Optimisation de la synthèse de l'éthanoate de benzyle

Bac 2023 Amérique du Nord Jour 2 · Exercice 2 **5 points** **Durée conseillée 53 min**

Q.1 Donner la formule brute de l'alcool benzylique.

La molécule comporte 7 atomes de carbone (6 dans le cycle, 1 dans le groupe CH_2), 8 atomes d'hydrogène (5 sur le cycle, 2 sur CH_2, 1 sur OH) et 1 atome d'oxygène.

Formule brute de l'alcool benzylique : C_7H_8O

MÉTHODE
En formule topologique, chaque sommet ou extrémité de trait est un carbone, complété par des hydrogènes jusqu'à quatre liaisons. Un carbone du cycle benzénique porte un seul H, sauf celui qui porte la chaîne.

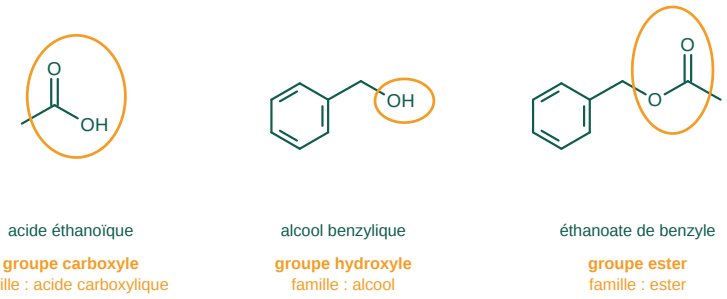
Q.2 Recopier les trois formules topologiques, entourer les groupes caractéristiques et préciser pour chacun la famille fonctionnelle correspondante.

Voir les formules recopiées ci-dessous.

- Acide éthanoïque : groupe carboxyle $-COOH$, famille des acides carboxyliques.
- Alcool benzylique : groupe hydroxyle $-OH$, famille des alcools.
- Éthanoate de benzyle : groupe ester $-COO-$, famille des esters.

Carboxyle : acide carboxylique ; hydroxyle : alcool ; groupe ester : ester.

PIÈGE
Dans l'acide, entourer seulement OH et répondre « alcool », ou seulement $C{=}O$. Le groupe carboxyle forme un tout : le carbone, l'oxygène doublement lié et le OH.



acide éthanoïque — **groupe carboxyle** — famille : acide carboxylique

alcool benzylique — **groupe hydroxyle** — famille : alcool

éthanoate de benzyle — **groupe ester** — famille : ester

Q.2 · Les trois formules topologiques, groupes caractéristiques entourés

Q.3 Préciser laquelle des molécules A et B est un isomère de l'alcool benzylique. Justifier.

Données utiles alcool benzylique : C_7H_8O (Q.1)

Deux isomères ont la même formule brute, mais des formules développées différentes.

- Molécule A : 8 atomes de carbone (6 dans le cycle et 2 groupes méthyle), formule brute $C_8H_{12}O$.
- Molécule B : 7 atomes de carbone (6 dans le cycle et 1 groupe méthyle), formule brute C_7H_8O, avec un enchaînement d'atomes différent de celui de l'alcool benzylique ($C-O-C$ au lieu de $C-OH$).

La molécule B est un isomère de l'alcool benzylique : même formule brute C_7H_8O.

MÉTHODE
Pour écarter une molécule, compter les carbones suffit : A en possède 8 au lieu de 7. Pour confirmer un isomère, il faut la formule brute complète.

Q.4 La synthèse est une transformation lente : citer deux conditions expérimentales qui peuvent la rendre plus rapide.

- Augmenter la température du mélange réactionnel (chauffage à reflux) : la température est un facteur cinétique.
- Ajouter un catalyseur, par exemple quelques gouttes d'acide sulfurique concentré.

Chauffer le mélange et utiliser un catalyseur.

COMPRENDRE
Ces deux conditions agissent sur la durée de la transformation, pas sur son état final : le rendement à l'équilibre reste le même. C'est l'excès d'un réactif (Q.9) qui le modifie.

Q.5 Déterminer les quantités de matière initiales n_{i1} d'acide éthanoïque et n_{i2} d'alcool benzylique introduites dans le ballon.

Données utiles $V_1 = 2{,}7\ \text{mL}$; $\rho_1 = 1{,}05\ \text{g} \cdot \text{mL}^{-1}$; $M_1 = 60{,}0\ \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$; $V_2 = 4{,}9\ \text{mL}$; $\rho_2 = 1{,}04\ \text{g} \cdot \text{mL}^{-1}$; $M_2 = 108{,}0\ \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$

Pour un liquide pur : $n = \dfrac{m}{M} = \dfrac{\rho V}{M}$.

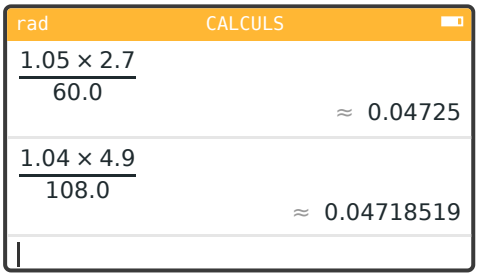
$$n_{i1} = \frac{\rho_1 V_1}{M_1} = \frac{1{,}05 \times 2{,}7}{60{,}0} = 4{,}7 \times 10^{-2}\ \text{mol}$$

$$n_{i2} = \frac{\rho_2 V_2}{M_2} = \frac{1{,}04 \times 4{,}9}{108{,}0} = 4{,}7 \times 10^{-2}\ \text{mol}$$

$n_{i1} = n_{i2} = 4{,}7 \times 10^{-2}\ \text{mol}$: le mélange initial est équimolaire.

COMPRENDRE
Deux chiffres significatifs, comme les volumes V_1 et V_2, données les moins précises. Les unités sont cohérentes telles quelles : ρ en $\text{g} \cdot \text{mL}^{-1}$ et V en mL donnent une masse en grammes.

À LA CALCULATRICE



Q.6 Établir, à partir de l'équation de la réaction de synthèse, la relation entre la quantité d'acide éthanoïque consommée $n_{\text{acide cons}}$ et la quantité d'ester formé n_{ester}.

Dans l'équation, les nombres stœchiométriques de l'acide éthanoïque et de l'ester sont tous deux égaux à 1 : chaque mole d'acide consommée donne une mole d'ester. Pour un avancement x : $n_{\text{acide cons}} = x$ et $n_{\text{ester}} = x$.

$n_{\text{acide cons}} = n_{\text{ester}}$

Q.7 Déterminer la quantité de matière d'acide éthanoïque restant dans le mélange réactionnel, $n_{\text{acide rest}}$.

Données utiles $C_B = 2{,}0\ \text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$; $V_E = 8{,}5\ \text{mL}$

Le changement de couleur de l'indicateur repère l'équivalence. Les réactifs y ont été introduits dans les proportions stœchiométriques de la réaction support du titrage (un acide pour un ion hydroxyde) :

$$n_{\text{acide rest}} = n_{\text{HO}^-\ \text{versé}} = C_B V_E$$

$$n_{\text{acide rest}} = 2{,}0 \times 8{,}5 \times 10^{-3} = 1{,}7 \times 10^{-2}\ \text{mol}$$

$n_{\text{acide rest}} = 1{,}7 \times 10^{-2}\ \text{mol}$

PIÈGE
Laisser V_E en mL avec C_B en $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$. Par ailleurs, la totalité du mélange est titrée : aucun facteur de prélèvement à appliquer, et l'eau glacée ajoutée ne change pas la quantité d'acide.

À LA CALCULATRICE

rad CALCULS

$2.0 \times 8.5 \times 10^{-3}$

$\approx$ 0.017

Q.8 Définir et calculer le rendement r de la synthèse. Conclure.

Données utiles $n_{i1} = n_{i2} = 4{,}7 \times 10^{-2}$ mol (Q.5) ; $n_{\text{acide rest}} = 1{,}7 \times 10^{-2}$ mol (Q.7)

Le rendement est le rapport entre la quantité d'ester réellement obtenue et la quantité maximale qui se formerait si la transformation était totale : $r = \dfrac{n_{\text{ester}}}{n_{\text{ester max}}}$.

Quantité maximale : le mélange est équimolaire et les nombres stœchiométriques valent 1, donc $n_{\text{ester max}} = n_{i1} = 4{,}7 \times 10^{-2}$ mol.

Quantité obtenue : d'après Q.6, $n_{\text{ester}} = n_{\text{acide cons}} = n_{i1} - n_{\text{acide rest}} = 4{,}7 \times 10^{-2} - 1{,}7 \times 10^{-2} = 3{,}0 \times 10^{-2}$ mol.

$$r = \frac{n_{i1} - n_{\text{acide rest}}}{n_{i1}} = \frac{3{,}0 \times 10^{-2}}{4{,}7 \times 10^{-2}} = 0{,}64$$

Conclusion : $r < 1$, la transformation n'est pas totale ; un tiers environ des réactifs n'a pas réagi.

$r = 0{,}64$, soit 64 % : la transformation n'est pas totale.

PIÈGE

Calculer $\dfrac{n_{\text{acide rest}}}{n_{i1}} = 0{,}36$: c'est la fraction d'acide qui n'a pas réagi, pas le rendement.

MÉTHODE

Titrer le réactif restant donne le produit formé par différence : restant, puis consommé (initial moins restant), puis formé (stœchiométrie). Le rendement se rapporte toujours au réactif limitant.

À LA CALCULATRICE

rad CALCULS

$4.7 \times 10^{-2} - 1.7 \times 10^{-2}$

$\approx$ 0.03

$\dfrac{3.0 \times 10^{-2}}{4.7 \times 10^{-2}}$

$\approx$ 0.6382979

Q.9 Justifier l'évolution du rendement de la synthèse entre le protocole 1 et le protocole 2.

Données utiles protocole 2 : $V_1 = 4$ mL, $V_2 = 4{,}9$ mL, $r = 0{,}71$; protocole 1 : $r = 0{,}64$ (Q.8)

Dans le protocole 2, la quantité d'acide introduite est $n'_{i1} = \dfrac{1{,}05 \times 4}{60{,}0} = 7 \times 10^{-2}$ mol, supérieure à $n_{i2} = 4{,}7 \times 10^{-2}$ mol : l'acide éthanoïque est en excès et l'alcool benzylique est le réactif limitant. La quantité maximale d'ester reste $4{,}7 \times 10^{-2}$ mol.

La transformation est limitée : elle conduit à un état d'équilibre. Introduire un réactif en excès déplace cet équilibre dans le sens de la formation de l'ester : l'alcool est davantage consommé.

Le rendement augmente de 0,64 à 0,71 car l'acide éthanoïque est introduit en excès.

COMPRENDRE

À l'équilibre, le quotient de réaction vaut K, la même constante dans les deux protocoles. Avec davantage d'acide au départ, il faut un avancement plus grand pour atteindre cette valeur.

À LA CALCULATRICE

