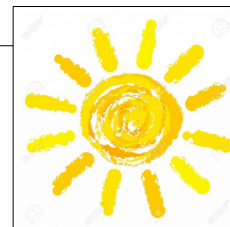


	APP	ANA	REA	VAL	COM	SECU

dba

- La dibenzylidèneacétone ou dibenzalacétone, abrégé en dba, est un composé organique qui entre dans la composition de certaines crèmes servant d'écrans solaires.
- La synthèse du dba est obtenue par condensation en milieu basique du benzaldéhyde avec l'acétone, suivie d'une déshydratation. Au cours de cette transformation, une molécule intermédiaire de benzylidèneacétone est formée. Le benzylidèneacétone est utilisée comme ingrédient aromatisant dans les aliments et les parfums.
- Ainsi, lors de la synthèse du dba, deux réactions chimiques se succèdent :

$$\text{acétone} + \text{benzaldéhyde} \rightarrow \text{benzylidèneacétone} + \text{eau}$$

$$\text{benzylidèneacétone} + \text{benzaldéhyde} \rightarrow \text{dibenzylidèneacétone} + \text{eau}$$

Protocole de synthèse

- Mode opératoire
 - ↳ Introduire 10 mL d'eau distillée dans un erlenmeyer de 100 mL et y dissoudre 1 g de soude en pastille.
 - ↳ Mettre sous agitation.



La solution préparée est très agressive, l'agitation magnétique doit être réglée de façon à éviter les projections. La dissolution doit être totale.

- ↳ Préparer d'autre part, dans un erlenmeyer de 100 mL, un mélange contenant environ précisément 2,6 g de benzaldéhyde et 1 mL d'acétone, dans 10 mL d'éthanol.
- ↳ Mettre sous agitation.
- ↳ Verser la solution de soude sur le mélange et agiter vigoureusement pendant 20 à 25 min. La dibenzalacétone commence à précipiter (solide floconneux jaune) après environ 5 min de réaction.
- ↳ À la fin de la réaction, ajouter un peu de glace et agiter pendant encore 5 min.
- Traitement du milieu réactionnel
 - ↳ Essorer le produit sur Büchner. (Revoir [1STL.C2D.TE03](#))
 - ↳ Laver le produit avec 2 fois 20 mL d'eau glacée, puis 5 mL d'éthanol glacé.
 - ↳ Sécher à l'étuve à 80 °C. Peser le produit, puis calculer le rendement en produit brut.

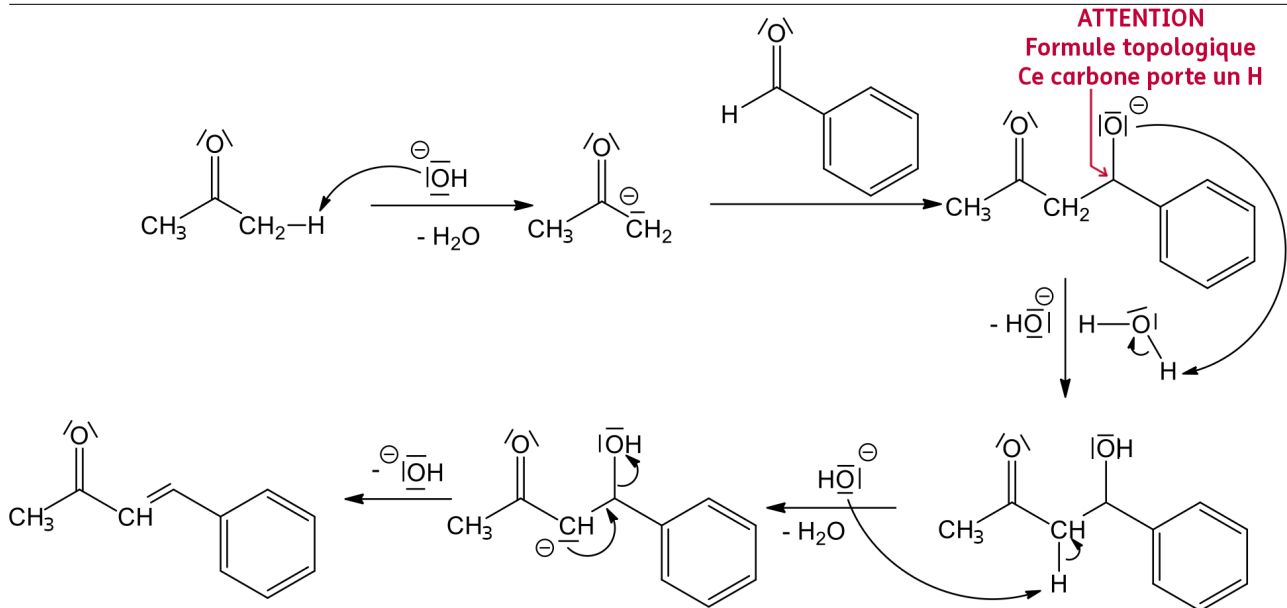
- Contrôle de pureté
 - ↳ Mesurer le point de fusion du produit brut sur le banc Köfler (litt. 113 °C)

Étude du protocole de synthèse

- Schématiser les opérations effectuées pour réaliser la synthèse.
- Étudier la solubilité des différentes espèces mises en jeu. En déduire le rôle de l'éthanol.
- Purification : Proposer une méthode pour purifier la dibenzalacétone brute obtenue. Préciser le solvant envisagé.
- Calculer les quantités de matière initiale des réactifs.
- Compléter le tableau d'avancement de la réaction pour déterminer l'avancement maximal x_{\max} ainsi que le réactif limitant.
- En déduire la masse théorique maximale attendue de dibenzalacétone.

	Benzaldéhyde	+	Acétone	→	dba	+	Eau
Unité : mmol.	2 C ₆ H ₅ CHO	+	C ₃ H ₆ O	→	C ₁₇ H ₁₄ O	+	2 H ₂ O
x = 0							
x							
x _{max} =							

Mécanisme de formation du benzylidèneacétone



- Remarque : Seul le diastéréoisomère E est observé, bien que le Z soit possible.

Analyse du mécanisme de formation du benzylidèneacétone

- Il manque une flèche courbe permettant d'expliquer la rupture d'une liaison lors de la 1^{ère} étape. Ajouter en rouge la flèche manquante.

• Deuxième étape

- ↳ Identifier le site nucléophile et le site électrophile qui interagissent lors de la 2^{ème} étape.
- ↳ Représenter les déplacements des doublets électroniques qui ont lieu lors de cette 2^{ème} étape à l'aide du formalisme des flèches courbes (Bleu = formation ; Rouge = rupture)

- Ce mécanisme comporte 5 étapes. À quelles catégories (addition, élimination, substitution ou réaction acide-base) appartiennent les réactions qui ont lieu lors de la première, deuxième et dernière étape ?

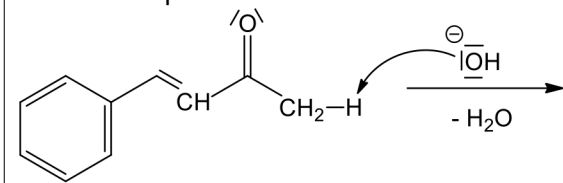
1 ^{ère} étape	2 ^{ème} étape	3 ^{ème} étape	4 ^{ème} étape	5 ^{ème} étape
		Énolate + eau Réaction acide-base	Déprotonation Réaction acide-base	

- Retrouver l'équation globale de la réaction de formation du benzylidèneacétone décrite par ce mécanisme.
- La réaction est catalysée. Quelle espèce joue le rôle de catalyseur ?
- Expliquer le mode d'action du catalyseur à l'échelle microscopique : permet-il de renforcer le caractère nucléophile ou électrophile d'un site ? De quel site s'agit-il ?

Mécanisme de formation de la dba

- Le démarrage de la première étape de la seconde réaction est la suivante :
↳ Compléter cette étape pour représenter le carbanion formé.

Première étape =



- Ce carbanion réagit alors avec une molécule de benzaldéhyde, de la même manière que dans la deuxième étape du mécanisme précédent.

↳ Schématiser le mécanisme de cette « nouvelle » deuxième étape.

Deuxième étape =




- Le reste de la seconde réaction de la synthèse se déroule à l'identique.

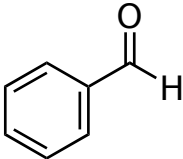
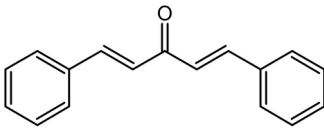

Énolate + eau = Réaction acide-base

Déprotonation = Réaction acide-base

Cinquième étape =

Données

	Acétone	Éthanol	Soude (2 mol·L ⁻¹)
Formules	C ₃ H ₆ O / 58,08 g·mol ⁻¹	C ₂ H ₅ OH / 46,07 g·mol ⁻¹	(Na ⁺ + HO ⁻) / 40 g·mol ⁻¹
Ébullition (° C)	56 °C	78,4 °C	
Fusion (° C)	-95 °C	-117 °C	
Densité	0,783	0,789	
Solubilité (25 °C)	Eau, éthanol	Eau	
Aspect	Liquide incolore	Liquide incolore	Solution aqueuse
Pictogrammes			
Avertissement	Danger	Danger	Danger
DANGER : phrases H	Liquide et vapeurs très inflammables. Provoque une sévère irritation des yeux. Peut provoquer somnolence ou vertiges. L'exposition répétée peut provoquer dessèchement ou gerçures de la peau.	Liquide et vapeurs très inflammables.	Peut être corrosif pour les métaux. Provoque des brûlures de la peau et de graves lésions des yeux.
PRUDENCE/ Prévention : phrases P200	Tenir à l'écart de la chaleur, des surfaces chaudes, des étincelles, des flammes nues et de toute autre source d'inflammation. Ne pas fumer. Mise à la terre/liaison équipotentielle du récipient et du matériel de réception.	Tenir à l'écart de la chaleur, des surfaces chaudes, des étincelles, des flammes nues et de toute autre source d'inflammation. Ne pas fumer. Maintenir le récipient fermé de manière étanche. Mise à la terre et liaison équipotentielle du récipient et du matériel de réception. Utiliser du matériel électrique/ de ventilation/ d'éclairage antidéflagrant. Utiliser des outils ne produisant pas d'étincelles.	Porter des gants de protection/ des vêtements de protection/ un équipement de protection des yeux/ du visage.

	Benzaldéhyde	dba	
Formules	C ₆ H ₅ CHO / 106,12 g·mol ⁻¹	C ₁₇ H ₁₄ O / 234,29 g·mol ⁻¹	
			
Ébullition (° C)	179 °C	Décomposition	
Fusion (° C)	-26 °C	113 °C	
Densité	1,04		
Solubilité (25 °C)	Eau : 4 %. Éthanol, éther, acétone.	Insoluble à l'eau Éthanol : peu soluble à froid / soluble à chaud.	
Aspect	Liquide incolore	Solide jaune vif	
Pictogrammes			
Avertissement	Attention	N'est pas une substance ni un mélange dangereux conformément au règlement (CE) No. 1272/2008.	
DANGER : phrases H	Nocif en cas d'ingestion.		
PRUDENCE/ prévention : phrases P200	*		