

Chimie Générale Avancée II: Partie Organique

Exercices – Chimie verte niveau examen

Pour les 3 réactions suivantes:

1) Si nécessaire, complétez les équations

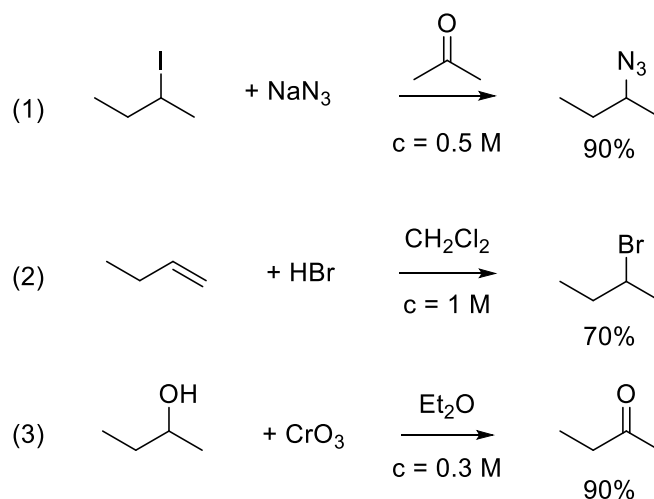
2) Calculer l'économie d'atome, le PMI et le facteur E pour chaque réaction. Information supplémentaire: Densité des solvants: acétone: $d = 0.78 \text{ kg/L}$, CH_2Cl_2 : $d = 1.33 \text{ kg/L}$, Et_2O : 0.73 kg/L , eau: 1.0 kg/L . La concentration indiquée est celle du produit de départ organique. Pour les calculs 4 chiffres significatifs sont suffisants.

3) Quels sont les PMI et facteurs E finaux après les procédés de purification suivants:

Réaction 1: Extraction avec de l'eau (5x le volume initial d'acétone) et du Et_2O (5x le volume initial d'acétone).

Réaction 2: Chromatographie utilisant 50x le volume initial de CH_2Cl_2 et 50 kg de SiO_2 par kg de produit de départ.

Réaction 3: Distillation fractionnée du mélange réactionnel



Chimie Générale Avancée II: Partie Organique

Exercices – Chimie verte niveau examen solutions

Pour les 3 réactions suivantes:

1) Si nécessaire, complétez les équations

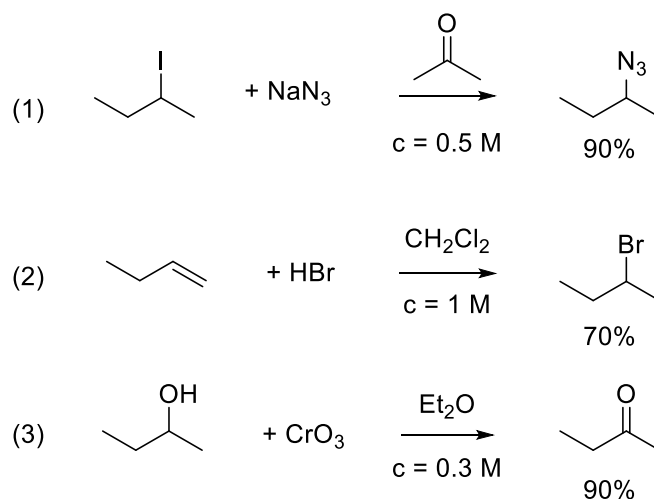
2) Calculer l'économie d'atome, le PMI et le facteur E pour chaque réaction. Information supplémentaire: Densité des solvants: acétone: $d = 0.78 \text{ kg/L}$, CH_2Cl_2 : $d = 1.33 \text{ kg/L}$, Et_2O : 0.73 kg/L , eau: 1.0 kg/L . La concentration indiquée est celle du produit de départ organique. Pour les calculs 4 chiffres significatifs sont suffisants.

3) Quels sont les PMI et facteurs E finaux après les procédés de purification suivants:

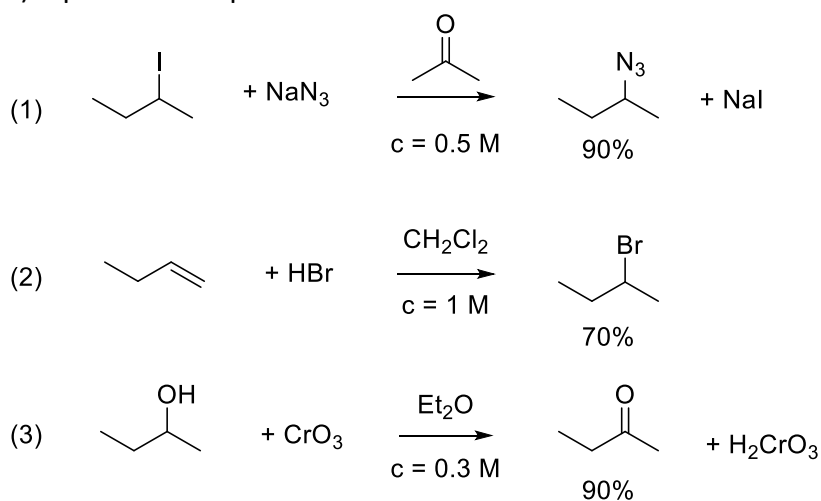
Réaction 1: Extraction avec de l'eau (5x le volume initial d'acétone) et du Et_2O (5x le volume initial d'acétone).

Réaction 2: Chromatographie utilisant 50x le volume initial de CH_2Cl_2 et 50 kg de SiO_2 par kg de produit de départ.

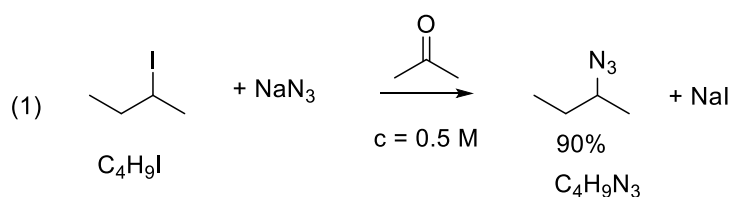
Réaction 3: Distillation fractionnée du mélange réactionnel



1) Equations complètes:



2)

**Economie d'atomes:**

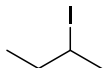
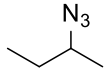
Produits de départs: 18 atomes

Produit désiré: 16 atomes

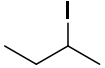
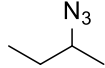
économie d'atomes: $16/18 = 89\%$ **PMI et facteur E**

Masse atomique selon tableau périodique: C = 12.01, H = 1.01, N = 14.01, I = 126.90, Na = 22.99

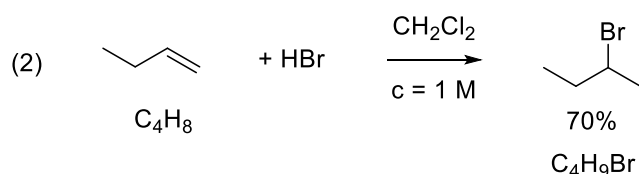
Ce qui donne les masses molaires:

	NaN_3		NaI
184.03 g/mol	65.02 g/mol	99.16 g/mol	149.89 g/mol

On peut maintenant calculer pour une quantité donnée de produit désiré, par exemple 1 Kg = 10.08 mol

	NaN_3			NaI
11.20 mol 2.061 kg	11.20 mol 0.728 kg	22.4 l 17.47 kg	10.08 mol 1.000 kg	11.2 mmol 1.679 Kg

PMI = masse de tous les inputs/masse de produit = $(2.061 + 0.728 + 17.47)/1 = 20.26$ E facteur = Masse des déchets/masse de produit = $(17.47 + 1.679)/1 = 19.1$

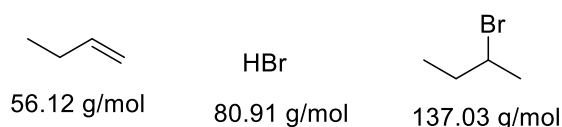


Economie d'atomes: 100%, tous les atomes se retrouvent dans le produit

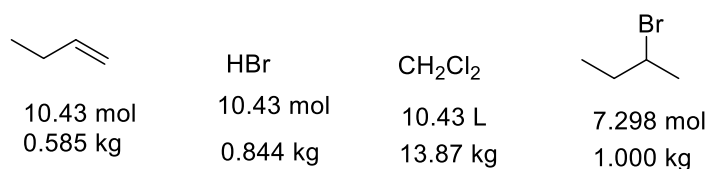
PMI et facteur E

Masse atomique selon tableau périodique: C = 12.01, H = 1.01, Br = 79.90

Ce qui donne les masses molaires:

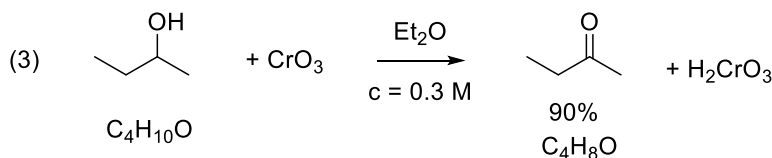


On peut maintenant calculer pour une quantité donnée de produit désiré, par exemple 1 Kg = 7.298 mol



PMI = masse de tous les inputs/masse de produit = $(0.585 + 0.844 + 13.87)/1 = 15.3$

E facteur = Masse des déchets/masse de produit = $(13.87)/1 = 13.9$



Economie d'atomes:

Produits de départ: 19 atomes

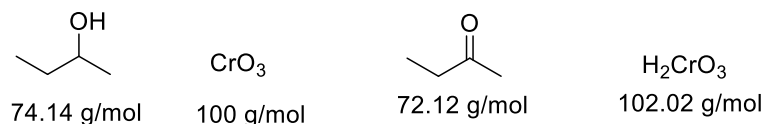
Produit désiré: 13 atomes

économie d'atomes: $13/19 = 68\%$

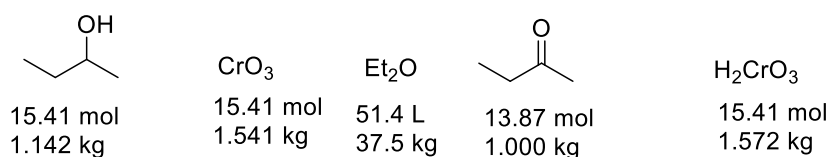
PMI et facteur E

Masse atomique selon tableau périodique: C = 12.01, H = 1.01, O = 16.00, Cr = 52.00

Ce qui donne les masses molaires:



On peut maintenant calculer pour une quantité donnée de produit désiré, par exemple 1 Kg = 13.87 mol



PMI = masse de tous les inputs/masse de produit = $(1.142 + 1.541 + 37.5)/1 = 40.2$

E facteur = Masse des déchets/masse de produit = $(1.572 + 37.5)/1 = 39.1$

3)

3)

(1)

eau: $22.4 \times 5 \text{ L} = 112 \text{ L} = 112 \text{ Kg}$

Et_2O : $112 \text{ L} = 81.8 \text{ Kg}$

PMI = masse de tous les inputs/masse de produit = $(2.061+0.728 +17.47+112+81.8)/1 = 214$

E facteur = Masse des déchets/masse de produit = $(17.47+1.679+112+81.8)/1 = 212.9$

(2)

CH_2Cl_2 : $50 \times 10.43 \text{ L} = 521.5 \text{ L} = 693.6 \text{ kg}$

SiO_2 : $50 \text{ kg} \times 0.585 \text{ kg} = 29.25 \text{ kg}$

PMI = masse de tous les inputs/masse de produit = $(0.585+0.844+13.87+693.6+29.25)/1 = 738$

E facteur = Masse des déchets/masse de produit = $(13.87+693.6+29.25)/1 = 737$

(3): Pas de changement