



Synthèse d'une espèce chimique organique

Il existe plusieurs de millions de molécules répertoriées dans les laboratoires du monde entier. La plupart de ces molécules n'existent pas dans la nature, et celles qui existent dans la nature n'y sont généralement plus prélevées. Elles sont synthétisées à partir d'autres molécules.

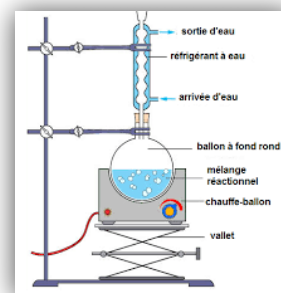
Synthèse = Transformation chimique

Lors d'une synthèse, les réactifs sont mélangés dans un solvant, et leur transformation à travers une réaction chimique conduit à la formation de l'espèce chimique souhaitée (appelée parfois « produit d'intérêt »), mais aussi d'autres espèces.

Ex : La réaction entre l'acide salicylique ($C_7H_6O_3$) et l'anhydride éthanoïque ($C_4H_6O_3$) produit de l'acide acétylsalicylique ($C_9H_8O_4$), plus connu en tant qu'aspirine) et de l'acide éthanoïque ($C_2H_4O_2$).

En agissant sur différents paramètres, on peut notamment modifier la cinétique de la réaction, c'est-à-dire la vitesse à laquelle la réaction se fait. Ainsi, pour accélérer une transformation chimique, on augmente la température. L'inconvénient d'une élévation de température est une évaporation du mélange réactionnel, et donc une perte potentielle de réactifs et/ou de produits. Pour remédier à cela, on utilise un dispositif de chauffage à reflux.

Le chauffage permet une augmentation de la vitesse de la transformation. Les vapeurs qui quittent le mélange réactionnel passent dans un tube. Au contact des parois du tube, refroidi à l'air ou à l'eau, la température des vapeurs, et celles-ci redeviennent liquides (condensation) et retombent dans le mélange réactionnel.



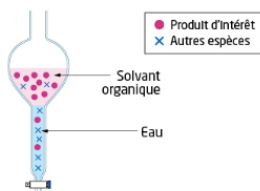
Séparation/Purification

1. Séparation de l'espèce synthétisée.

À la fin de la transformation, l'espèce chimique souhaitée se trouve dans le mélange réactionnel, avec les autres produits de la réaction et les réactifs éventuellement restants (le réactif en excès, par exemple). Il est donc nécessaire de l'extraire du mélange.

- Si l'espèce souhaitée est à l'état solide, une filtration suffit.

Rq : On peut accélérer une filtration en procédant à une filtration sur Buchner. On génère le vide dans le récipient sous le filtre, ce qui a pour effet d'accélérer le passage du liquide à travers le filtre.



- Si l'espèce souhaitée est à l'état liquide, il faut effectuer une extraction par solvant.

Rq : On choisit généralement le solvant d'extraction de manière à ce que seule l'espèce chimique souhaitée y est soluble.

2. Purification

Les processus de séparation ne sont pas parfaits, et l'espèce chimique synthétisée n'est pas pure. Il est alors nécessaire de procéder à une étape de purification.

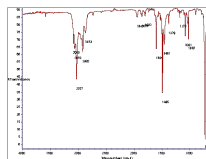
Cela peut se faire par recristallisation (lorsque l'espèce chimique souhaitée est solide) ou par distillation (lorsque l'espèce chimique souhaitée est liquide).



Analyse

Différentes techniques permettent d'analyser le produit obtenu et de s'assurer notamment de sa pureté :

- Spectroscopie
- Chromatographie
- Mesure de Température de changement d'état
- ...



Vers une chimie « verte »

1. Rendement d'une synthèse.

Au cours d'une synthèse chimique, la quantité de produit réellement obtenu est toujours inférieure à la quantité que l'on espérait obtenir théoriquement.

Lors du processus, des réactifs peuvent ne pas avoir réagi, ou s'être évaporés. De même une partie des produits peuvent s'être évaporés ou n'ont pas pu être récupéré.

On peut alors définir le rendement de la synthèse par le rapport de la quantité de produit obtenu sur la quantité de produit espéré :

$$R = \frac{n_{\text{produit expérimental}}}{n_{\text{produit théorique}}} = \frac{m_{\text{produit expérimental}}}{m_{\text{produit théorique}}}$$

Plus la valeur du rendement se rapproche de 1, plus le processus a été efficace.

Rq : Après mesure de la masse expérimentale obtenue, on tombe parfois sur un rendement supérieur à 1. Cela signifie généralement que l'échantillon obtenu n'est pas suffisamment pur (il peut par exemple contenir de l'eau en plus ou moins grande quantité).

2. Utilisation atomique.

La connaissance notamment des conditions expérimentales (température, pression, ...) et de la nocivité des espèces chimiques employées et obtenues doit toujours amener à choisir le chemin le moins « risqué » pour l'individu et pour l'environnement (notamment concernant les déchets produits). On parle alors de chimie verte.

Un des critères objectifs pour effectuer le choix de la « meilleure » stratégie est l'utilisation atomique, UA. Il s'agit d'un indicateur d'efficacité d'un procédé, qui permet de déterminer la proportion de sous-produits, et donc de déchets, obtenus.

$$UA = \frac{M(\text{produit souhaité})}{\sum M(\text{produits obtenus})} = \frac{M(\text{produit souhaité})}{\sum M(\text{réactifs})}$$

Plus l'utilisation atomique d'un procédé est proche de 1, moins il y a de sous-produits, et donc plus le procédé est « propre ».

Rq : Dans la littérature, on utilise parfois le terme d'économie d'atomes (EA) pour désigner ce critère.

Ex : L'ibuprofène, substance active de nombreux médicaments anti-inflammatoires peut être obtenu par deux procédés. Mis au point en 1960, le procédé Boots avait une UA = 0,40. Depuis les années 1990, on privilégie le procédé BHC qui a une UA = 0,77.