

Adélio Machado

INTRODUÇÃO ÀS
Métricas da
Química Verde
UMA VISÃO SISTÊMICA

ÍNDICE

Lista de abreviaturas	9
Prefácio	11
Preâmbulo	15
Objetivo geral e alvo do texto...15. Motivação...16. Contexto...22. Objetivos específicos e operacionais...28. Estrutura do texto...28.	
Capítulo 1 – Introdução ao conceito de métrica	33
1.1. Métricas de sistemas	34
Definição...36. Características essenciais...40. Concepção...41. Exemplos...43. Discussão...46.	
1.2. Métricas em Química Verde	49
Verdura química e necessidade da sua avaliação...50. Breve história da gênese das métricas de verdura química...55. Métricas da Química Verde...70. Discussão...77.	
Conclusão	78
Capítulo 2 – Métricas de massa	81
2.1. Alguns aspectos preliminares genéricos	85
Materialização e desmaterialização da Química...85. Definição da fronteira do sistema...89. Normalização com base no produto...92. Terminologia...93.	
2.2. Métricas clássicas da Química: rendimento e seletividade	98
Revisão das métricas...98. As limitações das métricas clássicas...102. Discussão...105.	
2.3. Fator E e intensidade de massa	107
Fator E...107. Intensidade de massa (MI) ...113. Discussão...121.	
2.4. Utilização atômica e economia atômica	122
A filosofia de base da economia atômica...122. Utilização atômica (AU) ...123. Economia atômica (AE) ...125. Relação entre a utilização atômica e a economia atômica ...127. Exemplos de cálculo da economia atômica...129. Economia atômica e natureza das reações...130. Discussão...133.	
2.5. Produtividade atômica	137
Química Verde e economia...137. Produtividade econômica...138. Produtividade atômica...139. Discussão...141.	
2.6. Métricas de massa surgidas em contexto industrial	141
Necessidade de outras métricas de massa...141. Eficiência de massa da reação (RME)...143. Eficiência de massa elementar (XEE)...147. Exemplo de cálculo comparativo de métricas de massa...147. Análise dos resultados do estudo industrial...151. Discussão...153.	
2.7. Sugestão de procedimento para a aplicação de métricas de massa	155
Procedimento...156. Limitações do procedimento sugerido...159. Discussão...160.	
Conclusão	160

Capítulo 3 – Métricas holísticas	167
3.1. Gênese das métricas	170
3.2. Aspectos gerais sobre a construção de métricas holísticas	176
Seleção dos princípios da Química Verde a serem envolvidos na avaliação...176.	
Obtenção de dados para a avaliação das componentes ambientais..178.	
3.3. Quadro verde (QV)	186
Construção do quadro verde...186. Discussão...186.	
3.4. Círculo verde (CV)	188
Fundamento da métrica...188. Construção do círculo verde...188. Índice de cumprimento dos princípios (ICP)...189. Exemplo: síntese do sulfato de tetra-aminocobre(II) monoidratado...190. Discussão...193.	
3.5. Matriz verde (MV)	193
Análise SWOT...194. Uso da análise SWOT na avaliação da verdura química: construção da matriz verde...196. Exemplo: síntese do sulfato de tetra-aminocobre(II) monoidratado...199. Discussão...201.	
3.6. Estrela verde (EV)	202
Fundamento da métrica...202. Construção da estrela verde...202. Vantagens da estrela verde..204. Algumas observações...205. Construção da estrela verde para avaliar a verdura química de sínteses laboratoriais...206. Índice de preenchimento da estrela (IPE)...209. Exemplo: síntese do sulfato de tetra-aminocobre(II) monoidratado...210. Procedimento sugerido para a otimização de sínteses...212. Utilidade da estrela verde...214. Comparação da estrela verde com as métricas de massa...215. Discussão...217.	
3.7. Comparação das métricas	218
Comparação das métricas holísticas...218. Comparação das métricas holísticas com as métricas de massa...221. Discussão...222.	
Conclusão	224
Conclusões	130
Referências	241

ÍNDICE DAS CAIXAS DE CÁLCULO

1. Relação entre o fator E e a intensidade de massa	116
2. Relação entre o fator E_{MW} e a utilização atômica	125
3. Relação entre a intensidade de massa e a economia atômica	128
4. Cálculo da eficiência de massa da reação e da eficiência elementar do carbono	149
5. Definição de verdura química aceitável a partir da relação entre a economia atômica e o fator E_{MW}	165