

## Otimização da verduira de solventes em processos de síntese

J. R. M. Pinto<sup>1,2\*</sup>, M. G. T. C. Ribeiro<sup>1,2</sup>, A. A. S. C. Machado<sup>2</sup>

<sup>1</sup> LAQV/REQUIMTE

<sup>2</sup> Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, R. Campo Alegre 687, 4169-007 Porto, Portugal

\*jricardo.mpinto@gmail.com

Os solventes são um tema de grande importância em Química Verde (QV), que apela à necessidade de minimizar a sua utilização e incrementar a sua benignidade.<sup>1</sup> Muitos dos solventes de uso frequente apresentam perigos diversos e têm um forte impacto ambiental, sendo recomendada a sua substituição por solventes mais verdes.<sup>2-4</sup> Particularmente críticos quanto a isto, são os processos de síntese química, onde os solventes são omnipresentes. A otimização da verduira em sínteses por alteração de solventes envolve várias componentes que têm de ser consideradas simultaneamente. Nesta comunicação pretende-se: 1) apresentar um modelo para avaliar a verduira de solventes num contexto de síntese; e 2) reportar o desafio da otimização de solventes na síntese de um líquido iónico (LI).

O modelo proposto para avaliação dos solventes baseia-se em duas componentes que aferem: 1) a verduira intrínseca do solvente; 2) o seu impacto na eficiência do processo, avaliados por métricas de verduira. Este modelo foi utilizado para otimizar a síntese do LI cloreto de 1-hexil-3-metilimidazólio (Fig. 1).



**Fig. 1.** Otimização da síntese do cloreto de 1-hexil-3-metilimidazólio por mudança de solventes.

O protocolo da literatura educacional (A)<sup>4</sup> propõe a utilização de dois solventes na fase de workup (Fig. 1). A otimização implicou a eliminação de água (B) que, sendo inócuo, relevou-se pouco eficiente (provocou baixa pureza do produto obtido e impacto negativo nas métricas de energia e de tempo). O éter dietílico foi substituído por acetato de etilo (C), com maior verduira intrínseca, mas as métricas de energia e tempo foram penalizadas.

Os resultados mostram que a otimização por escolha de solventes exige ponderação multivariada, já que a utilização de solventes intrinsecamente mais verdes/benignos pode ter um impacto negativo nas métricas da QV e na pureza do produto obtido. Esta situação evidencia a natureza holística da QV, que implica a análise das situações em estudo simultaneamente a várias dimensões, para se chegar a soluções de compromisso quando emergem aspetos

antagónicos, o que é problemático quando as dimensões são consideradas isoladamente.

Agradecimentos: O trabalho de J.R.M.P. e M.G.T.C.R recebeu apoio financeiro da União Europeia (fundo FEDER através COMPETE) e fundos nacionais (FCT, através do projeto Pest-C/EQB/LA0006/2013).

1. Anastas, P. T.; Warner, J. C., *Green Chemistry: Theory and Practice*. Oxford University Press: 1998.
2. Capello, C.; Fischer, U.; Hungerbuhler, K., What is a green solvent? A comprehensive framework for the environmental assessment of solvents. *Green Chem.* **2007**, *9* (9), 927-934.
3. Kerton, F., *Alternative Solvents for Green Chemistry*. The Royal Society of Chemistry: 2009.
4. Stark, A.; Ott, D.; Kralisch, D.; Kreisel, G.; Ondruschka, B., Ionic Liquids and Green Chemistry: A Lab Experiment. *J. Chem. Ed.* **2010**, *87* (2), 196-201.