Synthèse verte du phénol

Bac S 2014 Métropole rattrapage (ancien programme) · Exercice 1 **5 points** **Durée conseillée 50 min**

1 Quelle valeur maximale l'économie d'atomes EA peut-elle atteindre ? Justifier simplement.

Au cours d'une transformation chimique, la masse se conserve : la somme des masses molaires des réactifs, pondérées par les nombres stœchiométriques, est égale à celle de tous les produits.

Les produits désirés ne sont qu'une partie (au mieux la totalité) des produits formés, donc le numérateur de EA ne peut pas dépasser son dénominateur.

La valeur maximale est atteinte quand tous les atomes des réactifs se retrouvent dans le produit recherché : la synthèse ne forme alors aucun sous-produit.

$EA_{\max} = 1$, soit $100\ \%$: aucun déchet n'est formé.

PIÈGE
Confondre économie d'atomes et rendement. Un rendement de $100\ \%$ n'empêche pas la formation de sous-produits : EA ne dépend que de l'équation de la réaction, pas des quantités réellement obtenues.

COMPRENDRE
La chimie verte et l'économie d'atomes ne figurent plus au programme actuel de spécialité. L'exercice reste un bon entraînement : formules topologiques, équation bilan, masses molaires, catalyse.

2 Écrire l'équation de la réaction qui modélise la synthèse du phénol pour chacun des deux procédés.

Données utiles Formules brutes lues sur les formules topologiques : benzène C_6H_6 ; propène C_3H_6 ; cumène C_9H_{12} ; hydroperoxyde de cumène $C_9H_{12}O_2$; phénol C_6H_6O ; propanone C_3H_6O ; acide éthanoïque $C_2H_4O_2$; éthanoate de phényle $C_8H_8O_2$

Procédé n°1. Les trois étapes s'écrivent :

$C_6H_6 + C_3H_6 \longrightarrow C_9H_{12}$

$C_9H_{12} + O_2 \longrightarrow C_9H_{12}O_2$

$C_9H_{12}O_2 \longrightarrow C_6H_6O + C_3H_6O$

Le cumène et l'hydroperoxyde, formés puis entièrement consommés, disparaissent de la somme des trois équations :

$$C_6H_6 + C_3H_6 + O_2 \longrightarrow C_6H_6O + C_3H_6O$$

Procédé n°2. Les deux étapes s'écrivent :

$2\,C_6H_6 + O_2 + 2\,C_2H_4O_2 \longrightarrow 2\,C_8H_8O_2 + 2\,H_2O$

$2\,C_8H_8O_2 + 2\,H_2O \longrightarrow 2\,C_2H_4O_2 + 2\,C_6H_6O$

L'ester et l'eau sont formés puis consommés ; l'acide éthanoïque, consommé puis régénéré en même quantité, se simplifie aussi :

$$2\,C_6H_6 + O_2 \longrightarrow 2\,C_6H_6O$$

Procédé n°1 : $C_6H_6 + C_3H_6 + O_2 \longrightarrow C_6H_6O + C_3H_6O$; procédé n°2 : $2\,C_6H_6 + O_2 \longrightarrow 2\,C_6H_6O$

PIÈGE
Dans une formule topologique, chaque sommet est un carbone qui porte assez d'hydrogènes pour avoir quatre liaisons. Le carbone du cycle lié à un substituant n'en porte aucun : le cumène est C_9H_{12}.

MÉTHODE
Équation d'une synthèse en plusieurs étapes : écrire chaque étape en formules brutes, additionner membre à membre, simplifier les espèces présentes des deux côtés, puis vérifier la conservation de C, H et O.

3 Calculer la valeur de l'économie d'atomes pour le procédé n°1, le phénol étant la seule espèce chimique désirée.

Données utiles $M(\mathrm{C}) = 12{,}0\ \mathrm{g \cdot mol^{-1}}$; $M(\mathrm{O}) = 16{,}0\ \mathrm{g \cdot mol^{-1}}$; $M(\mathrm{H}) = 1{,}0\ \mathrm{g \cdot mol^{-1}}$; équation du procédé n°1 (Q2)

Tous les nombres stœchiométriques valent 1 et le seul produit désiré est le phénol :

$$EA = \frac{M(\mathrm{C_6H_6O})}{M(\mathrm{C_6H_6}) + M(\mathrm{C_3H_6}) + M(\mathrm{O_2})}$$

Masses molaires, en $\mathrm{g \cdot mol^{-1}}$:

$M(\mathrm{C_6H_6O}) = 6 \times 12{,}0 + 6 \times 1{,}0 + 16{,}0 = 94{,}0$

$M(\mathrm{C_6H_6}) = 6 \times 12{,}0 + 6 \times 1{,}0 = 78{,}0$

$M(\mathrm{C_3H_6}) = 3 \times 12{,}0 + 6 \times 1{,}0 = 42{,}0$

$M(\mathrm{O_2}) = 2 \times 16{,}0 = 32{,}0$

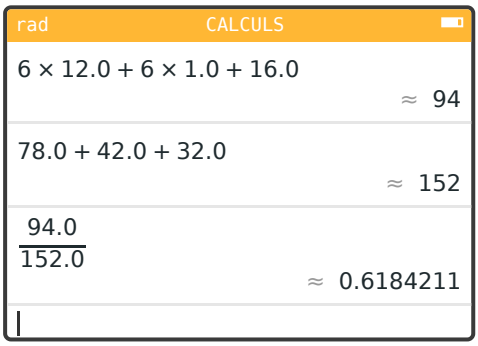
$$EA = \frac{94{,}0}{78{,}0 + 42{,}0 + 32{,}0} = \frac{94{,}0}{152{,}0} = 0{,}618$$

$EA_1 = 0{,}618$, soit $61{,}8\ \%$

PIÈGE
Oublier le dioxygène au dénominateur, ou placer la propanone au numérateur alors que l'énoncé impose le phénol comme seul produit désiré.

COMPRENDRE
Trois chiffres significatifs, comme $94{,}0$. EA est un rapport de masses molaires, donc sans unité. Les $38{,}2\ \%$ restants de la masse des réactifs se retrouvent dans la propanone.

À LA CALCULATRICE



4 Indiquer, en le justifiant précisément, le procédé le plus performant au regard des principes de la chimie verte. De quelles autres informations faudrait-il disposer pour compléter la réponse ?

Données utiles $EA_1 = 0{,}618$ (Q3) ; équations des deux procédés (Q2) ; pictogrammes et origine du propène et de la propanone ; conditions opératoires du document 3

Économie d'atomes. Pour le procédé n°2, le phénol est l'unique produit de l'équation bilan :

$$EA_2 = \frac{2\,M(\mathrm{C_6H_6O})}{2\,M(\mathrm{C_6H_6}) + M(\mathrm{O_2})} = \frac{2 \times 94{,}0}{2 \times 78{,}0 + 32{,}0} = \frac{188{,}0}{188{,}0} = 1$$

$EA_2 > EA_1$: le procédé n°2 atteint la valeur maximale et ne forme aucun déchet, alors que le procédé n°1 forme une mole de propanone par mole de phénol.

Sécurité, matières premières. Le procédé n°1 utilise du propène (inflammable, gaz sous pression, issu du pétrole donc non renouvelable) et produit de la propanone (inflammable, irritante). Il emploie aussi des milieux acides et basiques. Le procédé n°2 n'utilise, outre le benzène commun aux deux, que l'air et de l'acide éthanoïque régénéré.

Catalyse. Les deux procédés sont catalysés. Le procédé n°2 compte deux étapes au lieu de trois.

Énergie. C'est le point faible du procédé n°2 : $200\ ^\circ\mathrm{C}$ puis $600\ ^\circ\mathrm{C}$, contre $190\ ^\circ\mathrm{C}$, $110\ ^\circ\mathrm{C}$ et $50\ ^\circ\mathrm{C}$ pour le procédé n°1, qui demande en revanche des pressions élevées (34 bar, puis 5 à 10 bar).

Nuance. La propanone est un solvant très utilisé : si elle est valorisée, elle n'est plus un déchet et EA_1 vaut alors 1.

Informations manquantes : rendement et durée de chaque étape ; énergie réellement consommée ; toxicité du benzène, des intermédiaires et des catalyseurs, et possibilité de recycler ces derniers ; solvants et méthodes de purification du phénol ; coûts.

Le procédé n°2 paraît le plus performant : $EA_2 = 1$ contre $EA_1 = 0{,}618$, réactifs moins dangereux, pas de sous-produit ; son besoin en énergie est toutefois plus élevé.

PIÈGE

Conclure sur la seule économie d'atomes. La question demande une justification précise : il faut exploiter les pictogrammes, les températures et l'origine pétrolière du propène, puis répondre à la seconde partie de la question.

MÉTHODE

Pour comparer deux procédés, parcourir les principes du document 1 un par un (déchets, économie d'atomes, risques, matières premières, catalyse, énergie) et citer pour chacun une donnée précise de l'énoncé.

À LA CALCULATRICE

