

09 Optimisation d'une synthèse

Cours

Objectifs

- Chercher et exploiter une FDS et repérer les données relatives à la toxicité des espèces chimiques.
- Déterminer le rendement d'une synthèse en une ou plusieurs étapes.
- Identifier les facteurs permettant d'optimiser le rendement : changement de réactif, excès d'un réactif, élimination d'un produit.
- Identifier les facteurs permettant d'accélérer une réaction : changement de température, de concentration, utilisation d'un catalyseur.
- Comparer des protocoles de synthèse et choisir le plus performant en termes de rendement, de coût et de respect de l'environnement, en s'appuyant sur les principes de la chimie verte.
- Choisir et mettre en œuvre une variante d'un protocole pour améliorer le rendement d'une synthèse.



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

I. Sécurité : La Fiche De Données De Sécurité Ou FDS

- Une fiche de données de sécurité liste les dangers que présente une substance ou un mélange et indique comment les stocker, les manipuler ou les éliminer dans des conditions satisfaisantes de sécurité.
- La FDS contient des informations relatives aux effets potentiels d'une exposition au produit concerné sur la santé et à la façon de travailler en toute sécurité avec cette substance ou ce mélange, ainsi que des informations sur les dangers découlant des propriétés physico-chimiques ou des effets environnementaux, sur l'utilisation, le stockage, la manipulation et les mesures d'intervention d'urgence.

↳ Les informations suivantes sont disponibles :

1. Identification	déversement accidentel	12. Données écologiques
2. Identification des dangers	7. Manutention et stockage	13. Données sur l'élimination
3. Composition / information sur les composants	8. Contrôle de l'exposition / protection individuelle	14. Informations relatives au transport
4. Premiers soins	9. Propriétés physiques et chimiques	15. Informations sur la réglementation
5. Mesures à prendre en cas d'incendie	10. Stabilité et réactivité	16. Autres informations
6. Mesures à prendre en cas de	11. Données toxicologiques	

II. Rendement D'une Synthèse En Une Ou Plusieurs Étapes

Rendement

Le rendement, noté r , d'une synthèse se calcule en faisant le rapport entre la quantité de matière de produit réellement formé n_{obtenue} et la quantité de matière maximale de produit que l'on pourrait

$$\text{obtenir si la réaction était totale } n_{\text{maximale}}. \quad r = \frac{n_{\text{obtenue}}}{n_{\text{maximale}}}$$

- Lors d'une synthèse en plusieurs étapes, le rendement global est égal au produit des rendements de chaque étape.

↳ Une synthèse en trois étapes de 90 % de rendement chacune, a un rendement total : $r = 0,9 \times 0,9 \times 0,9 = 72,9 \%$.

III. Amélioration Du Rendement

Améliorer le rendement d'une synthèse correspond à faire évoluer le système dans le sens de formation des produits c'est à dire le sens direct. Lorsqu'il subit une perturbation, l'équilibre évolue spontanément en sorte que Q_r se rapproche de K .

- Une diminution de Q_r à partir de l'équilibre, tend à un rétablissement de celui-ci, c'est à dire une évolution dans le sens direct.

↳ Excès d'un réactif

Partant de l'équilibre, en augmentant la quantité d'un réactif, Q_r diminue et l'équilibre évolue dans le sens direct : consommation de ce réactif excédentaire et formation des produits.

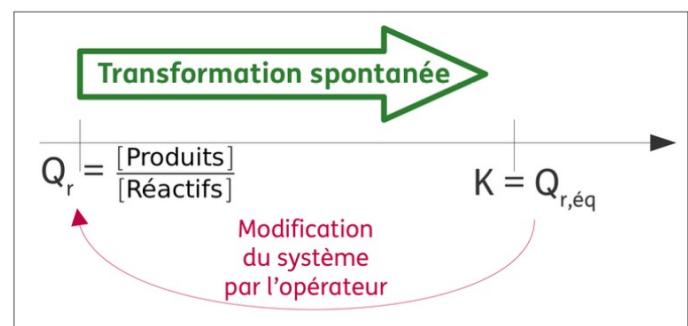
↳ Élimination d'un produit

Partant de l'équilibre, en éliminant un produit, Q_r diminue et l'équilibre évolue dans le sens direct : formation du produit manquant et consommation des réactifs.

- Changement d'un réactif

L'obtention d'un même produit peut se faire par plusieurs voies différentes. Dans ces conditions, certains réactifs peuvent être plus efficaces que d'autres.

↳ Un ester peut être synthétisé à partir d'un acide carboxylique (équilibre limité) ou à partir d'un anhydride (équilibre très déplacé)



Pistes pour améliorer le rendement

- Mettre un réactif en excès
- Éliminer un produit
- Changer un réactif

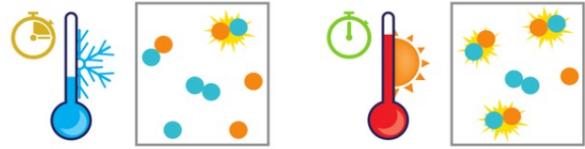
IV. Facteurs Cinétiques

La cinétique d'une synthèse étudie la vitesse à laquelle cette dernière se déroule, ainsi que les facteurs susceptibles de l'améliorer. A l'échelle microscopique l'efficacité et la vitesse d'une transformation chimique dépend directement du nombre de chocs efficaces entre les réactifs.

• Température

Plus la température du milieu réactionnel est élevée, plus l'agitation des molécules des réactifs est grande, plus les chocs entre réactifs sont nombreux, plus la vitesse de réaction est grande.

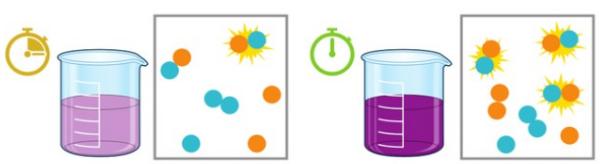
- Le nombre de chocs efficaces augmente avec la température.



• Concentration des réactifs

L'augmentation des concentrations des réactifs augmente la probabilité de rencontre des molécules des réactifs. Le nombre de chocs augmente, la vitesse de réaction est grande.

- Le nombre de chocs efficaces augmente avec la concentration des réactifs.



Facteurs cinétiques

Il existe 2 facteurs cinétiques pour influer sur la vitesse d'une réaction

- La température
- La concentration des réactifs

• Catalyseurs

Un catalyseur est une espèce chimique qui facilite une réaction chimique et augmente donc sa vitesse. Même s'il intervient dans le mécanisme réactionnel, le catalyseur est régénéré à la fin de celui-ci. Sa quantité reste donc constante entre l'état initial et l'état final, et il n'apparaît pas dans le bilan de la transformation.

V. Impact Environnemental : Économie D'atomes

L'Économie d'Atomes notée EA d'une synthèse est définie comme le rapport de la masse molaire du produit recherché sur la somme des masses molaires de tous les produits qui apparaissent dans l'équation, en tenant compte des coefficients stoechiométriques.

Calcul de EA

Si le produit C est la cible de la synthèse suivante : $a A + b B \rightarrow c C + d D$, l'économie d'atome

$$\text{est : } EA = \frac{c \times M(C)}{c \times M(C) + d \times M(D)} = \frac{c \times M(C)}{a \times M(A) + b \times M(B)}$$

Si les sous-produits de la réaction ne sont pas tous identifiés, alors la conservation de la matière permet de remplacer le dénominateur par la somme des masses molaires de tous les réactifs.

• Ainsi, si le rendement d'une synthèse est de 100 % mais que l'économie d'atome est de 27 %, cela signifie que seuls 27 % des réactifs sont incorporés dans le produit. Les 73 % qui restent constituent des déchets qu'il faut séparer puis traiter pour les recycler ou les détruire, avec un impact environnemental et financier important. Un procédé sera donc d'autant plus efficace, que son utilisation atomique sera proche de 100 %.