

Lors des synthèses chimiques, La diminution du temps de réaction et l'augmentation du rendement de chacune des étapes, constituent des enjeux majeurs notamment à l'échelle industrielle. Il est donc nécessaire de trouver les paramètres physico-chimiques idéaux afin d'optimiser la synthèse tout en maîtrisant les coûts de production et l'impact sur l'environnement.

I. Rendement d'une synthèse

1. Définitions

Le rendement d'une synthèse organique est défini comme le **rapport** entre la quantité de matière de produit n_{obtenu} obtenu expérimentalement et la quantité de matière n_{max} que l'on pourrait obtenir si la réaction était totale.

$$\eta = \frac{n_{\text{obtenu}}}{n_{\text{max}}} * 100$$

Le rendement peut également s'exprimer comme le rapport entre la masse m_{obtenue} obtenue expérimentalement et la masse théoriquement attendue $m_{\text{théorique}}$ si la réaction était totale.

$$\eta = \frac{m_{\text{obtenue}}}{m_{\text{théorique}}} * 100$$

Pour une synthèse se faisant en plusieurs étapes, le rendement global de la synthèse s'exprime comme **le produit du rendement de chacune des étapes**.

$$\eta_{\text{total}} = \eta_1 \times \eta_2 \times \dots$$

2. Objectifs

Le calcul du rendement permet de déterminer l'**efficacité** d'une synthèse chimique. Il est compris entre 0 et 100 %. Lors des différentes étapes (synthèse, traitement, purification, ...) il y a nécessairement des pertes de matière. Le chimiste cherche à réunir les conditions opératoires pour optimiser une synthèse et tendre vers un rendement de 100 %.

II. Optimisation du rendement d'une synthèse

1. Rappel

Lors d'une transformation chimique, un **état final** peut faire coexister les réactifs et les produits. Cet état final est appelé **état d'équilibre**. **Cet état est caractérisé par une constante d'équilibre et un quotient d'équilibre**

Pour la réaction suivante : $\alpha A_{(aq)} + \beta B_{(aq)} = \gamma C_{(aq)} + \delta D_{(aq)}$

$$K^0(T) = \frac{[C]_{eq}^{\gamma} \cdot [D]_{eq}^{\delta}}{[A]_{eq}^{\alpha} \cdot [B]_{eq}^{\beta}} \quad \text{et} \quad Qr(T) = \frac{[C]^{\gamma} \cdot [D]^{\delta}}{[A]^{\alpha} \cdot [B]^{\beta}}$$

- Si $Qr < K^0$, le système évolue spontanément dans le **sens direct** : la transformation chimique s'accompagne de la consommation des réactifs et de la formation des produits.
- Si $Qr > K^0$, le système évolue spontanément dans le **sens indirect** : la transformation chimique s'accompagne de la formation des réactifs et de la consommation des produits.
- Si $Qr = K^0$, le système n'évolue pas à l'échelle macroscopique : **l'état d'équilibre du système est atteint**.

2. Amélioration du rendement

Améliorer le rendement d'une synthèse correspond à faire évoluer le système dans le sens de formation des produits (sens direct) pour cela on peut jouer sur différents paramètres du système qui influenceront sur la valeur de Q_r ou bien sur des paramètres qui influenceront directement sur l'état d'équilibre tels que :

- ajout d'un **excès de réactif** (le moins cher ; ni un solide ; ni le solvant)
- **élimination d'un produit** au fur et à mesure de sa formation (ni un solide ; ni le solvant)
- changement d'un des réactifs au profit d'un dérivé plus réactif.

III. Optimisation de la cinétique d'une synthèse

1. Influence de la température et de la concentration

A l'échelle microscopique l'efficacité et la vitesse d'une transformation chimique dépend directement du nombre de **chocs efficaces** (frontaux) entre les réactifs.

Plus la **température** du milieu réactionnel est élevée, plus l'**agitation** des réactifs sera grande, plus la vitesse de réaction sera grande.

Plus la **concentration** du(des) réactif(s) est élevée et plus le nombre de **chocs** augmente.

La **température** et la **concentration** sont appelés **facteurs cinétiques** d'une réaction chimique

Remarque : pour certains réactifs, leur concentration n'a pas d'influence sur la vitesse.

2. Influence d'un catalyseur

Un catalyseur est une espèce chimique qui facilite une réaction chimique et **augmente donc sa vitesse**. Il est consommé au cours de la réaction puis restitué. Sa quantité reste donc constante entre l'état initial et l'état final.

Il existe plusieurs types de catalyseurs :

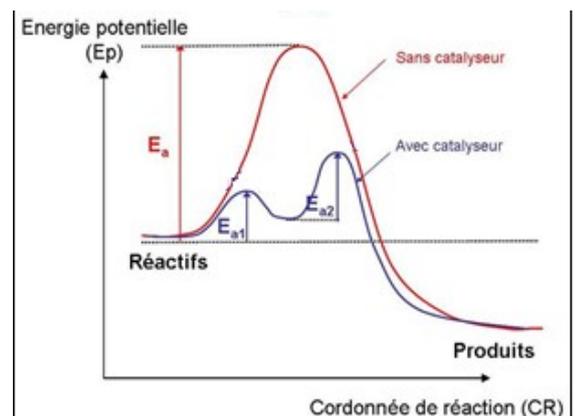
- Une catalyse est dite « **homogène** » quand le(s) réactif(s) et le catalyseur constituent une seule phase.

Elle est dite « **hétérogène** » s'ils ne sont pas dans la même phase.

Au cours d'une transformation chimique, l'énergie du système évolue. L'énergie potentielle du système est représentée en fonction des coordonnées de réaction.

L'énergie d'activation est l'énergie qu'il faut fournir au système (via l'agitation thermique) pour passer des réactifs à l'état de transition. Plus l'énergie d'activation est élevée et plus la réaction est lente.

Le **catalyseur** permet d'abaisser l'énergie d'activation ou d'emprunter un autre chemin réactionnel avec une énergie d'activation plus faible.



IV. La chimie verte

La découverte des conditions physico-chimiques pour l'obtention du meilleur rendement possible n'est pas le seul axe d'optimisation à considérer. Il est nécessaire de prendre également en compte les aspects liés à la sécurité, le coût de la synthèse et l'impact sur l'environnement.

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.

La chimie verte doit s'inscrire dans un **développement économiquement efficace et durable** ; de nouveaux procédés de synthèse doivent prendre en compte **l'aspect écologique**. Une partie des activités de la chimie verte consiste donc à diminuer la quantité de sous-produits des réactions chimiques et les **déchets toxiques** (dont les solvants de réactions) mais également de **diminuer la consommation énergétique** d'un procédé.

