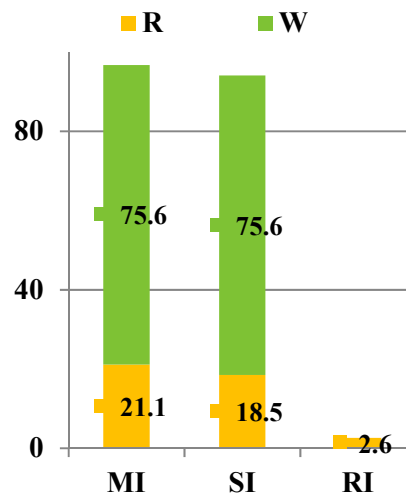


XVIII ENCONTRO LUSO-GALEGO DE QUÍMICA

28-30 DE NOVEMBRO DE 2012

UTAD – VILA REAL



A IMPORTÂNCIA DO “WORK-UP” PARA A VERDURA DE SÍNTESES

D. A. COSTA¹, M. G. T. C. RIBEIRO¹, A. A. S. C. MACHADO²

¹REQUIMTE², ²DEP. DE QUÍMICA E BIOQUÍMICA, FAC. DE CIÊNCIAS DA U. DO PORTO

OBJETIVO

MOSTRAR QUE A **PARCELIZAÇÃO DAS MÉTRICAS DE MASSA É EXEQUÍVEL** QUANDO NORMALIZADAS PARA O PRODUTO

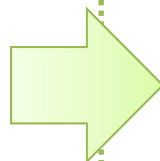


PERMITE **INFORMAÇÃO ADICIONAL** SOBRE A DISTRIBUIÇÃO DOS **GASTOS DE MATERIAIS PELAS FASES** DA SÍNTESE:

- REAÇÃO
- “WORK-UP” DO PRODUTO (ISOLAMENTO)

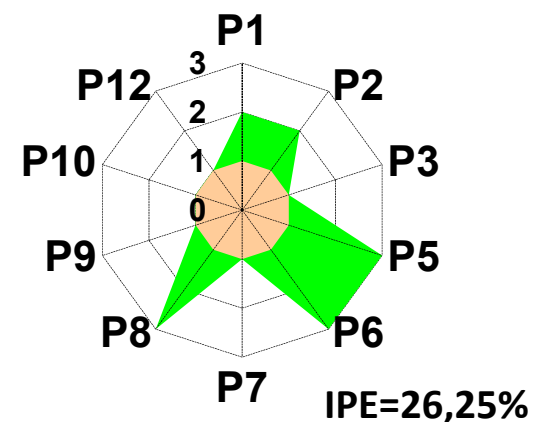
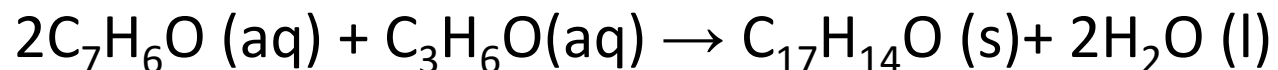


AFETA A VERDURA



**MÉTRICAS DE
INTENSIDADE DE MASSA
GLOBAL (MI)
DE REAGENTES (RI)
DE SOLVENTES (SI)**

SÍNTESE DA DIBENZALACETONA



REAÇÃO



“WORK-UP”
DO PRODUTO
(ISOLAMENTO)



SÍNTESE DE DIBENZALACETONA

ACETONA + BENZALDEÍDO

(25 MMOL, PROPORÇÕES ESTEQUIOMÉTRICAS)

HIDRÓXIDO DE SÓDIO

SOLVENTES :

ETANOL + ÁGUA

WORK-UP

SOLVENTE : ÁGUA

CONTRIBUIÇÕES DAS DUAS FASES PARA AS MÉTRICAS

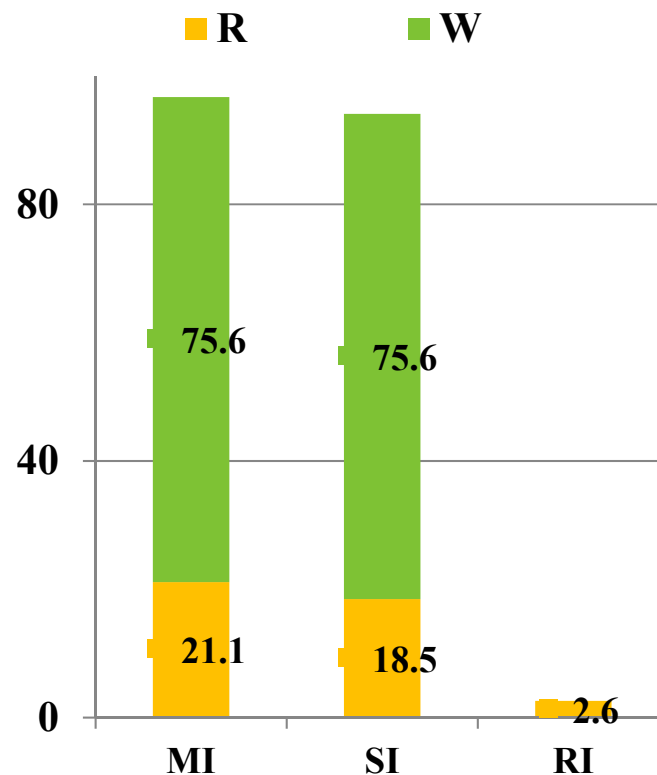
$$MI = \frac{m_{reagentes} + m_{solventes}}{m_p}$$

$$RI = \frac{m_{reagentes}}{m_p} \quad SI = \frac{m_{solventes}}{m_p}$$

m Reagentes =
m reag. estequiométricos +
m NaOH

m solventes =
m água + m etanol

$$MI = RI + SI$$



CONTRIBUIÇÃO DO “WORK-UP” PARA A MI : ELEVADA
RESULTA TODA DA ÁGUA

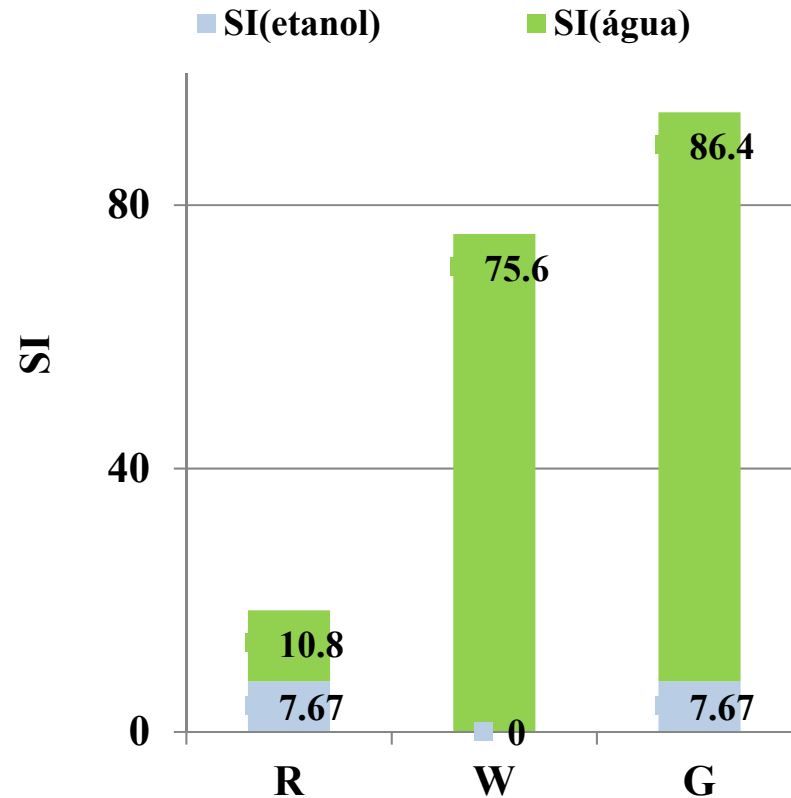
REAGENTES : CONTRIBUIÇÃO PEQUENA (RI = 2,6 EM MI = 96,7)

CONTRIBUIÇÕES DOS SOLVENTES PARA A SI DAS FASES

$$SI(\text{etanol}) = \frac{m_{\text{etanol}}}{m_p}$$

$$SI(\text{água}) = \frac{m_{\text{água}}}{m_p}$$

$$SI(G) = SI(R) + SI(W)$$



CONTRIBUIÇÃO DOS SOLVENTES PARA OS RESÍDUOS

MAIOR PARTE DEVE-SE À ÁGUA:

SI(ÁGUA) = 86,4 SI(ETANOL)=7,7

SÍNTESE DA DIBENZALACETONA A DIFERENTES ESCALAS

ESCALAS (mmol de ACETONA)

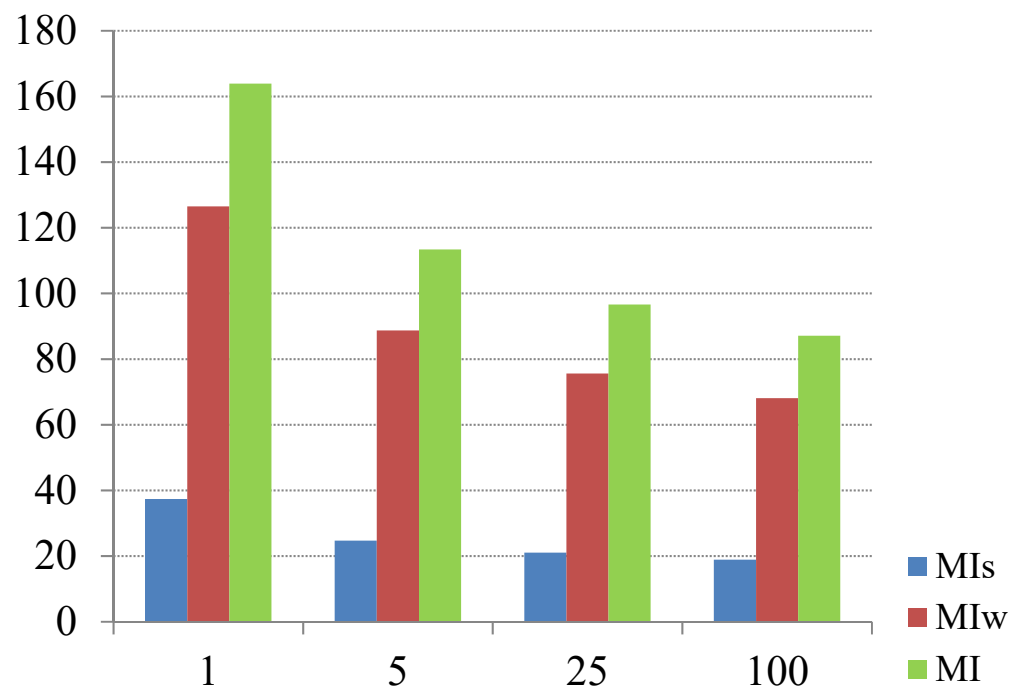
1 mmol

5 mmol

25 mmol

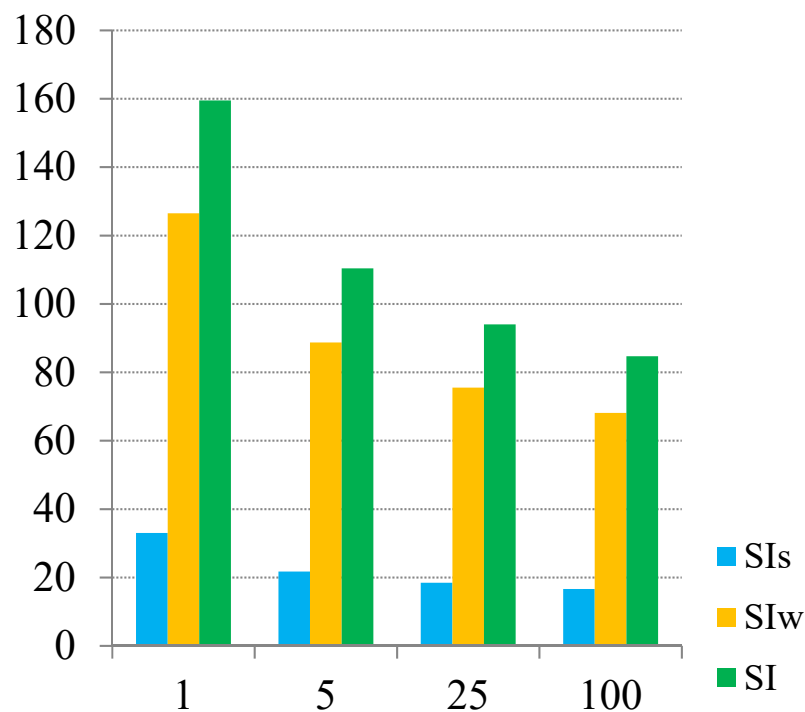
100 mmol

CONTRIBUIÇÕES DA MI NAS DIFERENTES ESCALAS



MI GLOBAL
INFLUENCIADA
PRINCIPALMENTE POR
MI DO "WORK-UP"

CONTRIBUIÇÕES DA SI NAS DIFERENTES ESCALAS



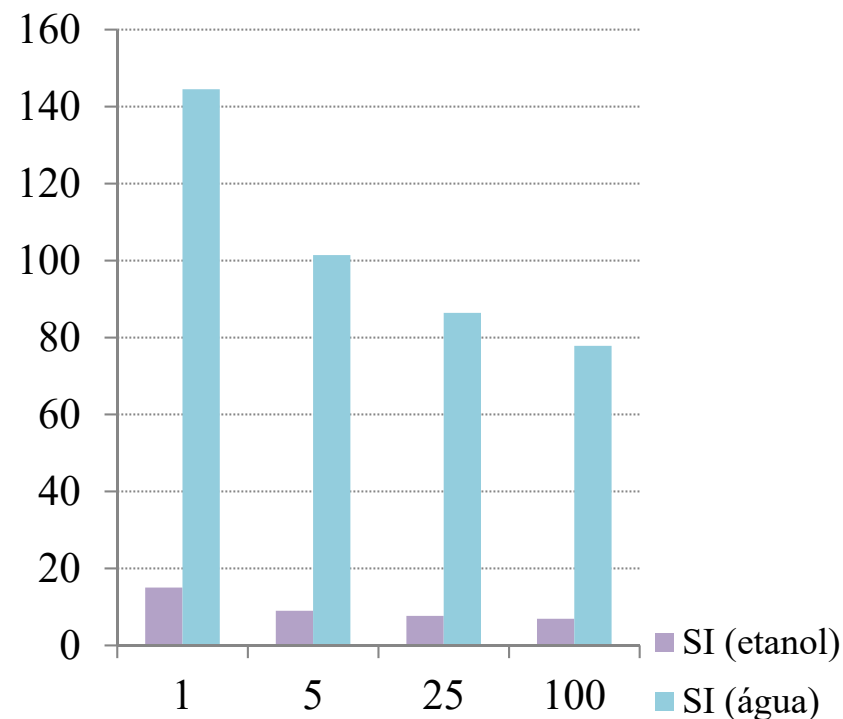
SI GLOBAL

INFLUENCIADA

PRINCIPALMENTE POR

SI DO "WORK-UP"

(SÓ SE UTILIZA ÁGUA)



SI(ÁGUA) > SI(ETANOL)

(SÓ UTILIZADO NA SÍNTESE)

CONCLUSÕES

CONSIDERAÇÃO DOS SOLVENTES NAS MÉTRICAS:
PERMITE PLENA CONSCIÊNCIA DE
QUANTIDADES DE SOLVENTES CONSUMIDOS
QUE ACABAM EM RESÍDUOS

DECOMPOSIÇÃO DAS MÉTRICAS MI E SI EM PARCELAS
ÚTIL PARA FORNECER MAIS INFORMAÇÃO SOBRE
UTILIZAÇÃO DA MATÉRIA

- **RESÍDUOS PRODUZIDOS NAS SÍNTESES**
- **IMPORTÂNCIA DO “WORK-UP” NA VERDURA GLOBAL**

AGRADECIMENTOS

TRABALHO DE M.G.T.R E D.A.C. APOIADO PELA FCT BOLSA PEST-C/EQB/LA0006/2011

Referências

- (1) Ribeiro, M.G.T.C.; Machado, A.A.S.C. *Green Chem. Let. Rev*, **2012**, DOI: 10.1080 / 17518253.2012.669798.
- (2) Ribeiro, M.G.T.C.; Machado, A.A.S.C. *J. Chem. Ed.*, **2011**, 88, 947-951.
- (3) Ribeiro, M.G.T.C.; Costa, D.A.; Machado, A.A.S.C. *Green Chem. Let. Rev*, **2010**, 3, 149-159.
- (4) Ribeiro, M.G.T.C.; Costa, D.A.; Machado, A.A.S.C. *Quím. Nova*, **2010**, 33, 759-764.