

IMPORTÂNCIA DA LOGÍSTICA DA VIA DE SÍNTESE EM QUÍMICA VERDE

Adélio A. S. C. Machado*

Departamento de Química, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto, R. Campo Alegre, 687, Porto 4169-007, Portugal

Na Figura 1S exemplifica-se como o deslocamento do passo de baixo rendimento afeta os custos de reagentes, de solventes e totais, por unidade de massa de produto obtido – apresentam-se os custos de cada passo ao longo da síntese para a via de base (todos os rendimentos a 90%) e para as vias com rendimento reduzido no primeiro, quinto e décimo passos. O rendimento global, que é de 35% ($= 0,9^{10}$) quando o rendimento de todos os passos é de 90%, reduz-se a 17% ($= 0,9^9 \times 0,45$) com o abaixamento do rendimento de um passo para 45%, independentemente da posição deste na via. Esta variação implica um aumento de custos, evidenciado quando se compara o gráfico de cima da Figura 1S com qualquer dos outros três. A comparação destes últimos

em globo mostra como o avanço da colocação na via do passo de rendimento reduzido aumenta os custos em um número cada vez maior dos passos anteriores.

A Figura 2S apresenta os resultados dos cálculos para o Exemplo 4, mostrando a influência da posição do passo com rendimento aumentado para 95% sobre os custos e métricas de massa. Os custos diminuem à medida que o passo de rendimento acrescido avança ao longo da via (figura superior), correspondendo à sua redução um aumento da verdura, traduzida por aumento da economia atômica e diminuição do fator E (figura inferior).

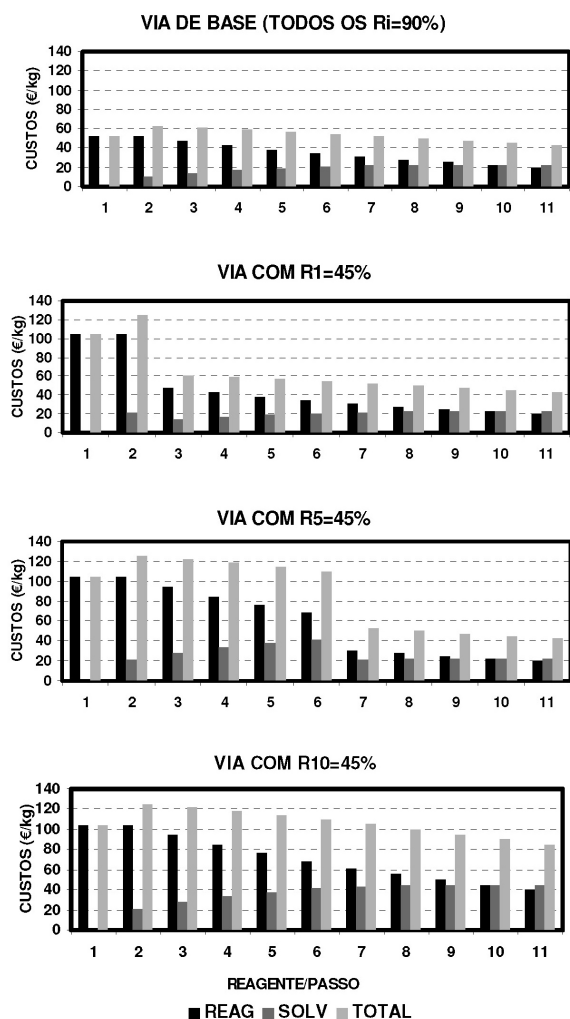


Figura 1S. Variação dos custos por unidade de produto de passos da via de síntese no Exemplo 1. De cima para baixo: todos os passos com rendimento igual 90%; 1º passo com rendimento 45%; 5º passo com rendimento 45%; 10º passo com rendimento 45%

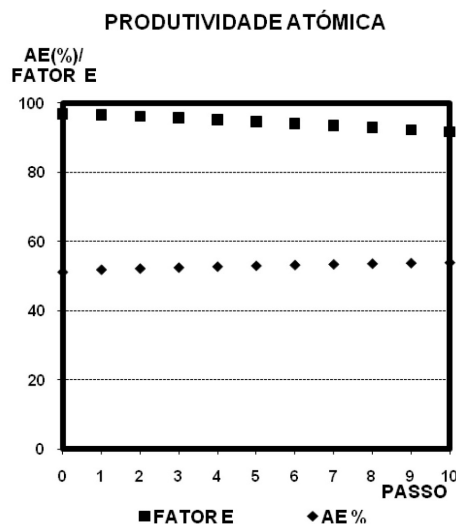
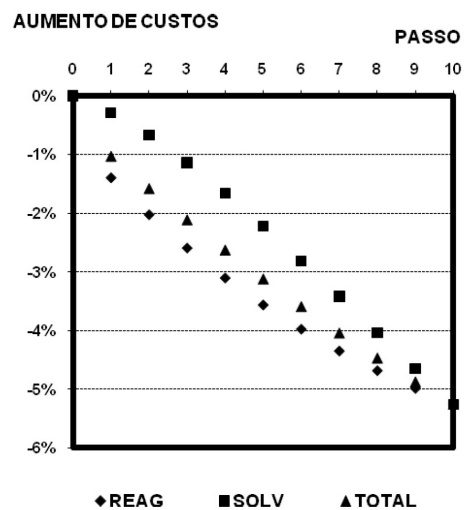


Figura 2S. Influência da posição do passo com rendimento aumentado para 95% sobre os custos e métricas de massa no Exemplo 4. Em cima: diminuição de custos. Em baixo: economia atômica e fator E

*e-mail: amachado@fc.up.pt