

LC 28 : OPTIMISATION D'UN PROCESSUS DE SYNTHÈSE INDUSTRIELLE

Prérequis

- thermochimie
- cinétique chimique
- estérification
- techniques de laboratoires en chimie organique

Idées directrices à faire passer

- problématique très différente du laboratoire
- ici, il faut produire en grande quantité, à moindre coût, minimiser les déchets, la toxicité, les risques...

Bibliographie

- [1] La chimie expérimentale : chimie organique et minérale, Le Maréchal, Dunod
- [2] Chimie organique, Grecias, Tec & Doc
- [3] Chimie industrielle, Perrin, Dunod

Introduction [3] : Donner quelques chiffres sur l'industrie chimique : les tonnages produits par exemple, où les ressources utilisées... On comprend alors combien l'optimisation d'un processus est importante.

I Stratégie d'optimisation industrielle : réaction d'estérification

1 Que cherche-on à optimiser ? [3]

- pas vraiment de réf...
- on cherche à avoir un produit pur, rapidement et avec un rendement optimal

2 Avec quelles contraintes ? [3]

- pas vraiment de réf...
- moindre coût, faible impact environnemental (limiter les produits, les déchets), minimiser les risques sanitaires, limiter la consommation énergétique, limiter la consommation d'eau, limiter la corrosion des installations...
- la référence 3 donne des idées intéressantes sur les méthodes appliquées au génie chimique : une large part est laissée à l'expérimentation test

3 Réaction d'estérification envisagée [1]

- suivre la réaction d'estérification présentée par le Maréchal 5.1.2 p81
- présenter le mécanisme de réaction
- réactifs, catalyseur acide sulfurique
- présenter le dispositif expérimental (sans Dean Stark pour le moment)

II Démarche d'investigation

1 Déplacer l'équilibre : retrait d'eau par Dean Stark [1] et [2]

- en fait, cette réaction est peu déplacée en faveur des produits : $K = 0.22$
- le rendement attendu est donc très faible, ce qui n'est pas industriellement acceptable
- déplacement d'équilibre par élimination d'eau
- présenter le montage Dean Stark (bien expliqué dans le Grécias)
- maintenant, on va chercher à optimiser le processus industriel en partant de ce schéma de départ

2 Influence de la température sur la cinétique de réaction

- faire la même réaction en parallèle sur deux montage à Dean Stark
- suivre l'avancement de la réaction en repérant le volume d'eau formé
- constater que la cinétique de la réaction varie avec la température mais pas la constante d'équilibre (réaction quasi athermique, et de toute façon, l'avancement est toujours maximal!)

3 Travailler en excès d'un réactif peu couteux

- se placer à même température et en excès du réactif le moins couteux (acide acétique)
- là encore relever en fonction du temps le volume d'eau
- vérifier que la cinétique est améliorée
- l'avancement est déjà maximal...

4 Influence des étapes de séparation/purification

- pour l'une des réactions, poursuivre jusqu'à l'obtention de l'ester "pur"
- évaluer alors le rendement de la réaction (non unitaire même si l'avancement est total!) puisqu'on a des pertes lors de nos opérations de séparation/purification
- ces traitements sont tout aussi important que la synthèse elle même
- tenter une CCM sur les composés obtenus pour vérifier leur pureté : normalement un mélange cyclohexane (apolaire)/acétate d'éthyle fonctionne bien (il semble que le cyclohexane pur pourrait aussi suffire)

5 Utiliser de meilleurs réactifs [2]

- $-OH$ est un mauvais groupe partant d'où la nécessité d'une activation acide
- on peut remplacer l'acide carboxylique par un chlorure d'acyle ou un anhydride bien plus réactif

Conclusion : conclure sur la chimie verte et les différentes pistes explorées (conditions plus douces, chimie sans solvant, économie d'atomes, recyclage...)

Q/R

1. Pourquoi le chauffage améliore la cinétique de réaction ? Que représente A dans cette loi ? -> loi d'Arrhénius. A est le facteur préexponentiel qui tient compte de l'efficacité des chocs

2. Quelles réactions sont ralenties par augmentation de la température ? Celle faite en catalyse enzymatique. La température dégrade les enzymes et leur fonctions (l'activation thermique permet d'explorer les conformations de l'enzyme et ses sites deviennent inactifs)

3. Pourquoi travailler en réacteur ouvert dans l'industrie ? Permet de travailler en flux continu. On optimise ainsi le rendement et le processus est simplifié

4. Pourquoi un solvant est-il parfois nécessaire ? Pour permettre de mettre les produits en contact afin qu'ils réagissent, pour dissiper ou apporter l'énergie, pour extraire sélectivement les produits...

5. Donner des exemples de catalyse homogène et hétérogène. Catalyse homogène par ajout d'acide dans la réaction présentée par exemple. Hydrogénation catalytique des alcènes sur substrat métallique...