

Síntese a micro e macroescala – qual é mais verde?

M. J. Borges, 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

ENQUADRAMENTO DO TRABALHO

A utilização da microescala é aconselhada nos laboratórios de ensino por reduzir a quantidade de reagentes usados e de resíduos produzidos e, conseqüentemente, dos custos experimentais, dos tempos de exposição aos materiais potencialmente tóxicos e dos tempos de reacção [1]. Esta comunicação decorre de um projecto em curso que tem como objectivo avaliar se há, ou não, ganhos de verdura quando se passa da macro para a microescala, referindo-se à síntese do acetato de n-butilo (incluída) nos programas de Química do Ensino Secundário), para a qual a influência da escala na verdura atómica foi avaliada por diversas métricas [2]: métricas de massa ou de produtividade atómica, já que se tem vindo a desenvolver esforços de qualificar o seu funcionamento – factor E, intensidade de massa (MI), utilização atómica percentual (AU), eficiência de massa relativa (RME) e eficiência de carbono percentual (CEE); e a métrica holística ESTRELA VERDE [3-5].

OBJECTIVO

Comparar a verdura das sínteses realizadas a macro e a microescala.

METODOLOGIA

As sínteses foram realizadas em condições quase estequiométricas (excesso de 1,9% de ácido acético), com Dowex 50Wx2-100 (Sigma-Aldrich) como catalisador [6]. Na macroescala usou-se uma manta e na microescala um disco eléctrico, ambos com agitação (figura 1). A microescala, a redução de escala foi de 1/10 (199 → 19,9 mmol de 1-butanol) e o tempo de refluxo reduziu de 103 para 30 minutos. Em ambas, removeu-se a água para aumentar a extensão da reacção.

RESULTADOS

Os resultados (Tabela 1) mostram que todas as métricas calculadas (água excluída) indicam uma perda de verdura atómica a microescala. Isto deve-se à diminuição do rendimento, que resulta das perdas de produto ocorridas durante o seu isolamento, mais relevantes a microescala, devido às pequenas quantidades dele. Por outro lado, a EV manteve-se igual (IPE = 26, um valor que evidencia verdura limitada), pelo que os resultados das métricas são contraditórios.

O valor de AE é igual para os dois procedimentos porque é um valor teórico: considera-se que não há perdas e que todos os reagentes são convertidos em produtos e coprodutos.

CONCLUSÕES

▪ A microescala reduzem-se as quantidades de substâncias e os tempos de reacção, pelo que a diminuição do risco (= perigosidade x exposição) resulta da diminuição da exposição, não da perigosidade – as vantagens são obtidas no âmbito do velho *paradigma do risco*, não do moderno *paradigma ecológico* em que a QV é suportada. Ganha-se verdura, reduzindo os riscos para a saúde, de acidente e os resíduos, mas ela é de “tipo clássico” (via exposição).

▪ A utilização da microescala nos laboratórios educacionais tem vantagens óbvias, mas o uso das métricas vigentes da QV para comparar os ganhos de verdura não os detecta, dada a sua diferente natureza – será necessária uma nova métrica, dirigida à exposição, capaz de aferir a verdura nesta situação.



Figura 1 – Montagens a micro e a macroescala

Métricas	Média ± DP (n=4)	
	Macroescala	Microescala
Estrela Verde		
Rendimento %	80,4±1,8	58,1±3,0
Factor E	0,91±0,04	2,1±0,2
MI	1,91±0,04	3,1±0,2
AE %	86,54±0,00	86,54±0,00
RME % = AU %	69,0±1,6	49,9±2,5
CEE %	79,9±1,8	57,8±2,9

Tabela 1 – Métricas da síntese

Bibliografia

[1] M. M. Singh, Z. Szafran e R. M. Pike, *J. Chem. Educ* **76** (1999) 1684-1686. [2] A. Lapkin and D. Constable (eds.), *Green Chemistry Metrics – Measuring and Monitoring Sustainable Processes*, Wiley, 2009. [3] M. G. T. C. Ribeiro, D. A. Costa e A. A. S. C. Machado, *Green Chem. Lett. and Rev.* **3** (2010) 149-159. [4] M. G. T. C. Ribeiro, D. A. Costa e A. A. S. C. Machado, *Química Nova* **33** (2010) 759-764. [5] M. G. T. C. Ribeiro e A. A. S. C. Machado, *J. Chem. Ed.* **88** (2011) 947-953. [6] K. L. Williamson, R. D. Minard e K. M. Masters, *Macroscale and Microscale Organic Experiments*, Houghton Mifflin Co, Boston, 2007.