

MÉTRICA PARA AVALIAR A DIFERENÇA DE SEGURANÇA ENTRE MICRO E MACROESCALA

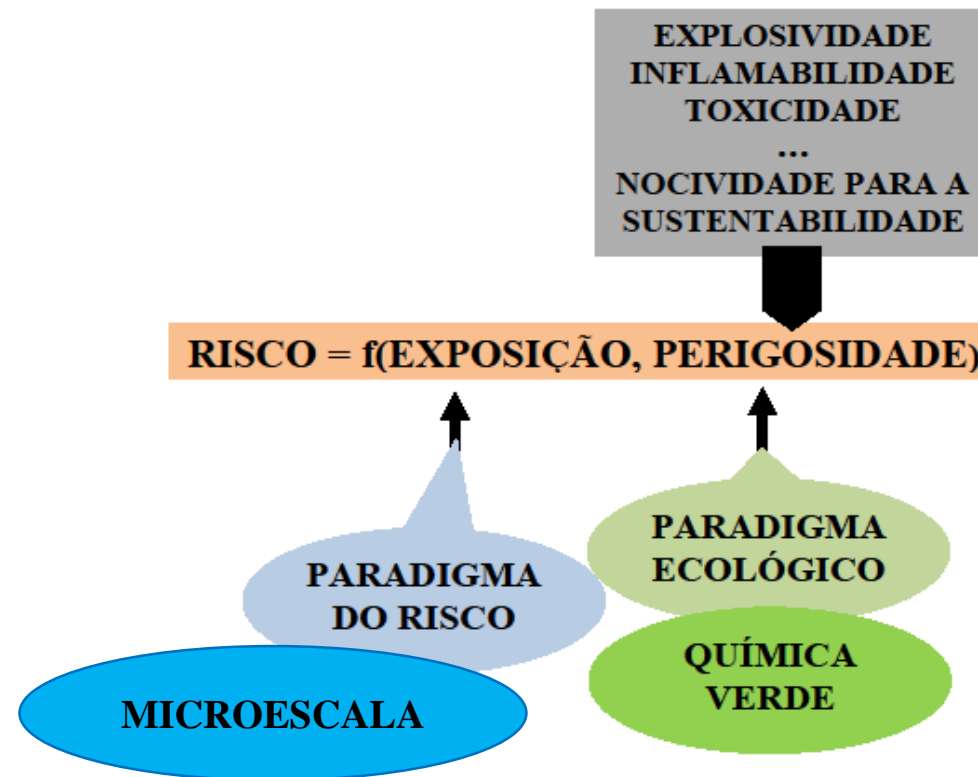
RITA C. C. DUARTE

FACULDADE DE CIÊNCIAS DA UNIVERSIDADE DO PORTO

8 DE JULHO DE 2016

ESCALA E QUÍMICA VERDE

PARADIGMA ECOLÓGICO E QUÍMICA VERDE



in Machado, A.A.S.C. Energia, Economia e Ambiente – Lições. FCUP, 2009.

MÉTRICAS DE MASSA DA QUÍMICA VERDE

- **ECONOMIA ATÓMICA (AE)**

$$\text{AE (teórico)} = \frac{m_{\text{átomos de reagentes estequiométricos no produto}}}{m_{\text{total de átomos dos reagentes estequiométricos}}} \times 100$$

- **EFICIÊNCIA DE MASSA DA REAÇÃO (RME)**

$$\text{RME} = \frac{m_{\text{produto}}}{m_{\text{reagentes estequiométricos}}} \times 100$$

- **INTENSIDADE DE MASSA (MI)**

$$\text{MI} = \frac{m_{\text{reagentes totais}}}{m_{\text{produto}}}$$

MÉTRICAS DE MASSA DA QUÍMICA VERDE

Sínteses	1-bromobutano			Sulfato de tetraaminocobre(II) monoidratado		Dibenzalacetona		
	Macro	Micro 1	Micro 2	Macro	Micro	Macro 1	Macro 2	Micro
Escala (mmol)	109	11	11	8	0,4	100	25	5
Rendim. (%)	76,9 ± 1,6	32,8 ± 0,5	30,8 ± 0,4	95,4 ± 1,7	91,9 ± 0,6	85,4 ± 3,7	74,5 ± 2,5	67,6 ± 3,9
AE (%)	49,81			77,3		86,7		
RME (%)	27,0 ± 0,6	11,5 ± 0,2	11,0 ± 0,2	72,7 ± 1,3	70,0 ± 0,4	74,0 ± 3,2	64,4 ± 2,2	58,6 ± 3,7
MI	7,0 ± 0,1	16,4 ± 0,3	17,3 ± 0,2	1,38 ± 0,02	1,43 ± 0,01	2,4 ± 0,1	2,7 ± 0,1	3,1 ± 0,2

MÉTRICAS DE MASSA DA QUÍMICA VERDE

Sínteses	1-bromobutano			Sulfato de tetraaminocobre(II) monoidratado		Dibenzalacetona		
	Macro	Micro 1	Micro 2	Macro	Micro	Macro 1	Macro 2	Micro
Escala (mmol)	109	11	11	8	0,4	100	25	5
Rendim. (%)	76,9 ± 1,6	32,8 ± 0,5	30,8 ± 0,4	95,4 ± 1,7	91,9 ± 0,6	85,4 ± 3,7	74,5 ± 2,5	67,6 ± 3,9
AE (%)	49,81			77,3		86,7		
RME (%)	27,0 ± 0,6	11,5 ± 0,2	11,0 ± 0,2	72,7 ± 1,3	70,0 ± 0,4	74,0 ± 3,2	64,4 ± 2,2	58,6 ± 3,7
MI	7,0 ± 0,1	16,4 ± 0,3	17,3 ± 0,2	1,38 ± 0,02	1,43 ± 0,01	2,4 ± 0,1	2,7 ± 0,1	3,1 ± 0,2

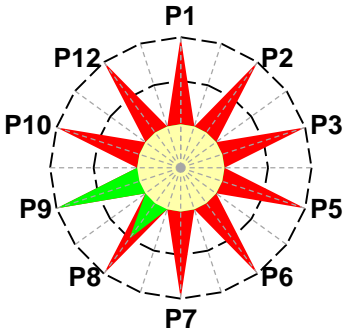
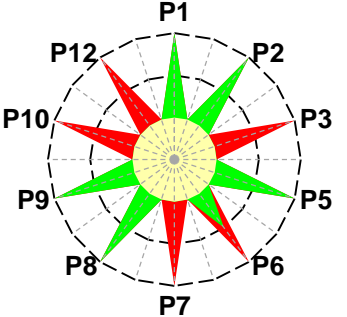
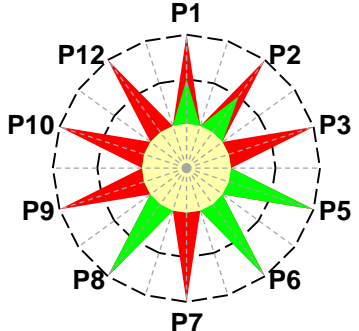
MÉTRICAS DE MASSA DA QUÍMICA VERDE

Sínteses	1-bromobutano			Sulfato de tetraaminocobre(II) monoidratado		Dibenzalacetona		
	Macro	Micro 1	Micro 2	Macro	Micro	Macro 1	Macro 2	Micro
Escala (mmol)	109	11	11	8	0,4	100	25	5
Rendim. (%)	76,9 ± 1,6	32,8 ± 0,5	30,8 ± 0,4	95,4 ± 1,7	91,9 ± 0,6	85,4 ± 3,7	74,5 ± 2,5	67,6 ± 3,9
AE (%)	49,81			77,3		86,7		
RME (%)	27,0 ± 0,6	11,5 ± 0,2	11,0 ± 0,2	72,7 ± 1,3	70,0 ± 0,4	74,0 ± 3,2	64,4 ± 2,2	58,6 ± 3,7
MI	7,0 ± 0,1	16,4 ± 0,3	17,3 ± 0,2	1,38 ± 0,02	1,43 ± 0,01	2,4 ± 0,1	2,7 ± 0,1	3,1 ± 0,2

MÉTRICAS DE MASSA DA QUÍMICA VERDE

Sínteses	1-bromobutano			Sulfato de tetraaminocobre(II) monoidratado		Dibenzalacetona		
	Macro	Micro 1	Micro 2	Macro	Micro	Macro 1	Macro 2	Micro
Escala (mmol)	109	11	11	8	0,4	100	25	5
Rendim. (%)	76,9 ± 1,6	32,8 ± 0,5	30,8 ± 0,4	95,4 ± 1,7	91,9 ± 0,6	85,4 ± 3,7	74,5 ± 2,5	67,6 ± 3,9
AE (%)	49,81			77,3		86,7		
RME (%)	27,0 ± 0,6	11,5 ± 0,2	11,0 ± 0,2	72,7 ± 1,3	70,0 ± 0,4	74,0 ± 3,2	64,4 ± 2,2	58,6 ± 3,7
MI	7,0 ± 0,1	16,4 ± 0,3	17,3 ± 0,2	1,38 ± 0,02	1,43 ± 0,01	2,4 ± 0,1	2,7 ± 0,1	3,1 ± 0,2

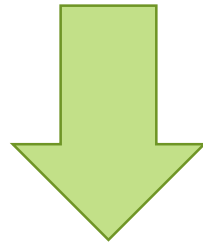
ESTRELA VERDE

Sínteses	1-bromobutano			Sulfato de tetraaminocobre(II) monoidratado		Dibenzalacetona		
	Macro	Micro 1	Micro 2	Macro	Micro	Macro 1	Macro 2	Micro
Escala (mmol)	109	11	11	8	0,4	100	25	5
Rendim. (%)	76,9 ± 1,6	32,8 ± 0,5	30,8 ± 0,4	95,4 ± 1,7	91,9 ± 0,6	85,4 ± 3,7	74,5 ± 2,5	67,6 ± 3,9
EV								

MAS...

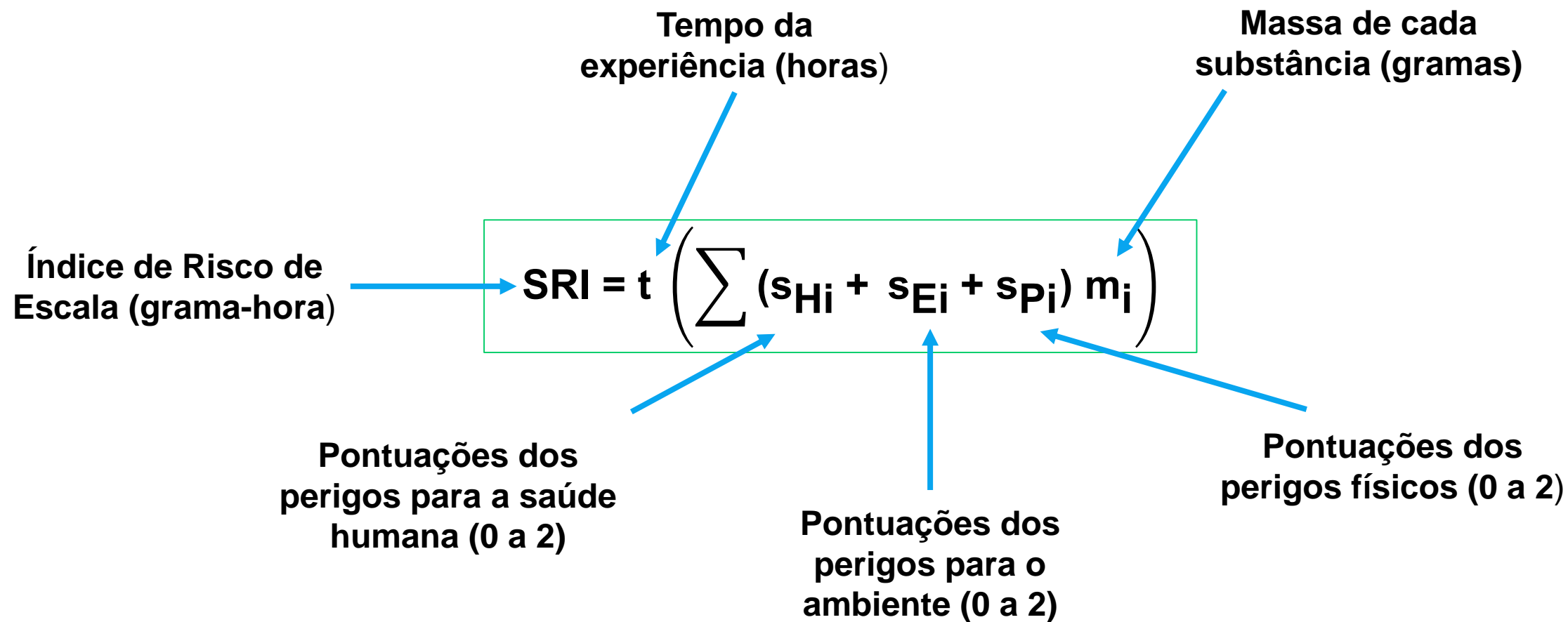
Segurança?

*Quantidades
usadas?*



Índice de Risco de Escala (SRI)

ÍNDICE DE RISCO DE ESCALA

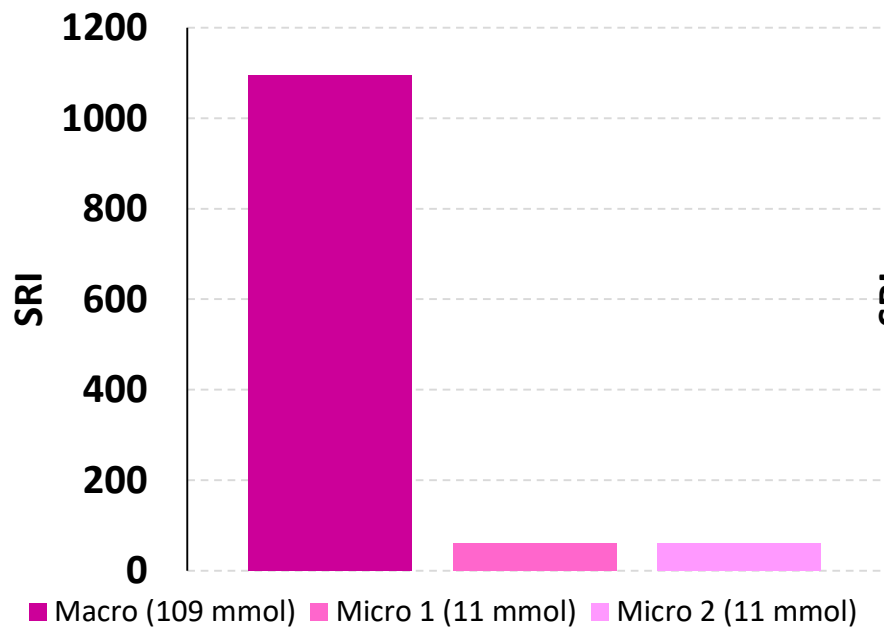


ÍNDICE DE RISCO DE ESCALA

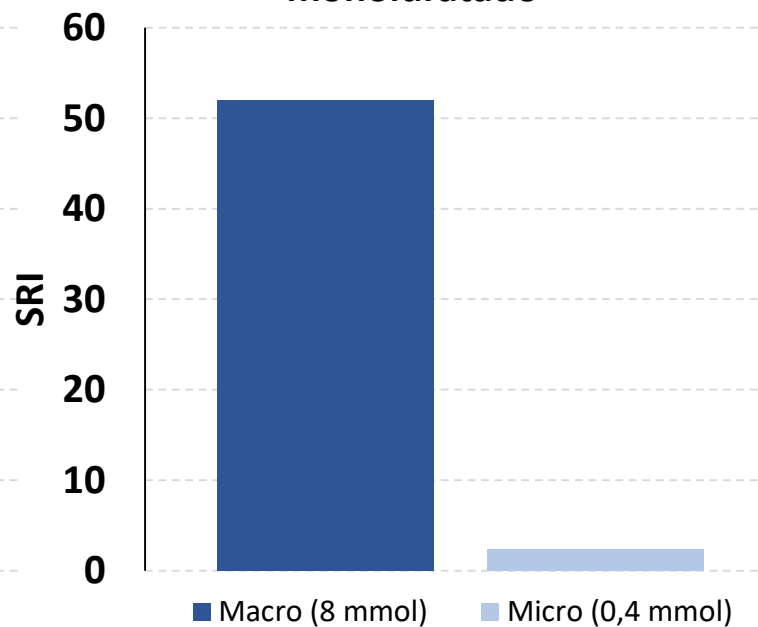
Sínteses	1-bromobutano			Sulfato de tetraaminocobre(II) monoidratado		Dibenzalacetona		
	Macro	Micro 1	Micro 2	Macro	Micro	Macro 1	Macro 2	Micro
Escala (mmol)	109	11	11	8	0,4	100	25	5
Rendim. (%)	76,9 ± 1,6	32,8 ± 0,5	30,8 ± 0,4	95,4 ± 1,7	91,9 ± 0,6	85,4 ± 3,7	74,5 ± 2,5	67,6 ± 3,9
SRI (g.h)	1095	61	60	52	2,4	445	87	16

ÍNDICE DE RISCO DE ESCALA

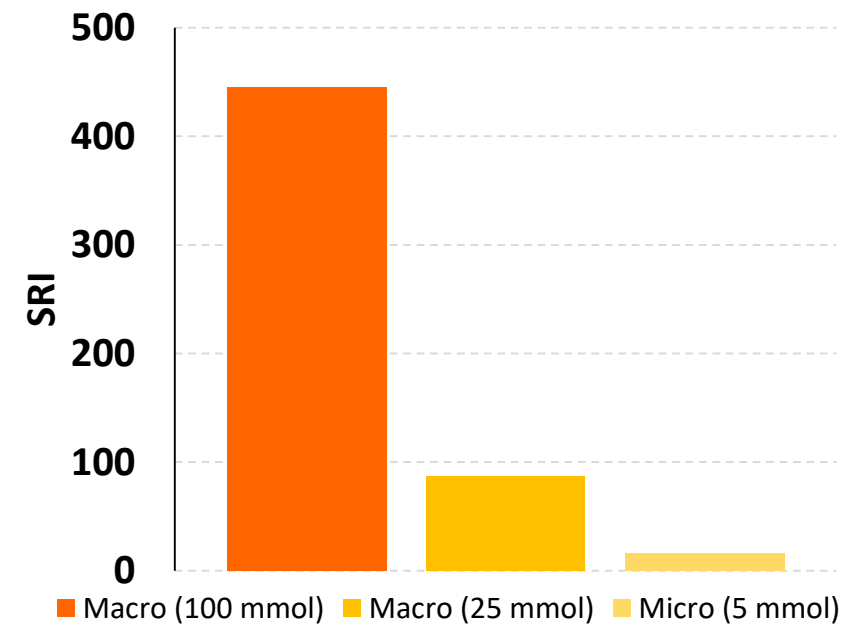
1-Bromobutano



Sulfato de tetraaminocobre(II) monohidratado



Dibenzalacetona



RESULTADOS/DISCUSSÃO

- **MÉTRICAS DE MASSA E ESTRELA VERDE:**
 - **MÉTRICAS DE VERDURA**
 - **NÃO PERMITEM DISTINGUIR OS IMPACTOS PARA A SEGURANÇA DA MICROESCALA**
- **ÍNDICE DE RISCO DE ESCALA**
 - **MÉTRICA DE SEGURANÇA**
 - **PERMITE IDENTIFICAR A MICROESCALA COMO MAIS SEGURA**

CONCLUSÕES

- **VANTAGENS DE MAIOR USO DA MICROESCALA NO ENSINO**
- **UTILIZAÇÃO DE MÉTRICAS DE VERDURA E DE SEGURANÇA NA AVALIAÇÃO DE SÍNTESES → *BATERIA DE MÉTRICAS***

OBRIGADA PELA ATENÇÃO

RITA C. C. DUARTE

<http://educa.fc.up.pt/catalogo/pt/home>