Estérification

Bac S 2004 Polynésie rattrapage (ancien programme) · Exercice 3 **4 points** **Durée conseillée 52 min**

1.1 Donner le nom de l'alcool A et la formule semi-développée de l'acide benzoïque.

Données utiles ester : benzoate de méthyle $C_6H_5-COO-CH_3$; $M(\text{A}) = 32\ \text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$

Dans l'ester $C_6H_5-COO-CH_3$, le groupe C_6H_5-CO- provient de l'acide benzoïque et le groupe $-O-CH_3$ provient de l'alcool, qui est donc CH_3-OH.

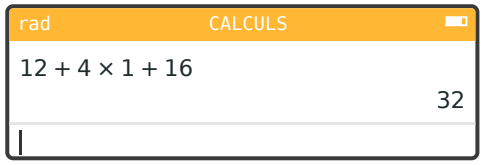
Vérification : $M(CH_4O) = 12 + 4\times 1 + 16 = 32\ \text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$, valeur du tableau.

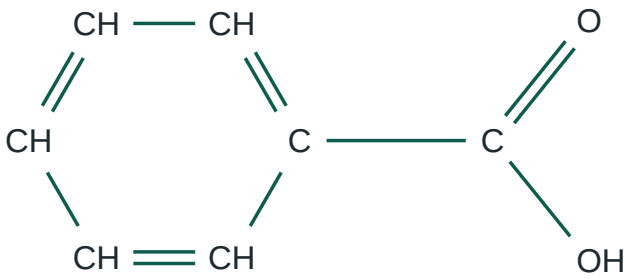
Acide benzoïque : un cycle benzénique lié à un groupe carboxyle, C_6H_5-COOH (formule ci-dessous).

L'alcool A est le **méthanol** CH_3-OH ; l'acide benzoïque a pour formule C_6H_5-COOH.

MÉTHODE
Nom d'un ester : « -oate » désigne la chaîne de l'acide carboxylique, « de -yle » celle de l'alcool. Benzoate de méthyle : acide benzoïque et alcool à un seul carbone.

À LA CALCULATRICE





1.1 · Formule semi-développée de l'acide benzoïque

1.2 Écrire l'équation de la réaction d'estérification.

Un acide carboxylique réagit avec un alcool pour donner un ester et de l'eau :

$$C_6H_5-COOH + CH_3-OH = C_6H_5-COO-CH_3 + H_2O$$

COMPRENDRE
Le signe « = » rappelle que la transformation est limitée : l'hydrolyse de l'ester se produit en sens inverse. L'acide sulfurique est un catalyseur, il ne figure pas dans l'équation.

2.1 Dresser le tableau d'avancement de la transformation pour le mélange équimolaire.

Données utiles $n = 0{,}20$ mol d'alcool A et $n = 0{,}20$ mol d'acide benzoïque

Quantités de matière et avancement en mol :

État	Avanc.	C_6H_5COOH	$+\ CH_3OH$	$=\ C_6H_5COOCH_3$	$+\ H_2O$
initial	0	0,20	0,20	0	0
en cours	x	$0{,}20 - x$	$0{,}20 - x$	x	x
équilibre	$x_{éq}$	$0{,}20 - x_{éq}$	$0{,}20 - x_{éq}$	$x_{éq}$	$x_{éq}$

État final : $n(\text{acide}) = n(\text{alcool}) = 0{,}20 - x_{éq}$ et $n(\text{ester}) = n(\text{eau}) = x_{éq}$.

PIÈGE
Écrire « solvant » ou « excès » dans la colonne de l'eau. Ici le milieu n'est pas aqueux : l'eau est un produit comme l'ester, sa quantité vaut x.

2.2 Écrire l'expression littérale du quotient de réaction à l'équilibre $Q_{r,éq}$, donner sa valeur et en déduire la valeur de l'avancement à l'équilibre $x_{éq}$.

Données utiles $K = 4$; $n = 0{,}20$ mol ; tableau d'avancement (2.1)

En notant V le volume du mélange :

$$Q_{r,éq} = \frac{[C_6H_5COOCH_3]_{éq}\,[H_2O]_{éq}}{[C_6H_5COOH]_{éq}\,[CH_3OH]_{éq}} = \frac{\frac{x_{éq}}{V} \times \frac{x_{éq}}{V}}{\frac{n - x_{éq}}{V} \times \frac{n - x_{éq}}{V}} = \frac{x_{éq}^2}{(n - x_{éq})^2}$$

À l'équilibre, le quotient de réaction est égal à la constante d'équilibre : $Q_{r,éq} = K = 4$.

Comme $x_{éq}$ et $n - x_{éq}$ sont positifs, on prend la racine carrée : $\frac{x_{éq}}{n - x_{éq}} = \sqrt{K}$, d'où $x_{éq} = \sqrt{K}\,(n - x_{éq})$ puis

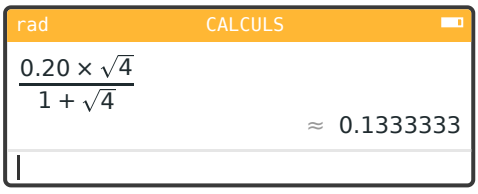
$$x_{éq} = \frac{n\sqrt{K}}{1 + \sqrt{K}} = \frac{0{,}20 \times \sqrt{4}}{1 + \sqrt{4}} = 0{,}13 \text{ mol}$$

$Q_{r,éq} = K = 4$ et $x_{éq} = 0{,}13$ mol

COMPRENDRE
L'eau n'est pas le solvant, sa concentration figure donc dans Q_r. Le volume V se simplifie : inutile de le connaître. Résultat à deux chiffres significatifs, comme $0{,}20$ mol.

MÉTHODE
Mélange équimolaire : le quotient est un carré parfait, la racine carrée évite l'équation du second degré. Garder $x_{éq} = 0{,}1333$ mol en mémoire pour les questions suivantes.

À LA CALCULATRICE



2.3 Exprimer le taux d'avancement final τ de cette réaction puis le calculer.

Données utiles $x_{éq} = 0{,}133$ mol (2.2) ; $n = 0{,}20$ mol

Par définition : $\tau = \frac{x_{éq}}{x_{max}}$.

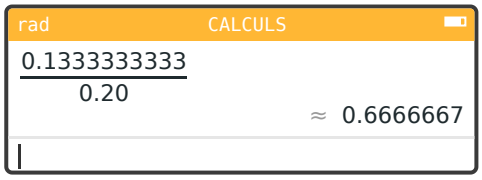
Si la transformation était totale, les deux réactifs, introduits en quantités égales, seraient entièrement consommés : $n - x_{max} = 0$, soit $x_{max} = n = 0{,}20$ mol.

$$\tau = \frac{x_{éq}}{n} = \frac{0{,}133}{0{,}20} = 0{,}67$$

$\tau = 0{,}67$, soit $67\ \%$

PIÈGE
Calculer avec la valeur arrondie $0{,}13$ mol donne $0{,}65$: l'arrondi se fait seulement à la fin.

À LA CALCULATRICE



2.4 Déterminer la composition du mélange final.

Données utiles $x_{éq} = 0{,}133$ mol (2.2) ; tableau d'avancement (2.1)

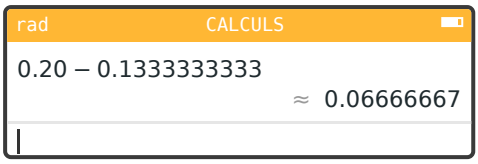
On lit la dernière ligne du tableau d'avancement.

- Produits : $n(\text{ester}) = n(\text{eau}) = x_{éq} = 0{,}13$ mol.
- Réactifs restants : $n(\text{acide}) = n(\text{alcool}) = n - x_{éq} = 0{,}20 - 0{,}133 = 0{,}067$ mol.

$0{,}13$ mol de benzoate de méthyle, $0{,}13$ mol d'eau, $0{,}067$ mol d'acide benzoïque et $0{,}067$ mol de méthanol.

MÉTHODE
Contrôle rapide : avec ces quantités, $Q_r = \left(\frac{0{,}133}{0{,}067}\right)^2 \approx 4$, on retrouve bien K.

À LA CALCULATRICE



2.5 Pour un nouveau mélange initial, calculer la valeur de l'avancement à l'équilibre $x'_{éq}$ (équation du second degré).

Données utiles $n_1 = 0{,}20$ mol d'acide benzoïque ; $n_2 = 0{,}50$ mol d'alcool A ; $K = 4$

À l'équilibre, il reste $n_1 - x'_{éq}$ d'acide et $n_2 - x'_{éq}$ d'alcool ; il s'est formé $x'_{éq}$ d'ester et $x'_{éq}$ d'eau. Le volume se simplifie encore :

$$Q_{r,éq} = \frac{x'^2_{éq}}{(n_1 - x'_{éq})(n_2 - x'_{éq})} = K$$

Avec les valeurs (en mol) : $4\,(0{,}20 - x'_{éq})(0{,}50 - x'_{éq}) = x'^2_{éq}$

En développant : $0{,}40 - 2{,}8\,x'_{éq} + 4\,x'^2_{éq} = x'^2_{éq}$, soit

$$3\,x'^2_{éq} - 2{,}8\,x'_{éq} + 0{,}40 = 0$$

Discriminant : $\Delta = 2{,}8^2 - 4 \times 3 \times 0{,}40 = 3{,}04$. Les deux solutions sont

$$\frac{2{,}8 - \sqrt{3{,}04}}{6} = 0{,}18 \text{ mol} \quad \text{et} \quad \frac{2{,}8 + \sqrt{3{,}04}}{6} = 0{,}76 \text{ mol}$$

L'acide benzoïque est le réactif limitant : $x_{max} = n_1 = 0{,}20$ mol. L'avancement ne peut pas dépasser x_{max}, la solution $0{,}76$ mol est donc exclue.

$$\boxed{x'_{éq} = 0{,}18 \text{ mol}}$$

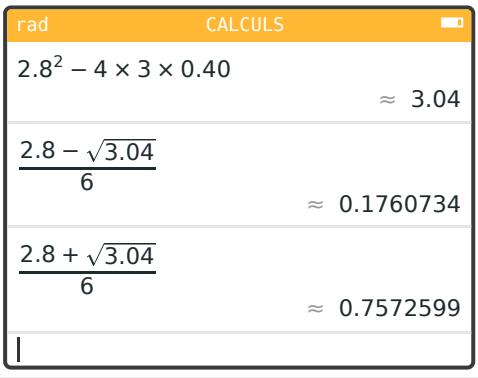
PIÈGE

Donner les deux racines sans choisir. Une seule a un sens chimique : celle qui est comprise entre 0 et $x_{max} = 0{,}20$ mol.

COMPRENDRE

Le mélange n'est plus équimolaire : le dénominateur n'est plus un carré, la racine carrée de la question 2.2 ne s'applique pas.

À LA CALCULATRICE



2.6 En déduire le taux d'avancement final. Que peut-on conclure de l'influence des proportions initiales des réactifs sur le déplacement de l'équilibre ?

Données utiles $x'_{éq} = 0{,}176$ mol (2.5) ; $x_{max} = 0{,}20$ mol ; $\tau = 0{,}67$ (2.3)

$$\tau' = \frac{x'_{éq}}{x_{max}} = \frac{0{,}176}{0{,}20} = 0{,}88$$

Avec la même quantité d'acide benzoïque, le taux d'avancement final passe de $67\ \%$ (mélange équimolaire) à $88\ \%$ (alcool en excès).

$\tau' = 0{,}88$, soit $88\ \%$: introduire un réactif en excès déplace l'équilibre dans le sens direct, celui de la formation de l'ester.

COMPRENDRE

La constante K n'a pas changé : seul l'état d'équilibre atteint est différent. On met en excès le réactif le moins coûteux, ici le méthanol, pour mieux transformer l'autre.

À LA CALCULATRICE

