LC 13: Stratégie de synthèse

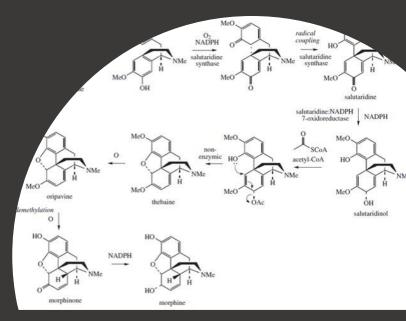
Niveau:

Lycée

Prérequis:

- Groupes caractéristiques
- Catalyseurs
- Mécanismes réactionnel
- Technique de séparation, purification, contrôle de pureté
- Oxydo-réduction
- Équilibre chimique, évolution spontanée d'un système chimique
- Catégories de réaction (Addition, Elimination, substitution)





Synthèse de l'Ibuprofène: Molécule cible



Problématique: Quelles sont les stratégies de synthèse pour obtenir la molécule cible ?

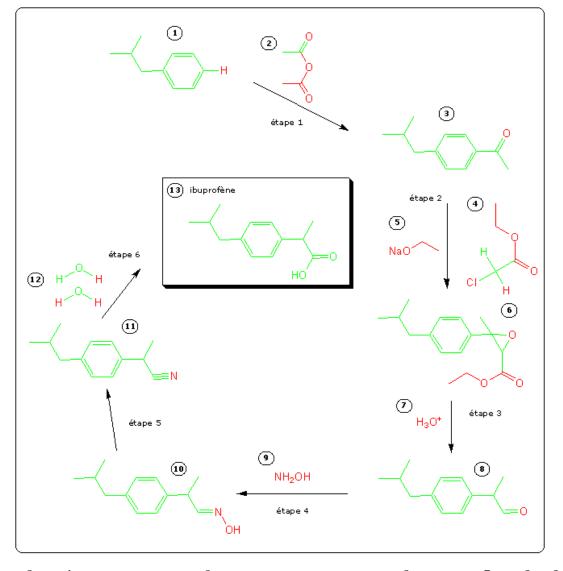
Molécule commerciale

Molécule cible

Synthèse de l'Ibuprofène: Procédé Boots en 6 étapes

Atomes dans la molécule cible

Atomes formant des sous-produits



Synthèse multi-étapes complexe, on y reviendra en fin de leçon

Paraaminophénol Anhydride éthanoïque

Paracétamol



Paraaminophénol Anhydride éthanoïque

Paracétamol

Acide éthanoïque

Groupes caractéristiques identifiés

Groupe hydroxyle

Groupe amine

Groupe amide

Banque de réaction et chimiosélectivité

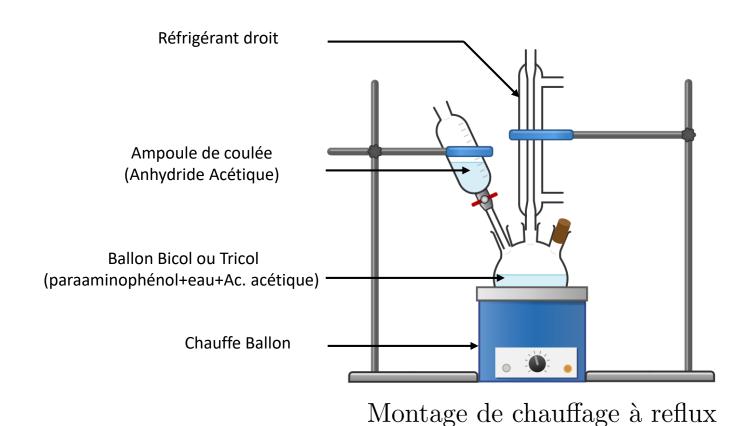
$$HO$$
 H_{2}
 $H_{3}C$
 O
 O
 CH_{3}

Paraaminophénol: composé polyfonctionnel

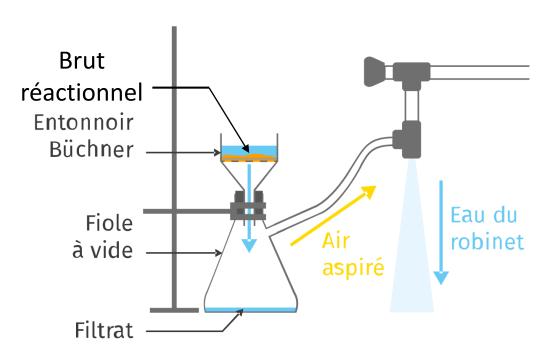
$$H_3C$$

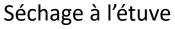
Ester

Synthèse du Paracétamol: Chauffage à reflux



Essorage du brut réactionnel

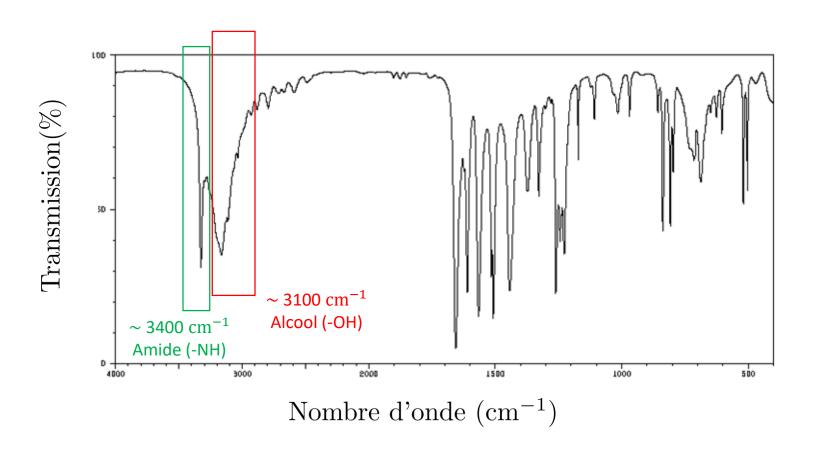








Spectre Infra-rouge du paracétamol



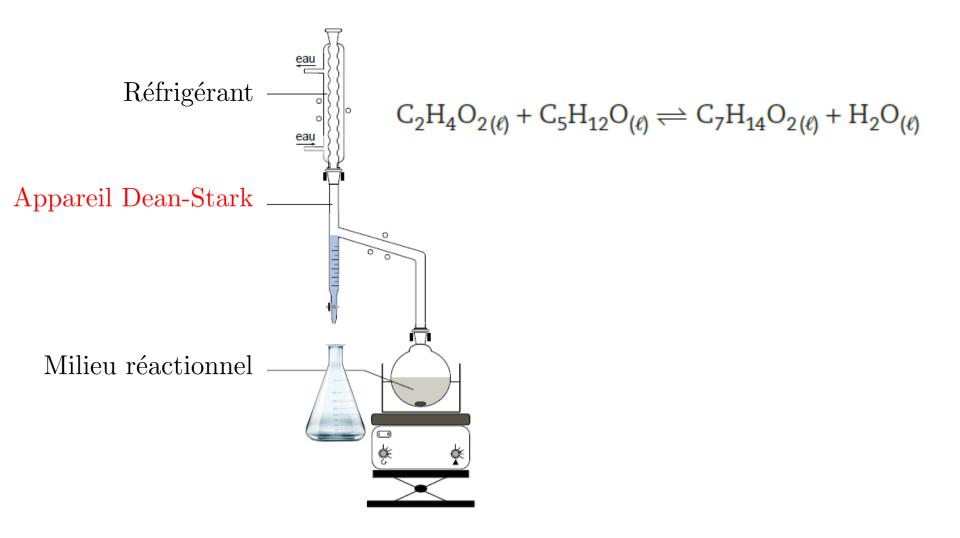
Protection et déprotection de fonctions

Exemple de protection d'une fonction alcool d'une potentielle oxydation

3-hydroxybutanal

La réaction est effectuée sans affecter la fonction alcool

Déplacement d'équilibre: utilisation du Dean Stark



Elimination de l'eau par utilisation d'un appareil de Dean Stark

Paraaminophénol Anhydride éthanoïque

Paracétamol

$$\begin{array}{c} \text{NH}_2 \\ \text{HO} \\ \text{NH}_2 \\ \text{H}_3 \text{C} \\ \text{O} \\ \text{O} \\ \text{CH}_3 \end{array} \begin{array}{c} \text{NH}_2 \\ \text{HO} \\ \text{CH}_3 \end{array} \begin{array}{c} \text{NH}_3 \text{C} \\ \text{OH} \\ \text{OH} \\ \text{Réactif en défaut} \end{array}$$

Paraaminophénol m=5,5g M=109,13g/mol n_i=n_{max}=50,4 mmol Anhydride éthanoïque V=7mL M=102,09g/mol n=74,0 mmol

Paracétamol

$$\begin{array}{c} \text{NH}_2 \\ \text{HO} \\ \text{HO} \\ \end{array} \begin{array}{c} \text{NH}_2 \\ \text{H}_3 \\ \text{C} \\ \text{O} \\ \end{array} \begin{array}{c} \text{O} \\ \text{CH}_3 \\ \end{array} \begin{array}{c} \text{NH}_4 \\ \text{O} \\ \text{OH} \\ \end{array}$$

Paraaminophénol m=5,5g M=109,13g/mol n_i=n_{max}=50,4 mmol Anhydride éthanoïque V=7mL M=102,09g/mol n=74,0 mmol

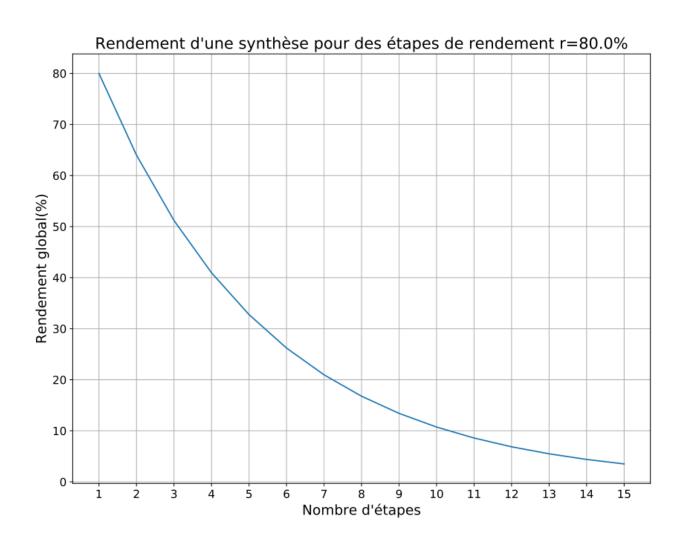
Paracétamol m_{final}=5,9g M=151g/mol n_{final}=39mmol

$$\eta = \frac{n_{final}}{n_{max}}$$

$$n_{final} = 0.39mmol$$

$$\eta = 78\%$$

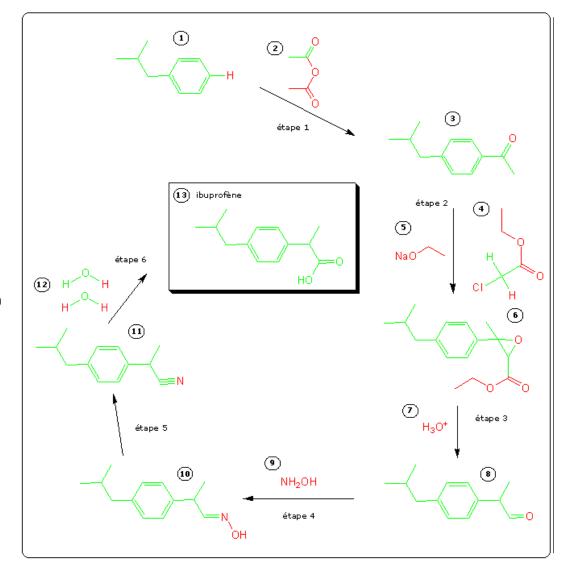
Rendement d'une synthèse multi-étapes



Synthèse de l'Ibuprofène: Procédé Boots en 6 étapes

Atomes dans la molécule cible

Atomes formant des sous-produits



Rendement: 53%

Synthèse de l'Ibuprofène: Procédé BHC en 3 étapes

Atomes dans la molécule cible

Atomes formant des sous-produits

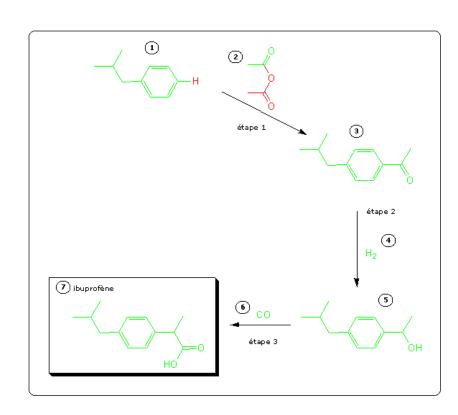
Rendement: 73%

Comparaison des 2 procédés

Procédé Boots

Rendement: 53%

Procédé BHC



Rendement: 73%

Economie d'atomes

Les 12 principes de la chimie verte

