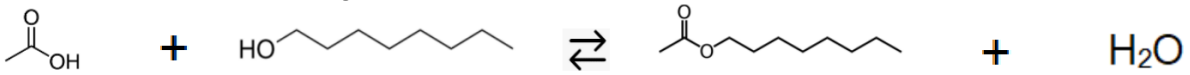
EXERCICE B (5 points)
SYNTHÈSE D'UN ARÔME D'ORANGE



Du fait de son odeur fruitée, l'éthanoate d'octyle est un ester utilisé pour préparer des arômes artificiels, en particulier des arômes d'orange.

Cet exercice porte sur la synthèse de l'éthanoate d'octyle. Dans un premier temps, on détermine le rendement d'un protocole donné de synthèse de l'éthanoate d'octyle. Dans un second temps, on cherche à optimiser ce protocole afin d'augmenter le rendement.

Équation de la réaction de synthèse



Acide éthanoïque + Octan-1-ol ⇄ Éthanoate d'octyle (ester) + H_2O

Protocole simplifié de la synthèse de l'éthanoate d'octyle

Synthèse

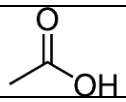
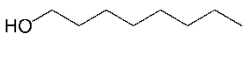
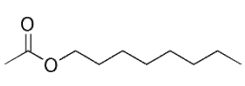
Introduire, dans un ballon, une quantité n_1 = 0,100 mol d'acide éthanoïque et n_2 = 0,100 mol d'octan-1-ol.
Ajouter quelques grains de pierre ponce.
Adapter un réfrigérant à eau sur le ballon.
Chauffer à reflux à 40 °C pendant 2 heures.
Après chauffage, laisser refroidir jusqu'à température ambiante.

Traitement du milieu réactionnel

Ajouter, par le haut du réfrigérant, 50 mL d'une solution aqueuse d'hydrogénocarbonate de sodium.
Transvaser le contenu du ballon dans une ampoule à décanter.
Extraire la phase organique.

Données :

- Sur les espèces chimiques mises en jeu

Espèce chimique	Acide éthanoïque	Octan-1-ol	Éthanoate d'octyle
Formule brute	$C_2H_4O_2$	$C_8H_{18}O$	$C_{10}H_{20}O_2$
Représentation topologique			
Solubilité en solution aqueuse	Totale	Faible	Très faible
Masse molaire	60,0 g·mol^{-1}	130 g·mol^{-1}	172 g·mol^{-1}

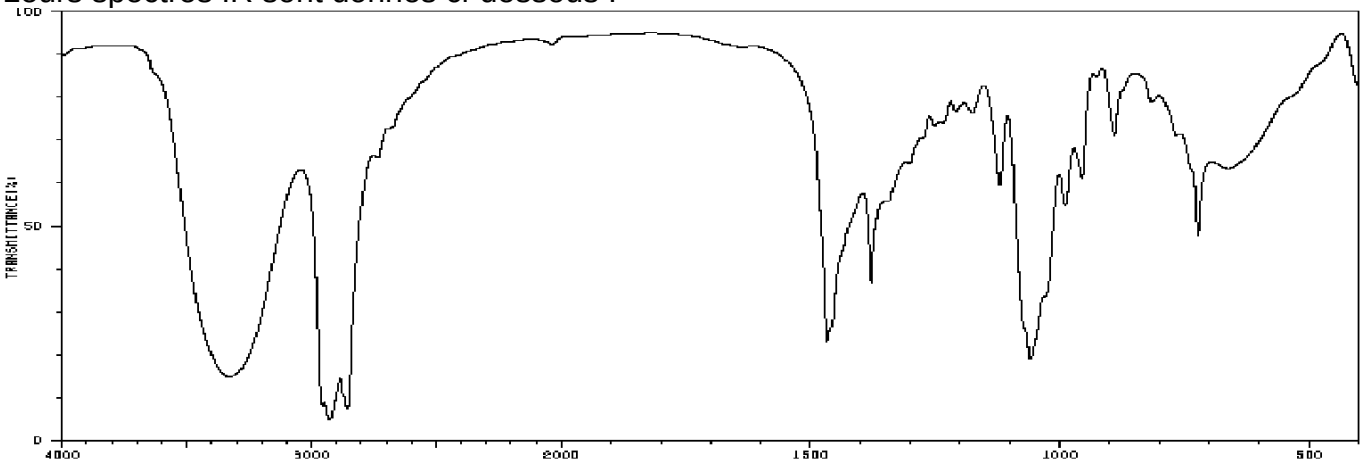
- Table de données de spectroscopie infrarouge

Liaison	O – H	C = O
Nombres d'onde (en cm^{-1})	3 200 à 3 500	1 650 à 1 740
Intensité du pic	Forte	Forte
Largeur du pic	Large	Fine

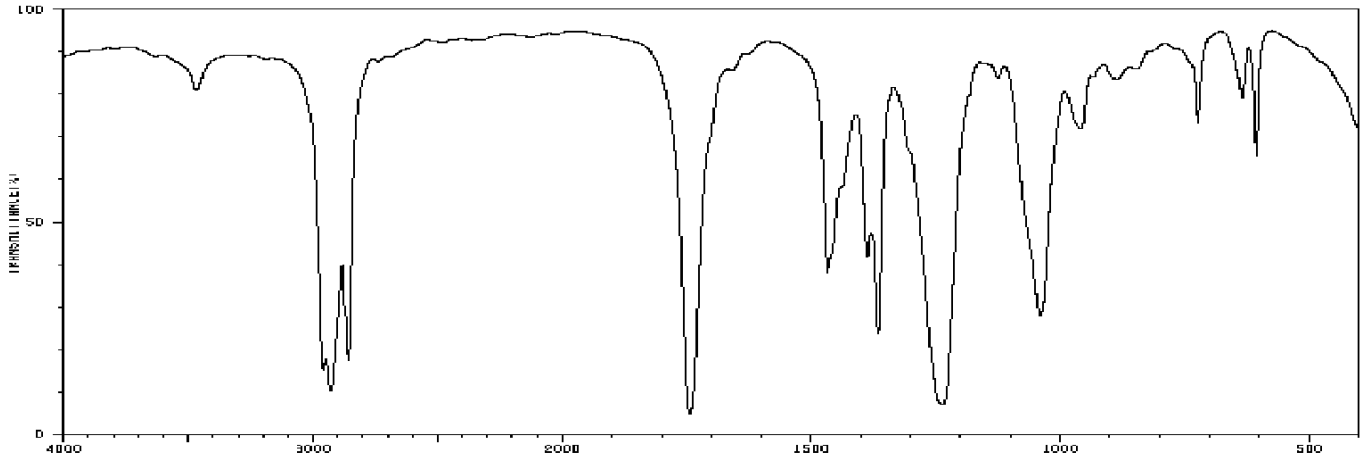
Rendement de la synthèse

Une première analyse de la phase organique obtenue après la synthèse est faite par chromatographie sur couche mince (CCM). Celle-ci révèle la présence de deux espèces chimiques. Une séparation est réalisée. Deux liquides, A et B, de masse respective m_A = 4,30 g et m_B = 11,34 g sont obtenus.

Leurs spectres IR sont donnés ci-dessous :



Spectre du liquide A



Spectre du liquide B

https://sdbs.db.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi

1. Expliquer l'intérêt d'ajouter une solution aqueuse dans le milieu réactionnel avant de procéder à la séparation par décantation (comme indiqué dans la partie « traitement du milieu réactionnel » du protocole).
2. Identifier, en justifiant, les espèces chimiques pouvant être présentes dans la phase organique.
3. Recopier et nommer les groupes fonctionnels présents dans les molécules d'acide éthanoïque et d'éthanoate d'octyle.

4. À l'aide des deux spectres, montrer que le liquide A correspond à l'alcool et le liquide B à l'ester.

5. Déterminer les quantités de matière en octan-1-ol et en éthanoate d'octyle obtenues.

Le rendement de la synthèse est défini par :

$$\eta = \frac{n(C_{10}H_{20}O_2)_f}{n(C_{10}H_{20}O_2)_{max}}$$

où $n(C_{10}H_{20}O_2)_f$ représente la quantité de matière d'éthanoate d'octyle à l'état final, à l'équilibre, et $n(C_{10}H_{20}O_2)_{max}$ la quantité de matière d'éthanoate d'octyle si la réaction était totale.

6. Calculer le rendement de cette synthèse.

Optimisation de la synthèse

Durant la synthèse, avant la séparation des deux phases, le quotient de réaction peut être exprimé en fonction des quantités de matière des espèces suivant la relation :

$$Q_r = \frac{n(C_{10}H_{20}O_2) \times n(H_2O)}{n(C_2H_4O_2) \times n(C_8H_{18}O)}$$

Données :

- La constante d'équilibre de la réaction de synthèse vaut $Q_{r,éq} = K = 4{,}0$.
- Avec un mélange équimolaire initial en acide et en alcool, le rendement de cette réaction de synthèse a pour valeur : $\eta = 66$ %.

Afin d'augmenter le taux d'avancement de la synthèse, on introduit un réactif en excès.

7. En raisonnant sur le quotient de réaction, expliquer pourquoi l'ajout d'un réactif permet de déplacer l'équilibre.

On note :

- n_1' la nouvelle quantité d'acide éthanoïque initiale ;
- pour rappel, n_2, la quantité d'octan-1-ol initiale ($n_2 = 0{,}100$ mol) ;
- $x_{éq}$ l'avancement de la réaction à l'équilibre.

On admet que le quotient de réaction dans l'état d'équilibre du système peut s'exprimer sous la forme :

$$Q_{r,éq} = \frac{x_{éq}^2}{(n_1' - x_{éq}) \times (n_2 - x_{éq})}$$

8. Déterminer la quantité n_1' d'acide éthanoïque à introduire pour obtenir un rendement d'au-moins 0,95.