

Partie 1 : La molécule d'ibuprofène :**1.1. (0,25 pt)**

Groupe carboxyle caractéristique de la fonction acide carboxylique

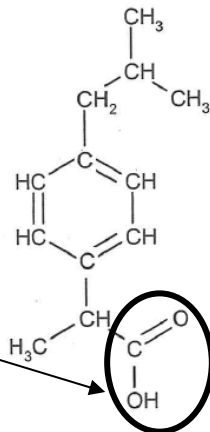


Figure 1 (question 1.1)

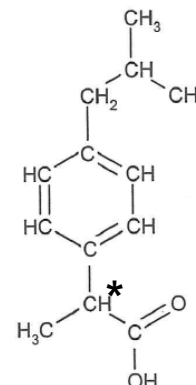
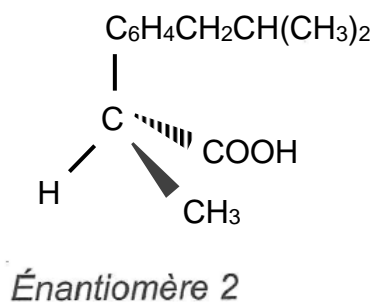
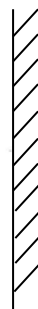
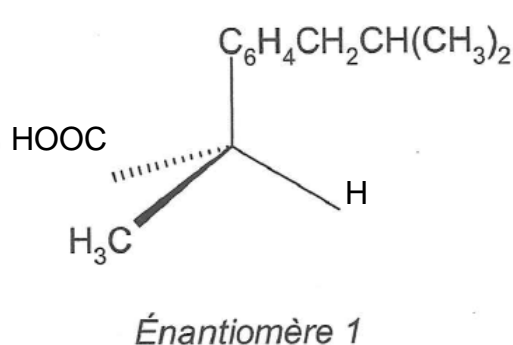


Figure 2 (question 1.2.1)

1.2.1. (0,25 pt) La molécule d'ibuprofène possède un seul atome de carbone asymétrique, elle est donc chirale.

(05 pt) On repère par un astérisque (*) l'atome de carbone asymétrique.

1.2.2. (0,25 pt) Deux énantiomères sont images l'un de l'autre dans un miroir plan, mais non superposables.

1.2.3. (0,25 pt)**(0,5 pt)**

1.3.1. (0,5 pt) La bande n°1 est fine, de forte intensité et correspond à un nombre d'onde σ d'environ 1700 cm^{-1} caractéristique de la liaison C = O d'un acide carboxylique.

(0,5 pt) La bande n°2 est large et centrée autour de $\sigma = 3000\text{ cm}^{-1}$, elle peut caractériser les liaisons C – H ou/et la liaison O-H de l'acide carboxylique.

1.3.2. (0,5 pt) Le signal (g) est un singulet ayant un déplacement à 12 ppm, ce qui caractérise l'hydrogène du groupement OH du groupe carboxyle.

1.3.3. (0,25 pt)

L'hydrogène d'un groupe hydroxyle n'est pas couplé avec d'autres H, le pic correspondant sera donc un singulet.

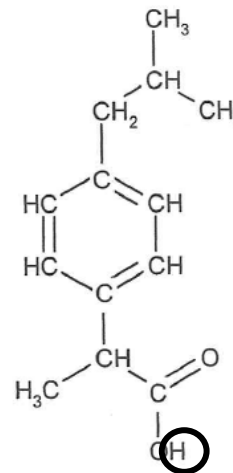


Figure 4 (question 1.3.2)

1.3.4. (1pt) Le signal (a) a un déplacement d'environ 1 ppm, ce qui correspond à des hydrogène d'un groupement CH₃; de plus l'intégration indique six fois plus d'atomes d'hydrogène que pour le pic (g), il s'agit donc des deux groupements CH₃ présents dans la molécule.

Remarque : Ce méthyle ne doit pas être pris en compte l'intégration indiquerait trois fois plus d'atomes hydrogène que pour le pic (g)

1.3.5. (0,25 pt) Le carbone voisin des deux groupements CH₃ est porteur d'un seul hydrogène, le spectre RMN montrera un doublet conformément à la règle du (n+1)-uplet.

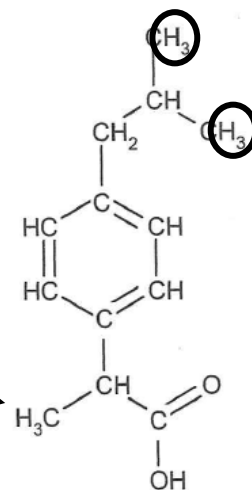


Figure 5 (question 1.3.4)

Partie 2 : Synthèse de l'ibuprofène

2.1.1. (0,5 pt) L'équation de l'étape 1 est $C_xH_yO_z + C_4H_6O_3 \rightarrow C_{12}H_{16}O + C_2H_4O_2$

Conservation du C : $x + 4 = 12 + 2$ donc $x = 10$

Conservation de H : $y + 6 = 16 + 4$ donc $y = 14$

Conservation de O : $z + 3 = 1 + 2$ donc $z = 0$

La molécule 1 a pour formule brute : **C₁₀H₁₄**

On peut plus simplement transformer la formule topologique en formule semi-développée, puis compter les atomes.

2.1.2. (0,25 pt + 0,25 pt) Au cours de l'étape 2 il se produit une **addition** : des atomes d'hydrogène sont ajoutés aux atomes d'une liaison multiple. Tous les atomes des réactifs se retrouvent dans les produits.

2.1.3. (0,25 pt + 0,25 pt) Le carbone est site **accepteur de doublets d'électrons**, en effet l'oxygène étant plus électronégatif que le carbone, il a tendance à attirer vers lui les électrons en portant une charge partielle δ^- , le carbone portera alors une charge partielle δ^+ .

2.2. (0,75 pt)

$C_{10}H_{14} + C_4H_6O_3 + C_2H_5ONa + C_4H_7ClO_2 + H_3O^+ + NH_2OH + 2 H_2O \rightarrow C_{13}H_{18}O_2 + \text{sous-produits}$

$$UA = \frac{M(\text{produit souhaité})}{\sum_j M_j(\text{réactif})}$$

$$UA = \frac{M(C_{13}H_{18}O_2)}{M(C_{10}H_{14}) + M(C_4H_6O_3) + M(C_2H_5ONa) + M(C_4H_7ClO_2) + M(H_3O^+) + M(NH_2OH) + 2.M(H_2O)}$$

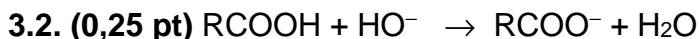
$$UA = \frac{206,0}{134,0 + 102,0 + 68,0 + 122,5 + 19,0 + 33,0 + 2 \times 18,0} = \frac{206,0}{514,5} = 40,04\%$$

2.3. (0,25 pt) Plus l'indicateur est proche de 1 et plus le procédé est économe en termes d'utilisation des atomes (moins la synthèse génère des déchets). Le procédé BHC avec un UA de 77% (= 0,77) répond mieux à la minimisation des déchets que le procédé Boots (UA de 40%).

Partie 3 : Dosage de l'ibuprofène dans un médicament

3.1. (0,5 pt) L'ibuprofène se dissout dans l'éthanol grâce à sa grande solubilité dans ce dernier. Les excipients ne sont pas dissous lors de cette étape. Au cours de la filtration, ils seront retenus dans le filtre.

Cette étape a permis de purifier l'ibuprofène.



3.3. (0,25 pt) À l'équivalence l'ibuprofène est totalement consommé. Au delà de l'équivalence, les ions HO^- ajoutés ne réagissent plus, ils sont alors responsables d'une forte augmentation du pH. La phénolphtaléine change de couleur (incolore \rightarrow rose) et permet le repérage de l'équivalence.

3.4. (0,75 pt) À l'équivalence les réactifs ont été introduits dans les proportions stœchiométriques :
 $n(\text{RCOOH})_{\text{initiale}} = n(\text{HO}^-)_{\text{versée}}$

$$\frac{m(\text{RCOOH})}{M(\text{RCOOH})} = c_B \cdot V_{\text{éq}}$$

$$m(\text{RCOOH}) = c_B \cdot V_{\text{éq}} \cdot M(\text{RCOOH})$$

$$m(\text{RCOOH}) = 1,50 \times 10^{-1} \times 12,8 \times 10^{-3} \times 206,0 = 0,396 \text{ g} = \mathbf{396 \text{ mg}}$$

3.5. (0,25 pt) Écart relatif : $\frac{|m_{\text{exp}} - m|}{m}$

$$\text{Écart relatif} = \frac{|396 - 400|}{400} = 1,00\%$$

Ce faible écart relatif confirme l'indication portée sur l'étiquette du médicament.