

Novas métricas laboratoriais de verdures de sínteses: energia e tempo

M. J. Borges,¹ M. G. T. C. Ribeiro,¹ A. A. S. C. Machado²

¹REQUIMTE, Dep. de Química e Bioquímica, Fac. de Ciências da Universidade do Porto

²Dep. de Química e Bioquímica, Fac. de Ciências da Universidade do Porto

OBJETIVO

As métricas da Química Verde (de massa, energéticas e ambientais) são fundamentais para a otimização da verdures das reações químicas [1]. A introdução no laboratório de síntese de novas métricas que avaliem grandezas esquecidas pela química académica, mas com grande importância na química industrial, tem interesse no ensino da Química - para sensibilizar os alunos para as diferenças da prática desta entre o laboratório e a indústria. O objectivo deste trabalho foi introduzir duas novas métricas de verdures nos laboratórios de síntese com esta finalidade:

- Intensidade de tempo (TI)
- Intensidade de energia (EI)

MÉTRICAS

Tabela 1 – Métricas de Intensidade de tempo e de energia

Intensidade de tempo	$TI = \frac{\text{Tempo}}{m_{\text{produto}}}$
Intensidade de energia	$EI = \frac{\text{Energia}}{m_{\text{produto}}}$

Tabela 2 – Métricas de massa da Química Verde

Intensidade de massa	$MI = \frac{m_{\text{reagentes totais}}}{m_{\text{produto}}}$
Fator E	$\text{Fator E} = \frac{m_{\text{resíduos totais}}}{m_{\text{produto}}} = MI - 1$
Eficiência de massa percentual	$RME = \frac{m_{\text{produto}}}{m_{\text{reagentes estequiométricos}}} \times 100$

TRABALHO EXPERIMENTAL

Foram realizadas sínteses do acetato de n-butilo em condições quase estequiométricas, fazendo reagir ácido acético glacial (excesso de 1,9%) com 1-butanol, utilizando Dowex 50Wx2-100 (Sigma-Aldrich) como catalisador [2], com mantas com e sem agitação, medindo-se o tempo de reação e a energia eléctrica consumida. Os tempos de refluxo foram otimizados para 120 e 210 min, com e sem agitação, respetivamente, obtendo-se rendimentos semelhantes (80%) (Fig.1, pontos 1-4). No entanto, o grau de pureza foi mais elevado quando se usou a manta com agitação, 98 % (92% sem agitação). O consumo de energia foi superior quando se utilizou a manta com agitação, cerca de 1,7 vezes, enquanto o tempo foi inferior na mesma proporção (Fig. 2, pontos 5, 6). Os valores de EI (Fig. 2, pontos 7, 8) e TI (Fig. 1, pontos 3, 4) têm variações semelhantes já que a massa de produto é semelhante (definições, Tabela1). A RME (Fig. 3, pontos 9, 10) e o Fator E (Fig. 3, pontos 11, 12) apresentam valores semelhantes nos dois casos, pois as massas de reagentes utilizados e produto obtido foram semelhantes (definições, Tabela 2).

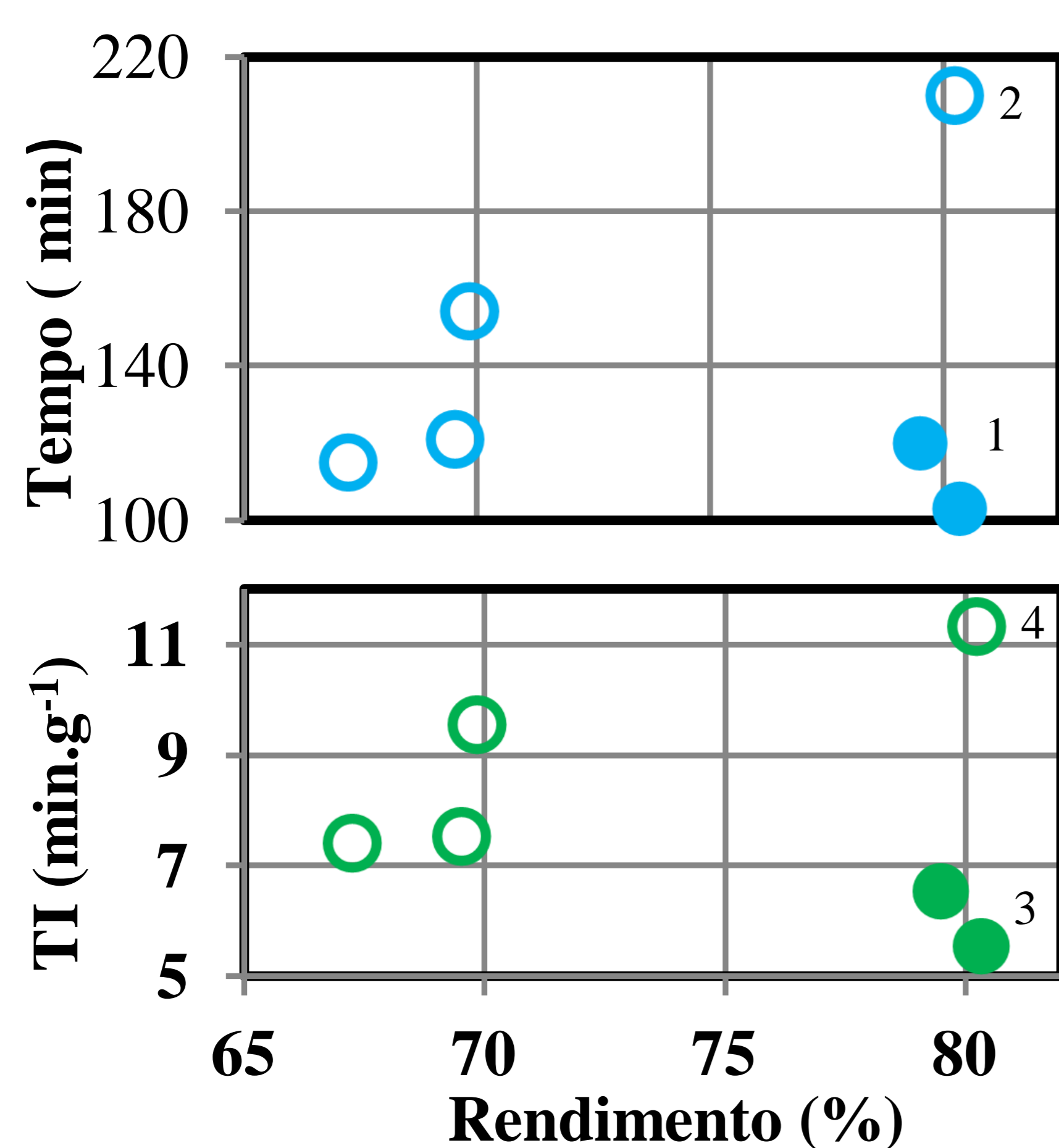


Figura 1 – Tempo, ● com, ○ sem agitação; TI, ● com, ○ sem agitação.

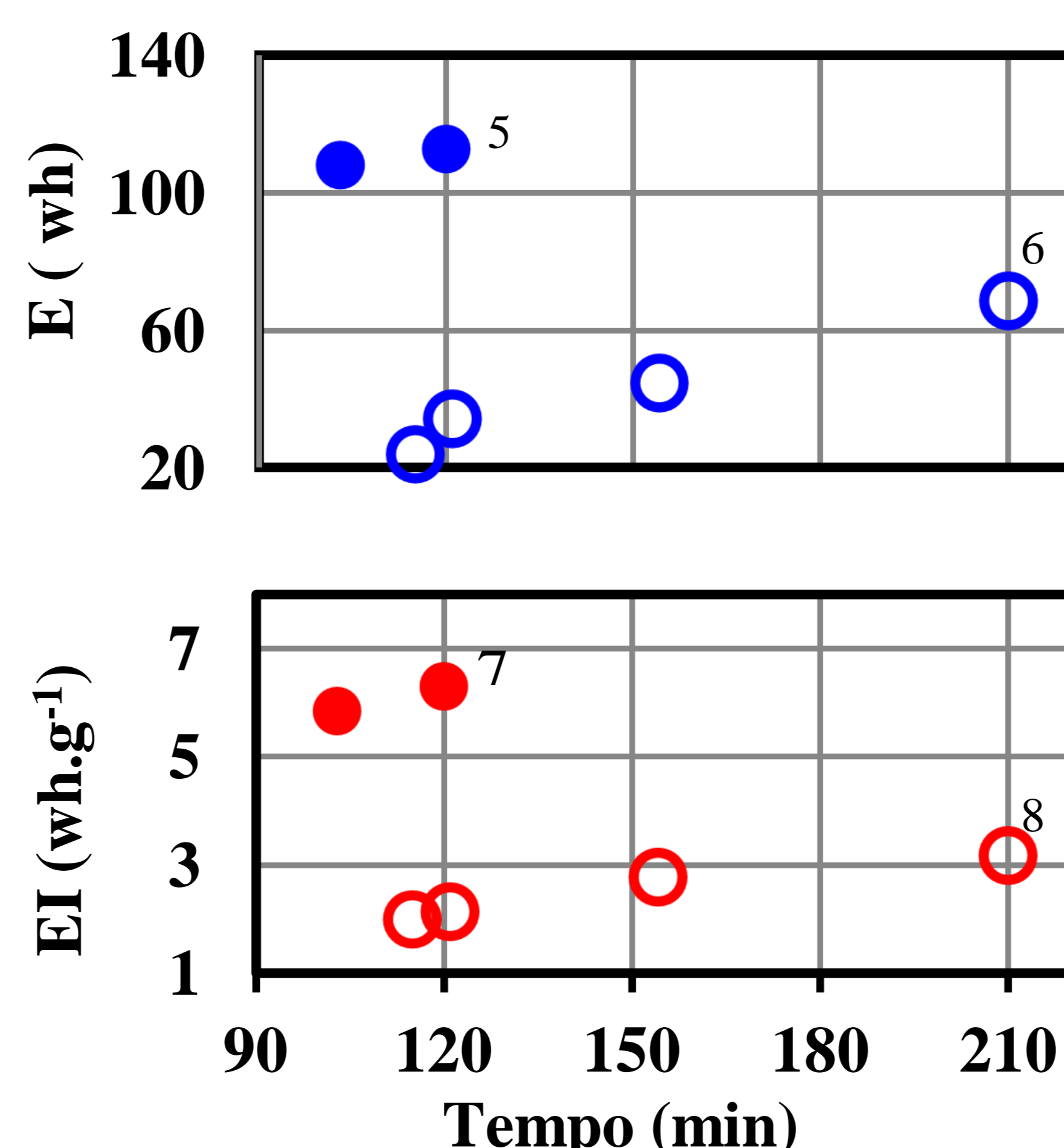


Figura 2 – Energia, ● com, ○ sem agitação; EI, ● com, ○ sem agitação.

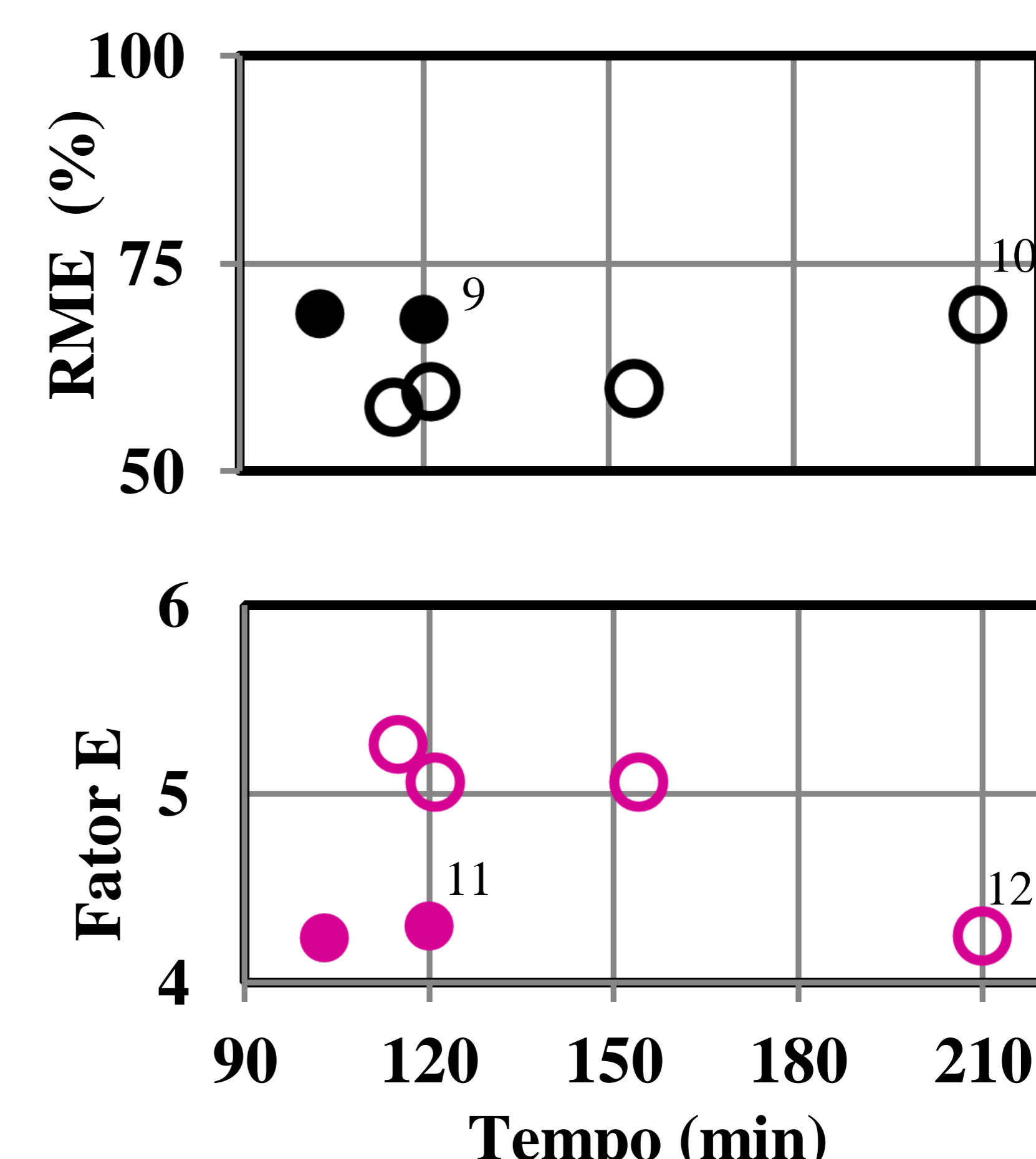


Figura 3 – RME, ● com, ○ sem agitação; Fator E, ● com, ○ sem agitação.

CONCLUSÕES

- O uso de mantas com agitação implica decréscimo do tempo de reação (e facilita a realização numa aula), mas estas consomem mais energia e o seu preço é mais elevado (aumento de custo)
- A energia e o tempo de reação, que afectam a produtividade do fabrico industrial, podem ser introduzidos no laboratório
- A medição destas variáveis e as métricas TI e EI permitem transmitir aos alunos a importância na química real do consumo de energia e do tempo de reacção, normalmente ignorados no laboratório académico de síntese
- Uma abordagem mais holística da síntese laboratorial como a apresentada aqui é vantajosa para a formação dos alunos, quer em geral quer na aprendizagem da Química Verde

Bibliografia

[1] Ribeiro, M.G.T.C., Machado, A.A.S.C. *J. Chem. Ed.*, **2011**, 88, 947-951. [2] Williamson, K. L., Minard, R. D., Masters, K. M., *Macroscale and Microscale Organic Experiments*, Houghton Mifflin Company, NY, **2007**.