



## OPTIMISATION D'UNE SYNTHÈSE

Objectifs : exploiter une simulation numérique pour comprendre les paramètres d'un mouvement parabolique

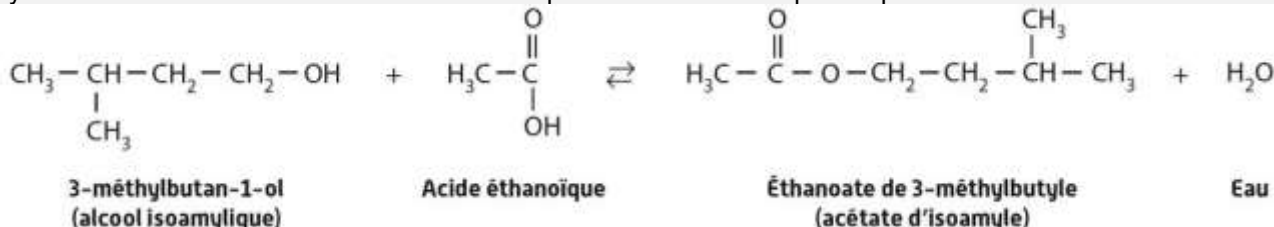


**Problématique** : L'éthanoate de 3-méthylbutyle ou acétate d'isoamyle est utilisé comme agent de saveur. Cet ester est naturellement présent dans la banane. Au laboratoire, on peut le synthétiser en réalisant une transformation limitée entre l'acide éthanoïque et le 3-méthylbutan-1-ol (alcool isoamylique). Dans l'industrie, on cherche toujours à obtenir le meilleur rendement pour une synthèse. Comment optimiser à la fois la vitesse de formation d'un produit et le rendement de cette synthèse ?

### Réaction de synthèse de l'acétate d'isoamyle



La synthèse de l'arôme de banane est modélisée par la réaction chimique d'équation :



L'estérification est une transformation chimique limitée qui est modélisée par un équilibre chimique dont la constante d'équilibre  $K$  varie peu avec la température (298 K) et vaut environ 4.

### Protocoles



Les étapes 1. et 2. sont différentes en fonction des groupes, puis les étapes 3. à 10. sont identiques :

#### Protocole ① :

1. Dans un ballon de 250 mL, introduire  $V_1 = 20,0$  mL d'alcool isoamylique et un volume  $V_2 = 10,5$  mL d'acide éthanoïque (acétique).
2. Ajouter, avec précaution, 1 mL d'une solution d'acide sulfurique concentré et quelques grains de pierre ponce.

#### Protocole ② :

1. Dans un ballon de 250 mL, introduire  $V_1 = 20,0$  mL d'alcool isoamylique et un volume  $V_2 = 25,0$  mL d'acide acétique.
2. Ajouter, avec précaution, 1 mL d'une solution d'acide sulfurique concentré et quelques grains de pierre ponce.

#### Protocole ③ :

1. Dans un ballon de 250 mL, introduire  $V_1 = 20,0$  mL d'alcool isoamylique et un volume  $V_2 = 25,0$  mL d'acide acétique.
2. Ajouter quelques grains de pierre ponce.
3. Réaliser un montage à reflux et maintenir une ébullition douce pendant 30 min.
4. Au bout de 30 min, arrêter le chauffage et laisser refroidir le ballon à l'air quelques minutes puis dans un bain d'eau froide tout en laissant la circulation d'eau dans le réfrigérant.
5. Verser le contenu du ballon dans une ampoule à décanter. Deux phases non miscibles apparaissent : la phase aqueuse et la phase organique. Les identifier.
6. Ajouter 100 mL d'une solution aqueuse saturée de chlorure de sodium glacée. Agiter, puis laisser décanter. Récupérer la phase aqueuse dans un bécher.
7. Laver la phase organique avec une solution saturée d'hydrogénocarbonate de sodium. Agiter **tout en dégazant TRES régulièrement** jusqu'à ce que l'effervescence cesse.
8. Laver deux fois la phase organique avec 50 mL d'eau glacée.
9. Récupérer la phase organique dans un erlenmeyer.

Sécher la phase organique avec du sulfate de magnésium anhydre. Filtrer et peser la masse d'ester obtenue.

### Rendements par groupe



|             | $n_i(\text{alcool})$ | $n_i(\text{acide})$ | $n_{\text{max}}(\text{ester})$ | $m_{\text{max}}(\text{ester})$ | Rendement |          |          |
|-------------|----------------------|---------------------|--------------------------------|--------------------------------|-----------|----------|----------|
|             |                      |                     |                                |                                | Groupe a  | Groupe b | Groupe c |
| Protocole 1 |                      |                     |                                |                                |           |          |          |
| Protocole 2 |                      |                     |                                |                                |           |          |          |
| Protocole 3 |                      |                     |                                |                                |           |          |          |

## Données



| Espèce                              | 3-méthylbutan-1-ol     | Acide éthanoïque | Éthanoate de 3-méthylbutyle | Eau salée |
|-------------------------------------|------------------------|------------------|-----------------------------|-----------|
| Densité                             | 0,81                   | 1,05             | 0,87                        | 1,2       |
| Masse molaire / g·mol <sup>-1</sup> | 88,0                   | 60,0             | 130                         |           |
| Température d'ébullition / °C       | 128,5                  | 118              | 142                         |           |
| Solubilité dans l'eau               | Assez faible (130 g/L) | Très grande      | Très faible (20 g/L)        |           |
| Solubilité dans l'eau salée         | Très faible            | Grande           | Très très faible            |           |
| Pictogramme                         |                        |                  |                             |           |

## RÉALISER

Suivre un protocole

A B C D

- Réaliser les étapes 1, 2 et 3 du protocole et répondre aux questions durant le chauffage.
- Après les 30 min de chauffage, poursuivre avec les étapes 4 à 10 du protocole.

## S'APPROPRIER

Exploiter un protocole

A B C D

- Justifier le nom de l'ester formé en nomenclature officielle.
- Comparer les trois protocoles et identifier les différences qui apparaissent entre eux.
- Identifier le rôle de l'acide sulfurique concentré utilisé dans les protocoles 1 et 2.
- Le protocole peut être découpé en trois grandes opérations : transformation chimique, séparation et purification. Associer chacune de ces opérations aux étapes correspondantes du protocole.

## ANALYSER

A B C D

- Remplir les 4 premières colonnes du tableau de rendement pour chacun des trois protocoles.
- Expliquer pourquoi un chauffage à reflux est nécessaire pour réaliser cette synthèse.
- Expliquer pourquoi on ne peut pas utiliser le montage à distillation fractionnée dans cette synthèse pour récupérer l'ester au cours de sa formation.
- À l'aide du tableau de données et sachant que l'acide sulfurique est soluble dans l'eau, faire un schéma légendé de l'ampoule à décanter lors de l'étape 5 du protocole.
- Expliquer le rôle de la solution aqueuse saturée de chlorure de sodium dans l'étape 6.
- Écrire l'équation de la réaction ayant lieu lors de l'étape 7. Couples acide-base :  
 $CO_2, H_2O(aq) / HCO_3^-(aq)$  et  $CH_3COOH(aq) / CH_3COO^-(aq)$
- Sachant que l'ion éthanoate est soluble dans l'eau, préciser quelle espèce chimique est éliminée lors de l'étape 7.
- Expliquer l'intérêt de finalement « laver » la phase organique à l'eau lors de l'étape 8.
- Expliquer le rôle du sulfate de magnésium anhydre dans l'étape 10.
- Calculer le rendement de cette synthèse et compléter le tableau de rendement.

## COMMUNIQUER

Rédiger une synthèse

A B C D

- En une ou deux phrases, dégager les paramètres qui augmentent le rendement et la vitesse d'une synthèse.