydrocarbonée** (C–C/C–H)
- 1 fonction **–COOH** (polaire mais minoritaire)
- molécule globalement **lipophile**
- **D (polyfonctionnel type allantoïne)**
 - plusieurs atomes **O/N**
 - plusieurs sites donneurs/accepteurs → **liaisons H**
 - molécule très **polaire** (qualitatif)

Partie B – Lire une Lewis fournie (Document 2)

3. Lewis de l'eau (Q3)

- Nombre de **doublets non liants** sur l'oxygène : **2**
- H₂O donneur de liaison H ? **Oui**
 - ✓ car H est lié à O (donneur possible)
- H₂O accepteur de liaison H ? **Oui**
 - ✓ car O porte des doublets non liants (accepteur)

4. Groupement responsable des interactions eau/éthanol (Q4)

- Groupement à entourer/citer : **–OH** (liaison O–H + O avec doublets)

5. Éthanol : donneur / accepteur de liaison H (Q5)

- Donneur : **Oui** (présence de **O–H**)
 - Accepteur : **Oui** (l'oxygène porte des **doublets non liants**)
- Justification (1 phrase attendue) :

« L'éthanol possède un groupement –OH : le H lié à O peut être donneur, et l'O avec doublets peut être accepteur. »

6. Nature globale de l'éthanol (Q6)

Réponse attendue : **intermédiaire** (“mixte”)

Justification (2 lignes) :

« Il possède une partie polaire (–OH) capable de liaisons H, et une partie apolaire (chaîne carbonée). Il est donc partiellement hydrophile mais pas totalement. »

Partie C – Polarité et interactions des actifs

7. Polarité globale A/B/C/D (Q7)

Attendus :

- **A : hydrophile**
(3 –OH → forte polarité, nombreuses liaisons H avec l'eau)
- **B : mixte / intermédiaire**
(1 –OH + petite chaîne apolaire)
- **C : lipophile (globalement)**
(chaîne longue apolaire majoritaire, –COOH minoritaire)
- **D : hydrophile (très polaire)**
(nombreux O/N → nombreuses liaisons H possibles)

8. Lien polarité → interactions → dispersion/stabilité (Q8)

Réponse type (3–5 lignes) :

« Une molécule polaire interagit fortement avec l'eau (dipôle–dipôle et surtout liaisons hydrogène), ce qui favorise sa dispersion/solubilité et améliore la stabilité physique. À l'inverse, une molécule apolaire n'établit que des interactions faibles avec l'eau (London), insuffisantes face aux interactions eau–eau : elle se regroupe → gouttelettes, trouble puis séparation de phases. »

9. Interactions possibles avec l'eau (Q9)

Tableau attendu :

Actif	London	Dipôle–dipôle	Liaison H
A	✓	✓	✓
B	✓	✓	✓ (possible via –OH)
C	✓	□/ ✓ (faible)	□/ ✓ (possible via –COOH mais globalement limité)

Actif	London	Dipôle–dipôle	Liaison H
D	✓	✓	✓

✦ Remarque importante (acceptée si bien expliquée) :

Pour **C**, on accepte :

- « London seulement » si l'élève justifie que la partie apolaire domine,
- ou « liaison H possible via $-\text{COOH}$ » si l'élève précise que cela **ne suffit pas** à rendre l'ensemble hydrophile.

10. Pourquoi un actif lipophile se disperse mal dans l'eau ? (Q10)

Réponse type (4–6 lignes) :

« L'eau est polaire et ses molécules sont fortement liées entre elles par liaisons hydrogène. Un actif lipophile est majoritairement apolaire : il n'établit avec l'eau que des interactions faibles (London), insuffisantes pour compenser les interactions eau–eau. Le système minimise alors le contact eau/lipophile : formation de gouttelettes, agrégation puis séparation en deux phases. »

Mots-clés attendus : **eau polaire / liaisons H / interactions eau–eau fortes / eau–actif faibles / séparation.**

Partie D – Exploitation E2 : argumenter et décider

11. Actif correspondant au dossier “bonne affinité phase aqueuse” (Q11)

Réponse attendue : **A (glycérine)**

Justifications attendues (au moins 2) :

- 3 groupes $-\text{OH}$ → très polaire
- nombreuses liaisons H possibles avec l'eau
- forte dispersion/solubilité en phase aqueuse
- cohérent avec stabilité physique mentionnée

✓ **D** peut être accepté si argumenté (très polaire, O/N nombreux, liaisons H), mais l'extrait “profil typique” correspond très bien à **A**.

12. Synthèse E2-like (Q12) – sur l'actif choisi

Attendu : 6–8 lignes structurées, mobilisant polarité + interactions + décision.

Exemples de synthèse attendue (modèles) :

Si l'élève choisit A (glycérine)

« L'actif A possède trois groupements –OH (doc 1), ce qui le rend très polaire (doc 3). Il peut établir de nombreuses liaisons hydrogène avec l'eau, comme le montre le repère donneur/accepteur (doc 2) et les interactions du doc 4. Ces interactions fortes favorisent sa dispersion en phase aqueuse et contribuent à la stabilité physique. L'actif A est donc clairement adapté à une formulation aqueuse, cohérente avec une lotion hydratante (doc 5). »

Si l'élève choisit B (éthanol)

« L'actif B possède un groupement –OH (doc 1). La Lewis fournie montre qu'il peut être donneur et accepteur de liaison H (doc 2), ce qui lui permet d'interagir avec l'eau. Cependant, sa chaîne carbonée apporte une partie apolaire : sa polarité est intermédiaire (doc 3). Il est donc plutôt adapté à une formulation aqueuse, mais peut aussi servir de co-solvant selon la formule (doc 4–5). »

Si l'élève choisit C (acide gras)

« L'actif C contient une longue chaîne hydrocarbonée majoritairement apolaire (doc 1). Même si la fonction –COOH est polaire, l'ensemble reste globalement lipophile (doc 3). Les interactions avec l'eau sont insuffisantes (doc 4) face aux interactions eau–eau (liaisons H), ce qui conduit à une mauvaise dispersion et à des séparations de phases. L'actif C est donc plus adapté à une phase huileuse, ou nécessite un excipient si on veut l'intégrer à une lotion aqueuse. »

Si l'élève choisit D (polyfonctionnel)

« L'actif D est décrit comme polyfonctionnel avec plusieurs O/N (doc 1), ce qui indique une forte polarité (doc 3). Il peut établir de nombreuses liaisons hydrogène avec l'eau (doc 2–4), ce qui favorise sa dispersion et la stabilité en phase aqueuse. Il est donc cohérent en formulation aqueuse, en lien avec le dossier (doc 5). »

✓ Critères de réussite :

- au moins **2 documents** cités/ exploités
- lien explicite : **structure** → **polarité** → **interactions** → **propriété** → **décision**
- rédaction claire, courte, justifiée

13. Excipient si l'actif choisi est lipophile (Q13)

Attendu : choix d'1 type + justification 3–4 lignes.

Réponses acceptées :

- **Solubilisant** (souvent adapté pour incorporer un parfum/huile en petite quantité dans une phase aqueuse)

Justification type :

« Un solubilisant possède une partie hydrophile et une partie lipophile : il permet de “piéger” le composé lipophile et de le disperser dans l'eau (micelles). Cela évite le trouble et limite la séparation en deux phases. »

- **Tensioactif / émulsifiant** (si l'objectif est une dispersion stable huile/eau)

Justification type :

« Un tensioactif diminue la tension interfaciale et stabilise une dispersion de gouttelettes lipophiles dans l'eau. On obtient une émulsion plus stable, limitant le déphasage. »

- **Co-solvant** (si cohérent, ex : alcool)

Justification type :

« Un co-solvant interagit avec l'eau (liaisons H) tout en ayant une affinité pour une partie organique : il peut améliorer la solubilisation d'une faible fraction lipophile dans une lotion aqueuse. »

⚠ Attendu E2 : l'élève doit relier l'excipient à la logique **interactions** / compatibilité.

Tableau de synthèse – attendu (exemple)

Actif	Indices (2)	Polarité	Interactions avec l'eau	Phase cohérente	Excipient si besoin	Justification
A	3×–OH ; O nombreux	hydrophile	London + dipôle + H	aqueuse	aucun	interactions fortes avec eau
B	–OH ; chaîne C2	mixte	London + dipôle + H	aqueuse (souvent)	co-solvant possible	affinité partielle eau
C	chaîne longue ; – COOH	lipophile (globalement)	London surtout (H possible localement)	huileuse	solubilisant/ émulsifiant	interactions eau– actif faibles

Actif	Indices (2)	Polarité	Interactions avec l'eau	Phase cohérente	Excipient si besoin	Justification
D	O/N nombreux ; sites H	hydrophile	London + dipôle + H	aqueuse	aucun	dispersion/stabilité en eau