L'isoprène

Bac S 2019 Polynésie (ancien programme) · Exercice 2 **5 points** **Durée conseillée 50 min**

1.1 Justifier le nom de l'isoprène en nomenclature officielle (2-méthylbuta-1,3-diène) et donner sa formule semi-développée.

- La chaîne carbonée la plus longue contenant les deux doubles liaisons compte 4 atomes de carbone : racine « buta ».
- Elle porte deux doubles liaisons $C{=}C$, qui partent des carbones n° 1 et n° 3 : terminaison « 1,3-diène ».
- Un groupe méthyle $-CH_3$ est fixé sur le carbone n° 2 : préfixe « 2-méthyl ».

D'où le nom 2-méthylbuta-1,3-diène.

Formule semi-développée : $CH_2{=}C(CH_3){-}CH{=}CH_2$

PIÈGE
Dans une formule topologique, chaque sommet et chaque extrémité est un carbone, complété par des hydrogènes jusqu'à quatre liaisons. Le carbone n° 2 ne porte donc aucun hydrogène.

MÉTHODE
Pour justifier un nom : 1) chaîne principale (racine) ; 2) fonction ou insaturation et sa position (terminaison) ; 3) ramifications et leurs positions (préfixe). On numérote pour que les indices soient les plus petits possibles.

1.2 Représenter, en les identifiant, les formules topologiques des deux stéréoisomères Z et E du penta-1,3-diène.

Seule la double liaison $C_3{=}C_4$ donne lieu à une isomérie Z/E : chacun de ses deux carbones porte un atome d'hydrogène et un groupe carboné différent ($-CH{=}CH_2$ sur C3, $-CH_3$ sur C4). Le carbone C1 porte deux atomes d'hydrogène : pas d'isomérie Z/E pour $C_1{=}C_2$.

- Isomère Z : les deux atomes d'hydrogène (donc aussi les deux groupes carbonés) sont du même côté de la double liaison.
- Isomère E : ils sont de part et d'autre de la double liaison.

Les deux formules topologiques sont tracées sur la figure : chaîne « repliée » pour le Z, chaîne en zigzag régulier pour le E.

PIÈGE
Dessiner une différence autour de $C_1{=}C_2$: un carbone portant deux groupes identiques (ici deux H) ne crée aucune isomérie Z/E. Penser aussi à écrire Z ou E sous chaque formule.

COMPRENDRE
Z vient de l'allemand « zusammen » (ensemble), E de « entgegen » (opposé). L'isomérie Z/E, exigible au bac S, ne figure plus explicitement au programme actuel de spécialité de terminale.



stéréoisomère Z
C2 et C5 du même côté de C3=C4

stéréoisomère E
C2 et C5 de part et d'autre de C3=C4

1.2 · Formules topologiques des deux stéréoisomères du penta-1,3-diène (carbones numérotés en orange)

1.3.1 Écrire la formule semi-développée du 2-méthylbutane.

Chaîne principale de 4 carbones (butane), sans double liaison, avec un groupe méthyle sur le carbone n° 2 :

$CH_3{-}CH(CH_3){-}CH_2{-}CH_3$

COMPRENDRE
L'hydrogénation ajoute une molécule H_2 sur chaque double liaison : $C_5H_8 + 2\,H_2 \longrightarrow C_5H_{12}$. Le squelette carboné de l'isoprène est conservé.

1.3.2 Indiquer, en le justifiant, le nombre de signaux attendus sur le spectre de RMN du proton du 2-méthylbutane et la multiplicité de chaque signal.

Dans $(CH_3)_2CH-CH_2-CH_3$, on compte 4 groupes de protons équivalents, donc 4 signaux. Un groupe de protons ayant n protons voisins (portés par les carbones adjacents) donne un signal de $n+1$ pics.

- Les 6 H des deux CH_3 portés par le carbone n° 2 (équivalents) : 1 voisin (H de CH), soit un doublet.
- Le H de CH : $6+2=8$ voisins, soit un signal de 9 pics (nonuplet).
- Les 2 H de CH_2 : $1+3=4$ voisins, soit un quintuplet.
- Les 3 H du CH_3 en bout de chaîne : 2 voisins (H de CH_2), soit un triplet.

4 signaux : un doublet (6 H), un nonuplet (1 H), un quintuplet (2 H) et un triplet (3 H).

PIÈGE
Compter 5 signaux. Les deux groupes méthyle liés au même carbone ont le même environnement chimique : leurs 6 protons sont équivalents et donnent un seul signal.

COMPRENDRE
La multiplicité des signaux de RMN, au programme du bac S, n'est plus exigible dans le programme actuel de spécialité de terminale.

MÉTHODE
Entourer chaque groupe de protons équivalents, puis, pour chacun, additionner les H portés par tous les carbones directement voisins : la multiplicité vaut ce nombre plus un.

2.1.1 Indiquer, pour les étapes 2 et 3, la catégorie de la réaction.

- Étape 2 : les atomes de la molécule H_2 se fixent sur la triple liaison, qui devient une double liaison ; deux réactifs donnent un seul produit. C'est une addition.
- Étape 3 : la molécule perd le groupe $-OH$ et un atome H d'un carbone voisin ; une petite molécule (H_2O) se détache et une double liaison se forme. C'est une élimination.

Étape 2 : addition ; étape 3 : élimination.

MÉTHODE
Addition : des atomes s'ajoutent sur une liaison multiple, un seul produit. Élimination : départ d'une petite molécule, création d'une liaison multiple. Substitution : un atome ou un groupe en remplace un autre.

2.1.2 Déduire de l'ensemble des étapes l'équation de la réaction de synthèse de l'isoprène.

En formules brutes, les trois étapes s'écrivent :

- étape 1 : $C_2H_2 + C_3H_6O \longrightarrow C_5H_8O$
- étape 2 : $C_5H_8O + H_2 \longrightarrow C_5H_{10}O$
- étape 3 : $C_5H_{10}O \longrightarrow C_5H_8 + H_2O$

On additionne membre à membre : les intermédiaires C_5H_8O et $C_5H_{10}O$, formés puis consommés, se simplifient.

$C_2H_2 + C_3H_6O + H_2 \longrightarrow C_5H_8 + H_2O$ (éthyne + propanone + dihydrogène donnent isoprène + eau)

PIÈGE
Faire figurer NH_3, KOH ou Al_2O_3 dans l'équation : solvant et catalyseurs ne sont pas des réactifs. Vérifier la conservation des éléments : 5 C, 10 H et 1 O de chaque côté.

2.2 Déterminer le volume de propanone nécessaire à la production annuelle d'isoprène, la propanone étant le réactif limitant.

Données utiles $m_{\text{iso}} = 30\,000$ t par an ; rendement $\eta = 85\ \%$; $\rho = 790\ \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$; $M(\text{C}) = 12{,}0$, $M(\text{H}) = 1{,}0$, $M(\text{O}) = 16{,}0\ \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$; équation de la synthèse (2.1.2)

Masses molaires : $M(\text{C}_5\text{H}_8) = 5 \times 12{,}0 + 8 \times 1{,}0 = 68{,}0\ \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ et $M(\text{C}_3\text{H}_6\text{O}) = 3 \times 12{,}0 + 6 \times 1{,}0 + 16{,}0 = 58{,}0\ \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$.

Quantité d'isoprène produite, avec $m_{\text{iso}} = 30\,000\ \text{t} = 3{,}0 \times 10^{10}\ \text{g}$:

$$n_{\text{iso}} = \frac{m_{\text{iso}}}{M(\text{C}_5\text{H}_8)} = \frac{3{,}0 \times 10^{10}}{68{,}0} = 4{,}41 \times 10^{8}\ \text{mol}$$

D'après l'équation, 1 mol de propanone (réactif limitant) donnerait au maximum 1 mol d'isoprène : $n_{\text{max}} = n_{\text{prop}}$. Le rendement est $\eta = \dfrac{n_{\text{iso}}}{n_{\text{max}}}$, donc

$$n_{\text{prop}} = \frac{n_{\text{iso}}}{\eta} = \frac{4{,}41 \times 10^{8}}{0{,}85} = 5{,}19 \times 10^{8}\ \text{mol}$$

Masse de propanone : $m_{\text{prop}} = n_{\text{prop}} \times M(\text{C}_3\text{H}_6\text{O}) = 5{,}19 \times 10^{8} \times 58{,}0 = 3{,}01 \times 10^{10}\ \text{g} = 3{,}01 \times 10^{7}\ \text{kg}$.

Volume :

$$V = \frac{m_{\text{prop}}}{\rho} = \frac{m_{\text{iso}} \times M(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})}{\eta \times M(\text{C}_5\text{H}_8) \times \rho} = \frac{3{,}01 \times 10^{7}}{790}$$

$V = 3{,}8 \times 10^{4}\ \text{m}^3$ de propanone par an

PIÈGE

Multiplier par 0,85 au lieu de diviser : avec un rendement inférieur à 100 %, il faut plus de réactif que la quantité théorique. Attention aussi aux unités : ρ est en $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$, la masse doit être en kg.

COMPRENDRE

Deux chiffres significatifs, comme le rendement (85 %), donnée la moins précise. On garde les valeurs intermédiaires non arrondies dans la calculatrice et on n'arrondit qu'à la fin.

À LA CALCULATRICE

