

Limitações das métricas de massa da Química Verde

M. G. T. C. Ribeiro, A. A. S. C. Machado *

REQUIMTE, Dep. de Química e Bioquímica, Fac. de Ciências da Universidade do Porto

*Dep. de Química e Bioquímica, Fac. de Ciências da Universidade do Porto

INTRODUÇÃO

As métricas são essenciais na química verde para a avaliação da veracidade das reacções e de processos de síntese, seja no laboratório ou na indústria [1]. A produtividade atómica – incorporação dos átomos dos reagentes no produto, não os desperdiçando em resíduos – é postulada pelos dois primeiros dos doze princípios da Química Verde [2] e coberta por uma variedade de métricas, as chamadas *métricas de massa*. Trabalho em curso que envolveu uma análise global destas métricas [3-5] evidenciou que os seus valores dependiam da estequiometria das reacções de síntese e das condições de realização destas – o que pode limitar o alcance da sua utilidade para comparar a veracidade das sínteses, um facto aparentemente ignorado na literatura.

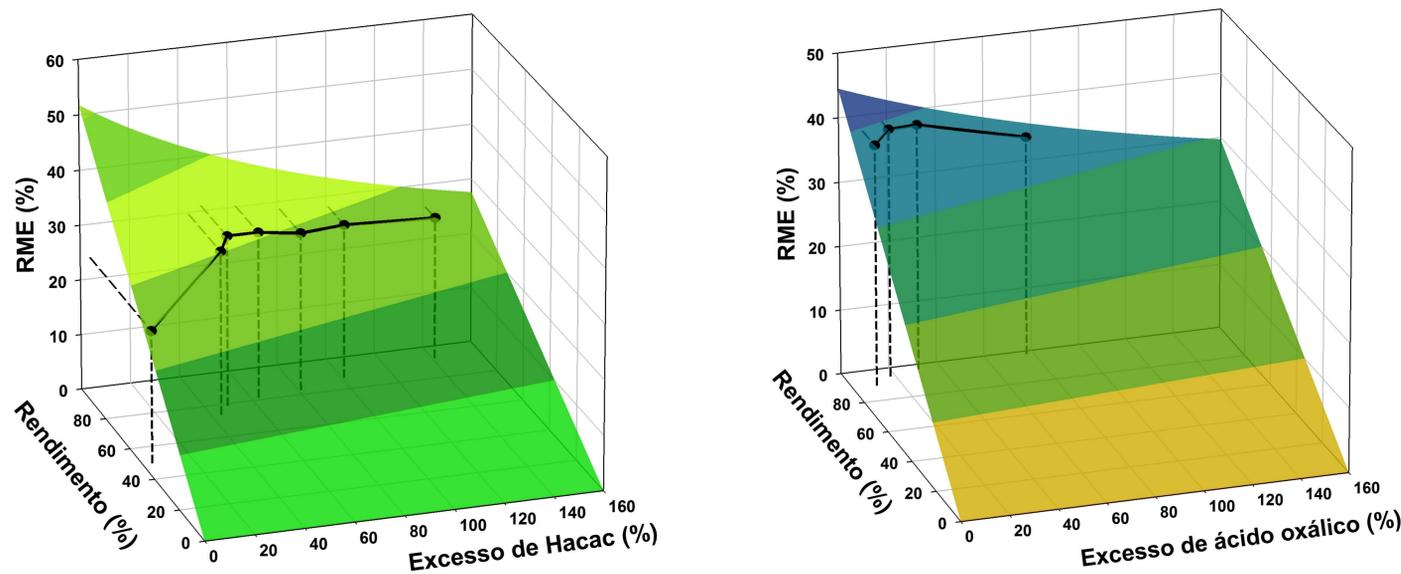
OBJECTIVO

Discutir a variação da métrica Eficiência de Massa Relativa (RME) com a natureza das reacções químicas (estequiometria e massas molares dos reagentes e produtos e com as condições de realização (excesso de reagentes, etc.) que afectam o rendimento, apresentando-se aqui alguns resultados.

METODOLOGIA

As sínteses laboratoriais do *tris*(acetilacetato)ferro(III) e do oxalato de ferro(II) diidratado foram repetidas em diversas condições, com registo rigoroso das massas dos reagentes, produtos, solventes, etc. (como aconselhado por Winterton [6]), para investigar a influência das condições da reacção (rendimento, excesso de um reagente estequiométrico, etc.) nos valores da RME. Esta foi expressa como uma função bidimensional do rendimento (y) e do excesso do ligando (x). Nas Figs. apresentam-se os gráficos das superfícies geradas por estas funções e os valores experimentais coligidos nas experiências, que mostram bom acordo.

RESULTADOS



$$RME = k_1 y / (k_2 + k_3 x)$$

$$k_1 = MW_P (p/a)$$

$$k_2 = MW_A + MW_B (b/a)$$

$$k_3 = (MW_B/100) (b/a)$$

MW : massas molares
a, b, p: coeficientes estequiométricos

A/a - Sal metálico

B/b - Ligando

P/p - Produto

Fig. 1 - RME para as sínteses: *tris*(acetilacetato)ferro(III) (esq) e oxalato de ferro(II) (dir)

CONCLUSÕES

A forma das superfícies é semelhante, mas com diferente inclinação, devido a diferenças nos coeficientes estequiométricos (reacções 1:3 e 1:1, respectivamente) e nas massas molares dos compostos envolvidos nas duas reacções – facto que evidencia não ser lícita a comparação directa de métricas para reacções de diferentes estequiometrias.

Agradecimentos: Às estagiárias Olga Martins e Salomé Fernandes pelo apoio no trabalho laboratorial.

Referências

- [1] A. Lapkin and D. Constable (eds.), *Green Chemistry Metrics – Measuring and Monitoring Sustainable Processes*, Wiley, 2009. [2] P. T. Anastas and J. C. Warner, *Green Chemistry – Theory and Practice*, Oxford UP, 1998, p. 30. [3] M. G. T. C. Ribeiro, D. A. Costa and A. A. S. C. Machado, *Green Chem. Lett. and Rev.* **3** (2010) 149-159. [4] M. G. T. C. Ribeiro, D. A. Costa and A. A. S. C. Machado, *Química Nova* **33** (2010) 759-764. [5] M. G. T. C. Ribeiro and A. A. S. C. Machado, *J. Chem. Ed.* (2011) DOI: 10.1021/ed100174f. [6] N. Winterton, *Green Chem.* **3** (2001) G73-G75.