

# TD 1. PARAMETRES DE LA CHIMIE VERTE

## Paramètres essentiels

*Economie de carbone*

$$E_c = \frac{\nu_{\text{produit}} \cdot n(C)_{\text{produit}}}{\sum_i |\nu_i| \cdot (n(C)_{\text{réactifs}})_i}$$

*Economie d'atomes*

$$E_{\text{At}} = \frac{\nu_{\text{produit}} \cdot M_{\text{produit}}}{\sum_i |\nu_i| \cdot (M_{\text{réactifs}})_i}$$

*Rendement*

$$\rho = \frac{a}{p} \cdot \frac{n(P)}{n(A)}$$

*Facteur environnemental*

$$E_m = \frac{\sum_i (m_{\text{déchets}})_i}{m_{\text{produit}}}$$

*Efficacité massique de réaction*

$$EMR = \frac{m_{\text{produit}}}{\sum_i (m_{\text{réactifs}})_i} \quad EMR = \rho \cdot E_{\text{At}}$$

*Paramètre de récupération de matière*

$$PRM_m = \frac{\sum_i (m_{\text{recyclé}})_i}{m_{\text{totale}} - \sum_i (m_{\text{réactif}})_i}$$

*Facteur stoechiométrique*

### Coefficient de danger

<sup>10</sup> Le label *Danger* est défini comme le rapport du produit d'un coefficient arbitrairement défini par la masse des espèces sur la masse totale.  $Danger = \left[ 1 - \sum_i (\text{Coef}_{\text{Danger}})_i \right] \times \frac{m_i}{m_{\text{totale}}}$ . Le coefficient de Danger est défini par la

contribution de chaque pictogramme (voir plus loin) par  $\text{Coef}_{\text{Danger}} = (X_n + X_i + C + 5.E + F + 5.F+)/12$ . Par homogénéité avec les autres grandeurs, nous avons choisi de donner la valeur « 1 » à une réaction non dangereuse, et « 0 » à un système utilisant des produits dangereux. Idem pour la *Toxicité* et les *CMR*.

### Coefficient de toxicité

<sup>11</sup> Le label *Toxicité* est défini comme le label *Danger* :  $Tox = \left[ 1 - \sum_i (\text{Coef}_{\text{Tox}})_i \right] \times \frac{m_i}{m_{\text{totale}}}$ . Le coefficient de

*Toxicité* est défini par :  $\text{Coef}_{\text{Toxicité}} = (T + 5.T + 2.N)/8$ . De même, le label *CMR* est défini comme le label *Danger*.

$$CMR = \left[ 1 - \sum_i (\text{Coef}_{\text{CMR}})_i \right] \times \frac{m_i}{m_{\text{totale}}}$$

## Utilisation de la feuille de calcul

Tous les paramètres utilisés dans les graphiques ont des valeurs comprises entre 0 et 1, et la valeur idéale de chacun des paramètres correspondant à un processus répondant aux principes de la « chimie verte » est de 1.

Dans le fichier Excel, les informations sont consignées dans le tableau suivant :

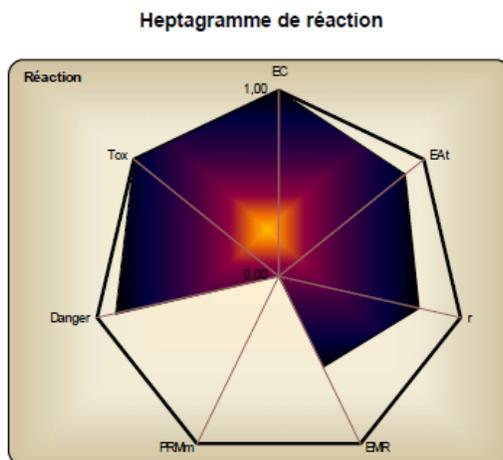
		Réaction	Complet
1	Masse des déchets	$m_{\text{déchets}} / g$	
2	Coût massique du produit / $\text{€} \cdot g^{-1}$		
3	Facteur Environnemental Molaire	$E_M$	
4	Facteur Environnemental Massique	$E_m$	
5	Facteur Stoechiométrique	$F_{St}$	
6	Inverse du Facteur Stoechiométrique	$1/F_{St}$	
7	$n_{\text{réactif min}} / n_{\text{réactif max}}$	$1/F_{Stn}$	
8	Coef. CMR	CMR	
9	Economie de Carbone	$E_c$	
10	Economie d'Atomes	$E_{At}$	
11	Rendement	$\rho$	
12	Efficacité Massique de Réaction	EMR	
13	Paramètre de récupération de matière	PRM <sub>m</sub>	
14	Coef. Danger	Danger	
15	Coef. Tox	Tox	
		BILAN	

Les lignes 1 à 8 sont données à titre d'information. Seules les données des lignes 9 à 15 de la colonne **Réaction** figurent dans l'heptagramme décrivant les informations relatives à la réaction. Seules les données des lignes 12 à 15 de la colonne **Complet** figurent dans le tétragramme décrivant les informations relatives à la réaction et aux traitements post réactionnels.

Pour les colonnes concernant les critères de danger, de toxicité et de CMR, on met « 1 » dans la cellule lorsque le produit est concerné par les rubriques : **F** : inflammable, **F+** : très inflammable, **T** : toxique, **T+** : très toxique, **E** : explosif, **N** : danger pour l'environnement, **C** : corrosif, **Xn** : nocif, **Xi** : irritant, **O** : comburant.

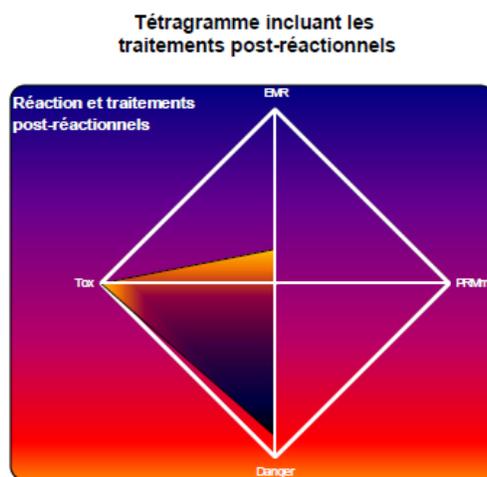
Sur l'heptagramme de réaction, figurent, dans l'ordre :

- l'Economie de Carbone ( $EC$ ),
- l'Economie d'Atomes ( $E_{At}$ ),
- le Rendement ( $\rho$ ),
- l'Efficacité Massique de Réaction ( $EMR$ ),
- le Paramètre de Récupération de Matière ( $PRM_m$ ),
- le Coefficient de Danger<sup>10</sup> ( $Danger$ ),
- le Coefficient de Toxicité ( $Tox$ )<sup>11</sup>.

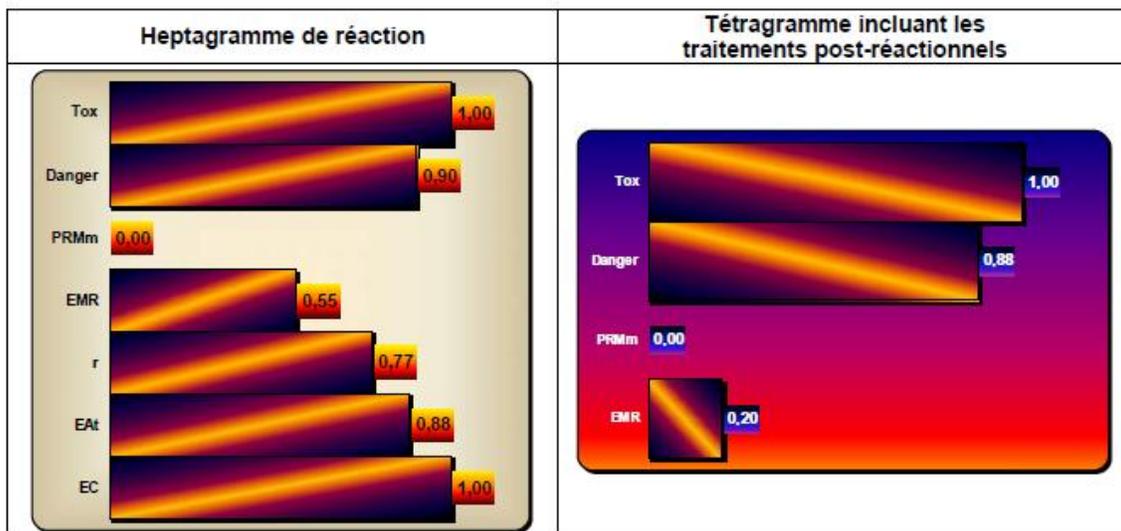


Sur le tétragramme incluant les traitements post-réactionnels :

- l'Efficacité Massique de Réaction ( $EMR$ ),
- le Coefficient de Danger ( $Danger$ ),
- le Coefficient de Toxicité ( $Tox$ ),
- et le Paramètre de Récupération de Matière ( $PRM_m$ ).

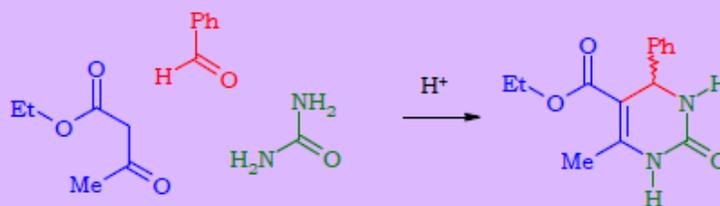


On peut également utiliser des digrammes en barres :



**EXEMPLE** données relatives à la réaction de Biginelli, une Réaction MultiComposant réalisée en « One Pot ».

***Synthèse classique par activation thermique***



Placer dans un ballon : 750 mg (12,5 mmol) d'urée, 1,3 mL (13 mmol) de benzaldéhyde, 2,4 mL (19 mmol) d'acétoacétate d'éthyle, 5,0 mL d'éthanol et ajouter 10 gouttes d'acide chlorhydrique concentré. Homogénéiser puis mettre à reflux pendant 1h30. Refroidir la suspension avec un bain de glace à environ 0 °C. Il se forme un précipité blanc jaunâtre. Filtrer sur Buchner et laver le solide avec de l'éthanol froid. Peser la masse du produit brut obtenu. Recristalliser dans l'éthanol (~ 20 mL.g<sup>-1</sup>).