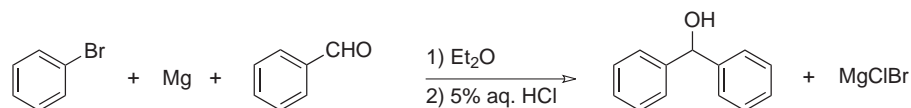


### Application au cas d'une réaction simple

Les paramètres étudiés précédemment vont être calculés dans le cas de l'addition d'un réactif de Grignard sur le benzaldéhyde.



Le benzaldéhyde est le réactif limitant. Bromobenzène et magnésium sont mis en excès ; les quantités qui auraient été utilisées s'ils n'avaient pas été mis en excès auraient été :

0,36 g Mg (vs. 0.4 g),  
2,32 g PhBr (vs. 2.69 g),  
0,54 g HCl (vs. 3.06 g).

MM (PhBr) = 155.96 g  
MM (Mg) = 23.99 g  
MM (PhCHO) = 106.04 g  
MM (produit) = 184.09 g

Le mode opératoire suivant sera utilisé pour la réaction :

To a 25-mL round-bottomed flask charged with dry magnesium turnings (0.4 g) is added dropwise a solution of bromobenzene (1.8 mL, 2.691 g) in dry ether (9.2 mL) over 0.3 h. The reaction solution is gently refluxed for a further 0.3 h. Benzaldehyde (1.5 mL, 1.569 g) is then added dropwise over a period of 0.3 h. After addition is complete the mixture is refluxed for 0.25 h then cooled. The reaction mixture is then poured over crushed ice (10 g) followed by the addition of a 5% aqueous HCl solution (3 mL, 3.06 g). The ether layer is separated and washed successively with water (30 mL), saturated sodium bisulfite (NaHSO<sub>3</sub>) solution (30 mL, 40.35 g), and again with water (30 mL). After drying with MgSO<sub>4</sub> (5 g), filtration, and evaporation of the solvent, the crude product is recrystallized from hexane (100 mL) to afford the pure diphenylmethanol (2.18 g).

		Moles	Masse (g)	
Réaction	Réactifs			
		Mg	0.0165	0.4
		PhBr	0.0172	2.691
		PhCHO	0.0148	1.569
		5 % HCl	0.084	3.06
	<b>Total</b>	–	<b>7.72</b>	(1)
	Catalyseurs		0	(2)
	Solvants			
		Et <sub>2</sub> O	9.2	
		H <sub>2</sub> O	10	
		<b>Total</b>	<b>19.2</b>	(3)
	<b>Total réaction</b>		<b>26.9</b>	(4) [(1)+(2)+(3)]
Work-up				
		H <sub>2</sub> O	60	
		sat. aq. NaHSO <sub>3</sub>	40.35	
		<b>Total</b>	<b>100.35</b>	(5)
Purification				
		hexane	64	
		MgSO <sub>4</sub>	5	
		<b>Total</b>	<b>69</b>	(6)
	<b>Total post-réaction</b>		<b>169.35</b>	(7) [(5)+(6)]
	<b>Total matériel introduit</b>		<b>196.27</b>	(8) [(4)+(7)]
	<b>Total composé obtenu</b>		<b>2.18</b>	(9)
	<b>Rendement composé obtenu</b>		80 %	(9)

**Paramètres**

$$AE = 0.64 [184.09/(155.96+23.99+106.04)]$$

$$SF = 1.61 [1+[(0.4-0.36)+(2.69-2.32)+(3.06-0.54)]/(0.36+2.32+0.54+1.569)]$$

sans recyclage :

$$Em = 89.03 [\text{g waste/g product} = 196.27-2.18/2.18]$$

$$RME = 0.011 [1/(1+E) = 1/(1+89.03)]$$

$$MRP = 0$$

avec recyclage des solvants (en ne considérant que le recyclage de l'éther (9.2 g) et de l'hexane (64 g)) :

$$Em = 55.45 [\text{g waste/g product} = (196.27-9.2-64-2.18)/2.18]$$

$$RME = 0.018 [1/(1+E) = 1/(1+55.45)]$$

$$MRP = 0.39 [(9.2+64)/(196.27-7.72)]$$

avec recyclage aux étapes post-réactionnelles (169.35 g) :

$$Em = 11,34 [\text{g waste/g product} = (196.27-169.35-2.18)/2.18]$$

$$RME = 0.081 [1/(1+E) = 1/(1+11.34)]$$

$$MRP = 0.90 [169.35/(196.27-7.72)]$$

avec recyclage des solvants (19.2 g) et aux étapes post-réactionnelles (169.35 g) :

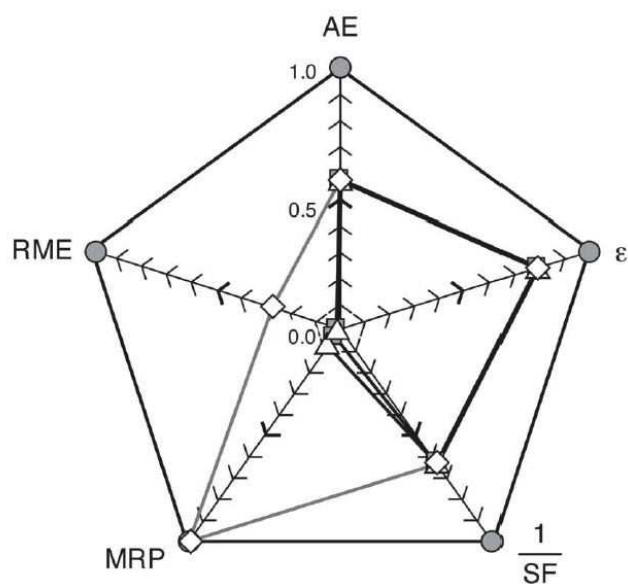
$$Em = 5.54 [\text{g waste/g product} = (196.27-19.2-169.35-2.18)/2.18]$$

$$RME = 0.15 [1/(1+E) = 1/(1+5.54)]$$

$$MRP = 1 [(19.2+169.35)/(196.27-7.72)]$$

## Objectifs

- Optimiser certains paramètres.
- Certains paramètres doivent être maximisés, d'autres minimisés.
- Obtenir les paramètres expérimentaux : rdt (rendement, noté  $\epsilon$ ).
- Calculer les paramètres principaux : AE,  $E_m$ , RME
- Scénario positif : rdt max., AE max., RME max., MRP max.,  $1/SF$  max.
- Scénario négatif : rdt min., AE min., RME min., MRP min.,  $1/SF$  min.
- Chaque axe du pentagramme correspond à 1 paramètre (valeurs de 0 à 1).
- Les valeurs sont représentées par des lignes.
- Les extrémités sont rejointes et forment la figure.
- Situation idéale : pentagone le plus régulier possible (facteurs = 1).
- Situation la pire : pentagone le plus distordu vers le centre (facteurs proches de 0).
- Constatation du degré de distorsion par inspection visuelle.



Reaction Type	AE	$\epsilon$	Range of RME	Range of $E_m$	Product Collected/g	Maximum Waste/g	RMC (\$/g Product Collected)
Aldol condensation	0.92	0.80	0.077-0.701	0.43-12.07	4	48.3	0.28
Bromination of an olefin	1	0.68	0.078-0.620	0.61-11.87	0.6	7.1	0.78
Diels-Alder reaction	1	0.85	0.204-0.593	0.69-3.90	5	19.5	0.14
Dehydration of an alcohol	0.82	0.70	0.184-0.575	0.74-4.43	6	26.6	0.07
Debromination of an alkyl halide	0.26	0.80	0.017-0.098	9.16-58.7	6.6	387.7	1.39
Friedel-Crafts alkylation	0.72	0.75	0.117-0.549	0.82-7.58	8	60.6	0.20
Michael 1,4-addition	1	0.76	0.056-0.710	0.41-16.73	0.5	8.4	1.07
Aromatic nitration	0.91	0.70	0.15-0.345	1.90-5.66	5	28.3	1.26
Oxidation of secondary alcohol	0.30	0.58	0.016-0.052	36.67-60.23	2	120.47	1.22
Oximation	0.78	0.87	0.037-0.588	0.70-25.86	5	129.3	0.39
Beckmann rearrangement	1	0.60	0.005-0.600	0.67-220.17	3	660.5	2.62
Bromination of primary alcohol	0.606	0.73	0.123-0.256	2.91-7.14	15	107.07	0.20