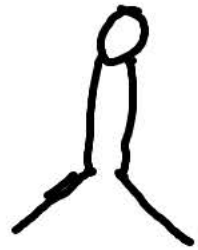
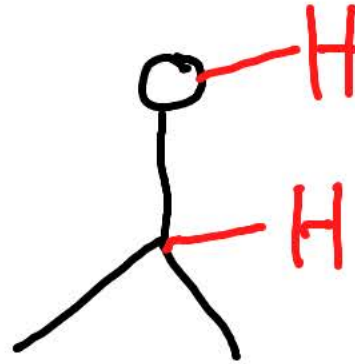


comparaison de procédés

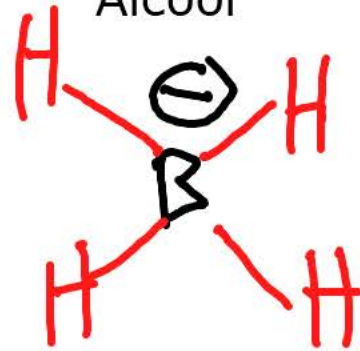


cétone



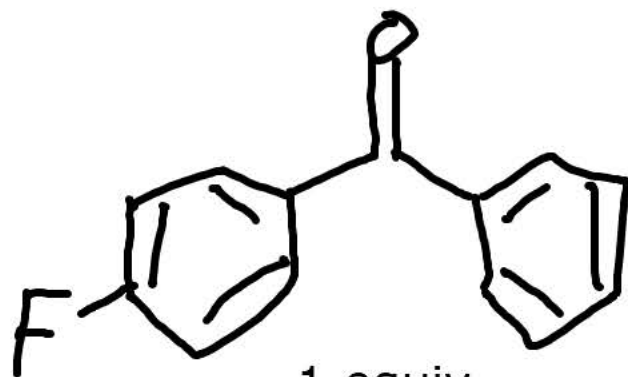
Alcool

réduction des cétones



procédé 1: Albany, Org. Proc. Res. Dev. 2002, 621.

C₁₃H₉FO: 24 atomes

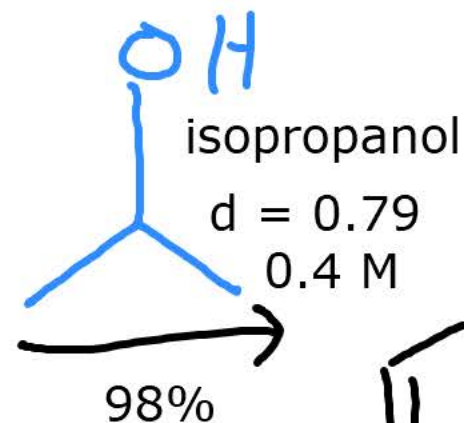


1 equiv
200 g/mol

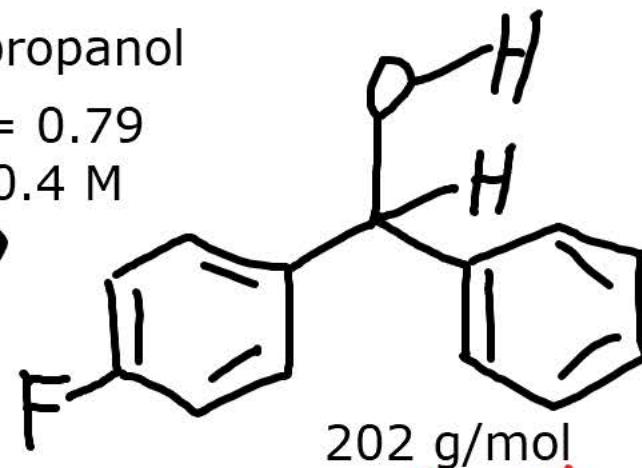
6 atomes



0.38 equiv
37.8 g/mol



C₁₃H₁₁FO: 26



0.20 Kg/Kg
(Kg de déchet par Kg de produit)

économie d'atome $26/(24+6) = 87\%$

purification: extraction:

acétate d'éthyle: 1 volume (égal à isopropanol), d = 0.90

Eau: 1.5 volume, d = 1.0

0.200 Kg/Kg Na₂SO₄ (pour sécher le produit)

Bilan de masse pour produire 1 kg de produit

$1000/202 = 4.95$ mol de produit

98% de rendement, donc $4.95/0.98 = 5.05$ mol de produit de départ = 1.01 Kg ✓

NaBH₄: $0.38 \times 37 \times 5.05 = 73$ g, 0.073 Kg ✓

NaB(OH)₄ = 0.200 Kg ✓

Solvant: 0.4 M d'isopropanol, $5.05/0.4 = 12.6$ L, 10 Kg ✓ ✓

Extraction:

acétate d'éthyle: 1 volume, 12.6 L, 11.3 Kg ✓ ✓

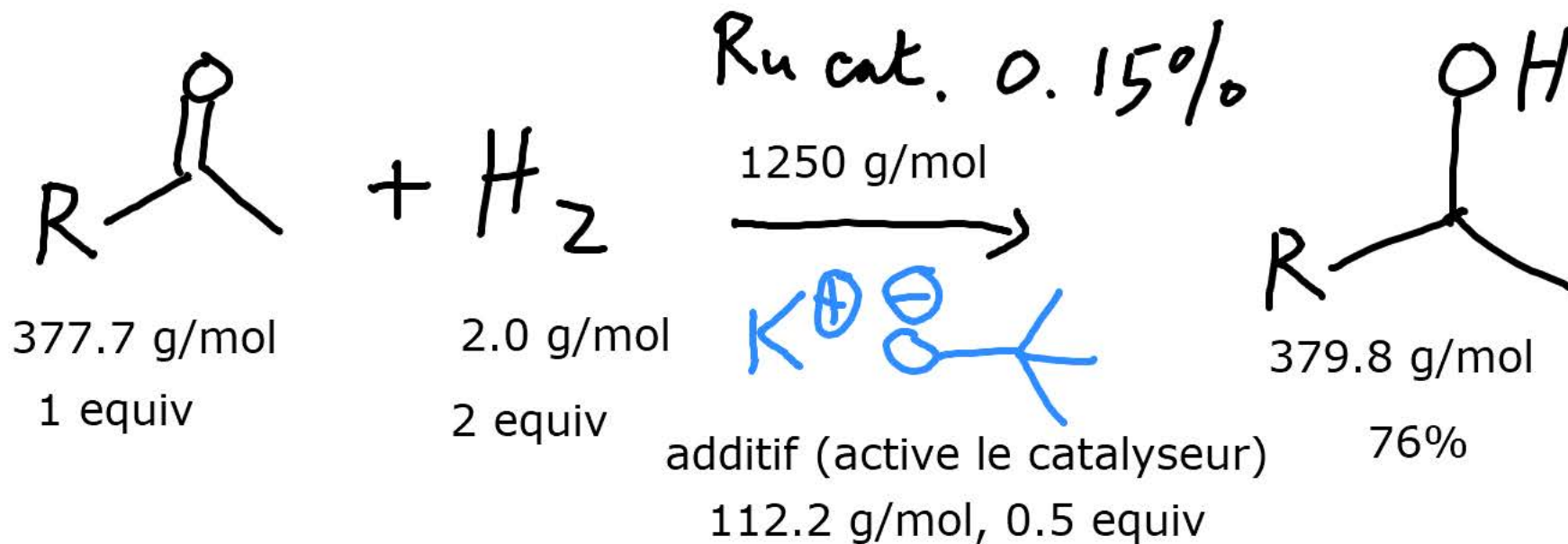
Eau: 1.5 volume, 18.9 L, 18.9 Kg ✓ ✓

Na₂SO₄: 0.200 Kg ✓ ✓

PMI: $(1.01 + 0.073 + 10 + 11.3 + 18.9 + 0.2)/1 = 41.5$

E: $(10 + 11.3 + 18.9 + 0.20 + 0.20)/1 = 40.6$

procédé 2: Merck, Org. Proc. Res. Dev. 2007, 616 (simplifié)



économie d'atome: 100%

purification:

Extraction: Toluene, 6.5 volume,
 $d = 0.87$

H_2O , 6.5 volume, $d = 1$



1.5 M, $d = .079$
solvant

Bilan de masses:

1 Kg produit: 2.63 mol

Produit de départ: 76% de rendement, donc 3.46 mmol, 1.30 Kg ✓

H₂: 0.015 Kg ✓

Ru cat: 0.0065 Kg ✓

KOtBu: 0.12 Kg ✓

Isopropanol: 2.3 L, 1.8 Kg ✓

Toluene: 6.5 volume, 13 Kg ✓

Eau, 6.5 volume, 15 Kg ✓

$$\text{PMI: } (1.30 + 0.015 + 0.0065 + 0.12 + 1.8 + 13 + 15)/1 = 31.2$$

$$E = ((0.5 \times 0.015) + 0.0065 + 0.12 + 1.8 + 13 + 15)/1 = 29.9$$

↑
moitié de l'hydrogène non utilisé!