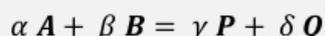


Activité 2 : Économie d'atomes

La chimie verte s'articule autour de douze principes, énoncés en 1998 par les chimistes américains Paul Anastas et John C. Warner, pères de la chimie verte. Ils reposent sur l'aspect environnemental et économique ainsi que sur la sécurité.

DOCUMENT 1 : Principe 2, l'économie d'atome E_a

La notion traditionnelle de rendement ne suffit plus pour évaluer l'efficacité des procédés chimiques. Le deuxième principe de la chimie verte est un principe d'économie d'atomes. Tous les atomes rentrant dans la composition chimique des réactifs d'une réaction doivent nécessairement se retrouver dans celle des produits formés. S'il existe des sous-produits non valorisables, les atomes qui rentrent dans leur composition sont "perdus". Une réaction chimique devra donc intégrer le maximum des atomes des réactifs dans le produit souhaité.



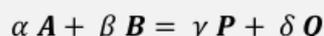
A et **B** sont les deux réactifs, **P** est le produit principal et **Q** un sous-produit. α , β , γ , δ , sont les coefficients stœchiométriques. L'économie d'atomes est définie :

$$E_a = \frac{\gamma M_P}{\alpha M_A + \beta M_B} = \frac{\gamma M_P}{\gamma M_P + \delta M_Q}$$

Dans le cadre de la chimie verte, une réaction est conçue pour avoir une économie d'atomes la plus proche possible de 1. La réaction idéale est une réaction à économie d'atomes de 100 %, telle une réaction d'addition où deux produits **A** et **B** ne donnent qu'un seul produit **P**.

DOCUMENT 2 : Facteur environnemental E_M

Pour une réaction :



A et **B** sont les deux réactifs, **P** est le produit principal et **Q** un sous-produit. α , β , γ , δ , sont les coefficients stœchiométriques. On peut définir le facteur environnemental molaire E_M , qui est le rapport théorique de la masse des déchets sur la masse du produit désiré :

$$E_M = \frac{\delta M_Q}{\gamma M_P}$$

La valeur de E_M doit être la plus faible possible ; elle est minimale ($E_M = 0$) si aucun sous-produit n'est formé et si le rendement est maximal.

DOCUMENT 3 : Synthèse de l'octan-2-one

L'octan-2-one (ingrédient aromatique, présent sous forme de traces dans les pommes, les abricots, les bananes, les papayes, le thé noir, le café...) peut être synthétisé par oxydation de l'octan-2-ol de deux façons :

- Oxydation avec le réactif de Jones ($\text{CrO}_3 / \text{H}_2\text{SO}_4$)



- Oxydation dans les conditions de Noyori (H_2O_2 , catalyse par Na_2WO_4 et catalyseur à transfert de phase)



DOCUMENT 4 : Extraits de fiches données de sécurité et données



TRIOXYDE DE CHROME

Danger

H271 - Peut provoquer un incendie ou une explosion ; comburant puissant
H350 - Peut provoquer le cancer
H400 - Peut induire des anomalies génétiques
H361D - Susceptible de nuire à la fertilité
H330 - Mortel par inhalation
H311 - Toxique par contact cutané
H301 - Toxique en cas d'ingestion
H372 - Risque avéré d'effets graves pour les organes à la suite d'expositions répétées ou d'une exposition prolongée
H314 - Provoque de graves brûlures de la peau et de graves lésions des yeux
H334 - Peut provoquer des symptômes allergiques ou d'asthme ou des difficultés respiratoires par inhalation
H317 - Peut provoquer une allergie cutanée
H410 - Très toxique pour les organismes aquatiques, entraîne des effets néfastes à long terme

Nota : Les conseils de prudence P sont sélectionnés selon les critères de l'annexe 1 du règlement CE n° 1272/2008.
215-607-8



PEROXYDE D'HYDROGÈNE...(>= 70 %)

Danger

H271 - Peut provoquer un incendie ou une explosion ; comburant puissant
H302 - Nocif en cas d'ingestion
H314 - Provoque de graves brûlures de la peau et de graves lésions des yeux

H332 - Nocif par inhalation
H335 - Peut irriter les voies respiratoires

Nota : Les conseils de prudence P sont sélectionnés selon les critères de l'annexe 1 du règlement CE n° 1272/2008.
231-765-0



ACIDE SULFURIQUE... (≥ 15 %)

Danger

H314 - Provoque de graves brûlures de la peau et de graves lésions des yeux

Nota : Les conseils de prudence P sont sélectionnés selon les critères de l'annexe 1 du règlement CE n° 1272/2008.
231-639-5

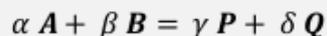
$M(\text{octan-2-one}) = 128,1 \text{ g/mol}$; $M(\text{octan-2-ol}) = 130,2 \text{ g/mol}$; $M(\text{CrO}_3) = 100,0 \text{ g/mol}$;
 $M(\text{H}_2\text{O}_2) = 34,03 \text{ g/mol}$; $M(\text{H}_2\text{SO}_4) = 98,1 \text{ g/mol}$; $M(\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3) = 392,2 \text{ g/mol}$; $M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}$.

1) Calculer l'économie d'atomes et le facteur environnemental pour les deux voies d'obtention de l'octan-2-one.

2) Comparer les deux voies d'obtention de l'octan-2-one au regard de la chimie verte.

DOCUMENT 4 : L'économie d'atome E_a

Une réaction chimique doit intégrer le maximum des atomes des réactifs dans le produit souhaité.



A et **B** sont les deux réactifs, **P** est le produit principal et **Q** un sous-produit. α , β , γ , δ , sont les coefficients stœchiométriques. L'économie d'atomes est définie :

$$E_a = \frac{\gamma M_P}{\alpha M_A + \beta M_B} = \frac{\gamma M_P}{\gamma M_P + \delta M_Q}$$

Dans le cadre de la chimie verte, une réaction est conçue pour avoir une économie d'atomes la plus proche possible de 1. La réaction idéale est une réaction à économie d'atomes de 100 %, telle une réaction d'addition où deux produits **A** et **B** ne donnent qu'un seul produit **P**.

Sur les schémas de synthèse sont représentés en couleur différente les parties des molécules non présentes dans le produit final.

1. Analyser les deux voies de synthèse de l'ibuprofène selon les 12 principes de la chimie verte (Économie d'atomes, énergie, environnement, ...). En déduire laquelle des deux voies est la plus récente.
2. En supposant un rendement de 90 % pour chaque étape, calculer le rendement global des deux voies de synthèse. Conclure.

Données :

$M(\text{H}) = 1 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$; $M(\text{C}) = 12 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$; $M(\text{N}) = 14 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$; $M(\text{O}) = 16 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$;
 $M(\text{Na}) = 22 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$; $M(\text{S}) = 32 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$, $M(\text{Cl}) = 35 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$;