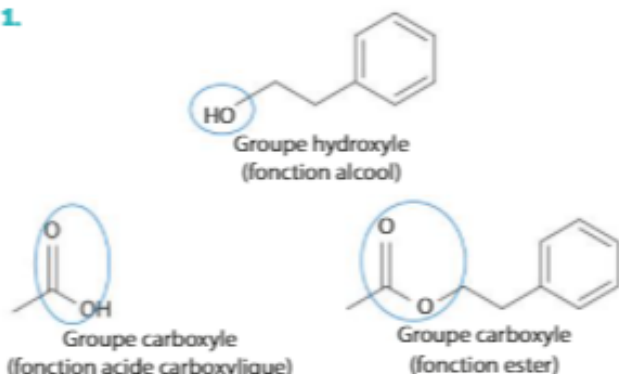


## Correction exercice : Synthèse d'un arôme de rose

### 1 Synthèse d'un arôme de rose

#### I Rendement de la synthèse

1.



2. Sur le spectre A, on note une bande large entre  $3\ 100$  et  $3\ 600\text{ cm}^{-1}$ , qui correspond à une liaison O—H.

Sur le spectre B, on note une bande fine à  $1\ 740\text{ cm}^{-1}$ , qui correspond à une liaison C=O.

Par analyse des structures du 2-phényléthanol et de l'éthanoate de 2-phényléthyle, le spectre A correspond bien au 2-phényléthanol (c'est un alcool, comportant une liaison O—H) et le spectre B correspond bien à l'éthanoate de 2-phényléthyle (c'est un ester, comportant une liaison C=O).

3. Déterminer les quantités de matière en 2-phényléthanol et en éthanoate de 2-phényléthyle présents à l'équilibre.

Quantité de matière en 2-phényléthanol  $n_A$  :

$$n_A = \frac{m_A}{M_A} = \frac{4,15}{122} = 3,40 \times 10^{-2}\text{ mol}$$

Quantité de matière en éthanoate de 2-phényléthyle  $n_B$  :

$$n_B = \frac{m_B}{M_B} = \frac{10,82}{164} = 6,60 \times 10^{-2}\text{ mol}$$

4.

Équation de réaction		$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2(l) + \text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}(l) \rightarrow \text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_2(l) + \text{H}_2\text{O}(l)$			
État du système	Avancement (mol)	Quantités de matière (mol)			
État initial	$x = 0$	$n_1$	$n_2$	0	0
État intermédiaire	$x$	$n_1 - x$	$n_2 - x$	$x$	$x$
État final	$x_f$	$n_1 - x_f$	$n_2 - x_f = n_A$	$x_f = n_B$	$x_f$

Grâce à la colonne correspondant à l'éthanoate de 2-phényléthyle (troisième colonne), on obtient l'avancement à l'équivalence, égal à la quantité de matière en ester formé :  $x_f = n_B = 6,60 \times 10^{-2}\text{ mol}$

La quantité de matière en eau à l'équilibre est égale à l'avancement final :  $n_{\text{H}_2\text{O},\text{éq}} = x_f = 6,60 \times 10^{-2}\text{ mol}$

La quantité de matière en acide éthanoïque à l'équilibre est :  $n_{\text{acide},\text{éq}} = n_1 - x_f = 0,100 - 6,60 \times 10^{-2} = 3,40 \times 10^{-2}\text{ mol}$

5. Déterminer le rendement de la synthèse.

Le rendement de la synthèse est obtenu en calculant le quotient de la quantité de matière de produit obtenue par la quantité

$$\text{de matière de produit attendue : } r = \frac{n_B}{n_2}$$

La quantité de matière attendue est  $n_2$ , car on s'attend au maximum que tout l'alcool soit converti en ester.

$$r = \frac{n_B}{n_2} = \frac{6,60 \times 10^{-2}}{0,100} = 0,66 \text{ soit } 66\%$$

#### II Optimisation de la synthèse

##### 1. Optimiser le taux d'avancement

$$a. K = \frac{[\text{ester}]_{\text{éq}} \times [\text{eau}]_{\text{éq}}}{[\text{acide carboxylique}]_{\text{éq}} \times [\text{alcool}]_{\text{éq}}} = \frac{[\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_2]_{\text{éq}} \times [\text{H}_2\text{O}]_{\text{éq}}}{[\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2]_{\text{éq}} \times [\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}]_{\text{éq}}}$$

Remarque : L'eau n'étant pas ici un solvant, elle doit entrer dans l'expression de la constante d'équilibre.

b. • D'après le tableau d'avancement, les quantités de matières en ester et en eau formés sont égales. Leurs concentrations sont donc égales aussi :  $[\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_2]_{\text{éq}} = [\text{H}_2\text{O}]_{\text{éq}}$ . Le mélange initial étant stœchiométrique, et comme l'acide éthanoïque et le 2-phényléthanol ont le même coefficient stœchiométrique dans l'équation de la synthèse, leurs concentrations à l'équilibre sont égales :

$$[\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2]_{\text{éq}} = [\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}]_{\text{éq}}$$

• Le taux d'avancement de la réaction est obtenu en calculant le quotient de la quantité de matière en ester formé par la quantité de matière en ester attendue. En espérant que tout l'alcool soit converti en ester, la quantité de matière en ester attendue est égale à la quantité d'alcool initiale.

$$\tau = \frac{x_f}{x_{\text{max}}} \text{ d'où } \tau = \frac{x_f}{n_2}$$

$$• K = \frac{[\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_2]_{\text{éq}} \times [\text{H}_2\text{O}]_{\text{éq}}}{[\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2]_{\text{éq}} \times [\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}]_{\text{éq}}} \text{ et } K = \frac{[\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_2]_{\text{éq}}^2}{[\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}]_{\text{éq}}^2}$$

– En multipliant par le carré volume  $V$  du mélange réactionnel, on obtient :

$$K = \frac{[\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_2]_{\text{éq}}^2 \times V^2}{[\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}]_{\text{éq}}^2 \times V^2}$$

$$\text{d'où } K = \left( \frac{n_{\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_2,\text{éq}}}{n_{\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O},\text{éq}}} \right)^2 = \left( \frac{x_f}{n_2 - x_f} \right)^2$$

$$K = \left( \frac{\frac{x_f}{n_2}}{1 - \frac{x_f}{n_2}} \right)^2 \text{ d'où } K = \left( \frac{\tau}{1 - \tau} \right)^2$$

$$- \text{Application numérique : } K = \left( \frac{0,66}{1 - 0,66} \right)^2 = 4,0$$

c. L'acide éthanoïque coûte moins cher que le 2-phényléthanol.

$$d. K = \frac{[\text{ester}]_{\text{éq}} \times [\text{eau}]_{\text{éq}}}{[\text{acide carboxylique}]_{\text{éq}} \times [\text{alcool}]_{\text{éq}}}$$

Si on augmente la quantité de matière en acide éthanoïque initiale, la quantité de matière en ester obtenu doit nécessairement augmenter afin que la constante d'équilibre conserve bien la même valeur.

En augmentant la concentration en acide carboxylique le quotient de réaction  $Q_r$  redevient inférieur à  $K$ , d'après le critère d'évolution le système se déplace dans le sens de la formation des produits.

e.

Équation de réaction		$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2(\ell) + \text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}(\ell) \rightarrow \text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_2(\ell) + \text{H}_2\text{O}(\ell)$			
État du système	Avancement (mol)	Quantités de matière (mol)			
État initial	$x = 0$	$n_1'$	$n_2$	0	0
État intermédiaire	$x$	$n_1' - x$	$n_2 - x$	$x$	$v$
État final	$x_f$	$n_1' - x_f$	$n_2 - x_f$	$x_f$	$x_f$

$$K = \frac{[\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_2]_{\text{éq}} \times [\text{H}_2\text{O}]_{\text{éq}}}{[\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2]_{\text{éq}} \times [\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}]_{\text{éq}}} \text{ d'où } K = \frac{n_{\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_2, \text{éq}} \times n_{\text{H}_2\text{O}, \text{éq}}}{n_{\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2, \text{éq}} \times n_{\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}, \text{éq}}}$$

La deuxième expression est obtenue en multipliant par le carré volume  $V$  du mélange réactionnel.

$$K = \frac{x_f \times x_f}{(n_1' - x_f) \times (n_2 - x_f)} \text{ d'où } K = \frac{x_f^2}{(n_1' - x_f) \times (n_2 - x_f)}$$

$$K = \frac{x_f^2}{(0,500 - x_f) \times (0,100 - x_f)} = \frac{x_f^2}{x_f^2 - 0,600 \times x_f + 0,0500}$$

$$K = (x_f^2 - 0,600 \times x_f + 0,0500) = x_f^2$$

$$x_f^2 \times (K - 1) - 0,600 \times K \times x_f + 0,0500 \times K = 0$$

$$3 \times x_f^2 - 2,400 \times x_f + 0,200 = 0$$

On résout alors l'équation du 2<sup>nd</sup> degré :

$$\Delta = (-2,400)^2 - 4 \times 3 \times 0,200 = 5,76 - 2,4 = 3,36$$

$$x_f = \frac{2,400 - \sqrt{3,36}}{2 \times 3} = 9,45 \times 10^{-2} \text{ mol}$$

$$\tau = \frac{x_f}{n_2} = \frac{9,45 \times 10^{-2}}{0,100} = 0,945 \text{ soit } 94,5 \%$$

## 2. Optimiser la vitesse de réaction

a. La courbe qui représente l'évolution de la quantité d'ester formé dans le protocole initial (proportions stœchiométrique et sans ajout d'acide sulfurique) est la courbe **(a)**.

b. On se rend compte que lorsqu'on ajoute de l'acide sulfurique, la quantité maximale d'ester est obtenue plus rapidement.

Si l'on laisse à température ambiante, toujours avec ajout d'acide sulfurique, cette quantité maximale d'ester est obtenue moins rapidement.

c. L'acide sulfurique joue ici le rôle de catalyseur. Il intervient dans le mécanisme de la réaction pour l'accélérer, mais n'apparaît pas dans l'équation de la réaction.

d. Pour synthétiser de manière optimale cet arôme de rose, il faut ajouter de l'acide sulfurique comme catalyseur et faire la réaction à haute température pour la rendre plus rapide, et mettre un excès d'acide éthanoïque pour augmenter le taux d'avancement final.