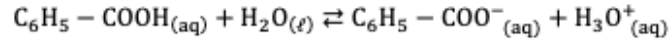


Correction activité numérique 10.2 : Un conservateur alimentaire : l'acide benzoïque

Question 1 :

L'équation de la réaction modélisant le transfert d'un ion hydrogène de l'acide benzoïque vers l'eau :



La solution S contient 0,122 g d'acide benzoïque pour 100,0 mL de solution.

La quantité de matière initiale d'acide benzoïque vaut :

$$n(\text{C}_6\text{H}_5 - \text{COOH}) = \frac{m(\text{C}_6\text{H}_5 - \text{COOH})}{M(\text{C}_6\text{H}_5 - \text{COOH})} = \frac{0,122}{122,0} = 1,00 \times 10^{-3} \text{ mol}$$

Équation de la réaction		$\text{C}_6\text{H}_5 - \text{COOH}_{(\text{aq})} + \text{H}_2\text{O}_{(\text{l})} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_5 - \text{COO}^-_{(\text{aq})} + \text{H}_3\text{O}^+_{(\text{aq})}$			
État du système	Avancement x (mol)	Quantités de matière (mol)			
État initial	$x = 0$	$1,00 \times 10^{-3}$	Excès	0	0
État intermédiaire	x	$1,00 \times 10^{-3} - x$	Excès	x	x
État final	x_f	$1,00 \times 10^{-3} - x_f$	Excès	x_f	x_f

Question 2 :

Le pH de la solution S vaut 3,1.

Le pH de la solution S_1 vaut 3,6.

Le pH de la solution S_2 vaut 4,3.

Question 3 :

a) On sait que pour la réaction étudiée : $K_A = \frac{[\text{C}_6\text{H}_5 - \text{COO}^-]_{\text{éq}} \times [\text{H}_3\text{O}^+]_{\text{éq}}}{[\text{C}_6\text{H}_5 - \text{COOH}]_{\text{éq}}}$

Or d'après le tableau d'avancement la quantité de matière formée en ions oxonium et benzoate est la même.

Pour un volume constant on a donc : $[\text{C}_6\text{H}_5 - \text{COO}^-]_{\text{éq}} = [\text{H}_3\text{O}^+]_{\text{éq}}$

D'où : $K_A = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]_{\text{éq}}^2}{c - \frac{x_f}{V}} = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]_{\text{éq}}^2}{c - [\text{H}_3\text{O}^+]_{\text{éq}}}$

b) Calculons la concentration initiale en solution S de l'acide benzoïque :

$$C = \frac{n}{V} = \frac{1,00 \times 10^{-3}}{100,0 \times 10^{-3}} = 1,00 \times 10^{-2} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$$

Concentration initiale de la solution S_1 en acide benzoïque : $C_1 = \frac{C}{10} = 1,00 \times 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$

Concentration initiale de la solution S_2 en acide benzoïque : $C_2 = \frac{C}{100} = 1,00 \times 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$

c) On sait que :

- $[\text{H}_3\text{O}^+] = C^{\circ} \times 10^{-\text{pH}}$

- $K_A = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]_{\text{éq}}^2}{c - [\text{H}_3\text{O}^+]_{\text{éq}}}$

- $\text{p}K_A = -\log K_A$

D'où :

Solution	S	S ₁	S ₂
Concentration initiale en acide benzoïque (mol · L ⁻¹)	$C = 1,00 \times 10^{-2}$	$C_1 = 1,00 \times 10^{-3}$	$C_2 = 1,00 \times 10^{-4}$
Concentration en ions oxonium (mol · L ⁻¹)	$10^{-3,1}$	$10^{-3,6}$	$10^{-4,3}$
pK _A	4,2	4,1	4,3

Exemple de calcul pour la solution S :

$$pK_A = -\log \frac{(10^{-pH})^2}{C - 10^{-pH}} = -\log \frac{(10^{-3,1})^2}{1,00 \times 10^{-2} - 10^{-3,1}} = 4,2$$

On fait la moyenne sur les valeurs trouvées : pK_A = 4,2.

Question 4 :

a) La dose maximale en acide benzoïque est de 160 mg · L⁻¹.

$$C_i = \frac{C_m}{M} = \frac{160 \times 10^{-3}}{122,0} = 1,31 \times 10^{-3} \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$$

b) et c) Programme Python complété :

```
1 # Importation des bibliothèques nécessaires
2 import math
3 from matplotlib import pyplot as plt
4 import numpy as np
5
6 Ka = 10**(-4.2) # valeur de la constante d'acidité du couple
7 Ci = 1.311E-3 # concentration molaire initiale en acide benzoïque
8
9 delta = Ka**2 + 4*Ka*Ci # calcule le discriminant
10 h = (-Ka + delta**0.5)/2 # calcule la valeur de la racine positive de
    l'équation du second degré
11 pH = -math.log10(h) # calcule le pH de la solution à l'équilibre
12 tau = h/Ci # calcule le taux d'avancement final
13
14 print("Le pH de la boisson vaut : ", pH) # affiche la valeur du pH de
    la boisson
15 print("Le taux d'avancement final vaut : ", tau) # affiche la valeur
    du taux
```

Résultats obtenus dans la console Python :

```
>>>
Le pH de la boisson vaut : 3.588741577518224
Le taux d'avancement final vaut : 0.19663269463792002
>>>
```

Le taux d'avancement final est inférieur à 99,9 %, la réaction est non totale, elle est équilibrée.

Question 5 :

a) D'après la relation d'Henderson : $\text{pH} = \text{pK}_A + \log \frac{[\text{A}^-]_{\text{éq}}}{[\text{AH}]_{\text{éq}}}$

$$\text{pH} - \text{pK}_A = \log \frac{[\text{A}^-]_{\text{éq}}}{[\text{AH}]_{\text{éq}}}$$

$$10^{\text{pH} - \text{pK}_A} = \frac{[\text{A}^-]_{\text{éq}}}{[\text{AH}]_{\text{éq}}}$$

$$[\text{A}^-]_{\text{éq}} = [\text{AH}]_{\text{éq}} \times 10^{\text{pH} - \text{pK}_A}$$

b) D'après la conservation de la quantité de matière :

$$C_i = [\text{AH}]_{\text{éq}} + [\text{A}^-]_{\text{éq}}$$

$$[\text{AH}]_{\text{éq}} = C_i - [\text{A}^-]_{\text{éq}}$$

$$[\text{AH}]_{\text{éq}} = C_i - [\text{A}^-]_{\text{éq}} \times 10^{\text{pH} - \text{pK}_A}$$

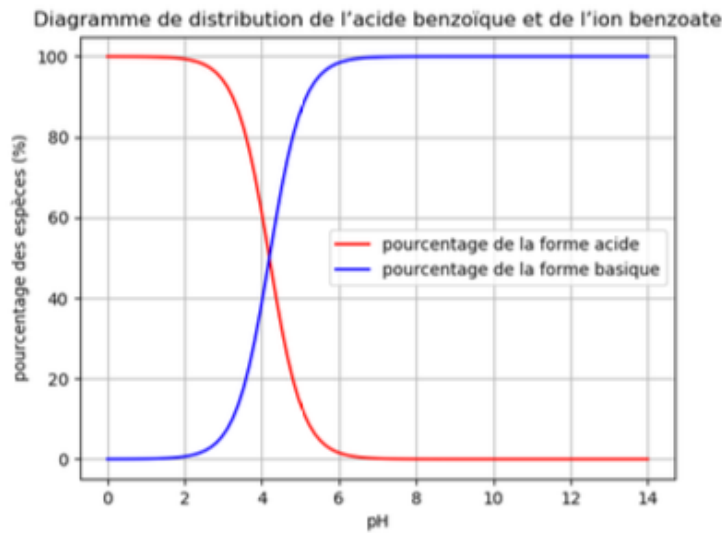
$$[\text{AH}]_{\text{éq}} \times (1 + 10^{\text{pH} - \text{pK}_A}) = C_i$$

$$[\text{AH}]_{\text{éq}} = \frac{C_i}{1 + 10^{\text{pH} - \text{pK}_A}}$$

c) Programme Python :

```
1 import numpy as np
2 from matplotlib import pyplot as plt
3
4 pka = 4.2 # pKa du couple acide base considéré
5 Ci = 1.311E-3 # concentration initiale en acide benzoïque
6 pH = np.linspace(0, 14, 100) # crée 100 valeurs de pH comprises entre
7 # 0 et 14
8 AH = Ci / (1 + 10**(pH - pka)) # calcule la concentration en acide
9 # benzoïque notée AH à l'équilibre
10 A = AH * 10**(pH - pka) # calcule la concentration en ions benzoate
11 # notée A à l'équilibre
12 pAH = AH / Ci * 100 # calcule le pourcentage d'acide benzoïque
13 pA = A / Ci * 100 # calcule le pourcentage d'ions benzoate
14
15 plt.title("Diagramme de distribution de l'acide benzoïque et de l'ion
16 # benzoate") # titre du graphique
17 plt.xlabel("pH") # légende de l'axe des abscisses
18 plt.ylabel("pourcentage des espèces (%)")
19 plt.grid(True) # affiche un quadrillage
20 plt.plot(pH, pAH, c = 'red', label = "pourcentage de la forme
21 # acide") # trace la courbe pAH en fonction de pH en rouge et légende cette
22 # courbe
23 plt.plot(pH, pA, c = 'blue', label = "pourcentage de la forme
24 # basique") # trace la courbe pA en fonction de pH en bleu et
25 # légende cette courbe
26 plt.legend() # affiche la légende
27 plt.show() # affiche le graphique
```

Fenêtre graphique obtenue :



d) À l'aide du réticule de la fenêtre graphique, on détermine à $\text{pH} = 2,5$ le pourcentage de la forme acide et celui de la forme basique. On trouve 2,5 % d'ions benzoate et 97,5 % d'acide benzoïque.

La concentration initiale en acide benzoïque vaut $C_i = 1,31 \times 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$.

La concentration en acide benzoïque dans la boisson vaut :

$$[\text{AH}] = \frac{C_i \times 97,5}{100} = \frac{1,31 \times 10^{-3} \times 97,5}{100} = 1,28 \times 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$$

$$[\text{A}^-]_{\text{éq}} = \frac{C_i \times 2,5}{100} = \frac{1,31 \times 10^{-3} \times 2,5}{100} = 3,28 \times 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$$

La boisson contient à la fois de l'acide benzoïque et des ions benzoate, il faut donc mentionner sur l'étiquette les codes E210 et E211.