

Indeks untuk reaksi kimia



<http://www.oc-praktikum.de>

Indeks sederhana

Pada kimia organik sintesis, hasil dan kemurnian merupakan indeks umum, yang mengkarakterisasi kualitas dari perubahan kimia yang terjadi. Rendemen Y didefinisikan sebagai persamaan dari jumlah produk yang dihasilkan secara nyata dari reaksi (hasil sesungguhnya) dan jumlah produk yang dapat diperoleh secara teoritis jika reagen pembatas total R telah digunakan berdasarkan persamaan stoikiometri (hasil teori atau stoikiometri), dengan asumsi kemurnian reagen 100 %.

Jika n_K adalah jumlah reagen pembatas sebelum reaksi dan a_P dan a_K koefisien stoikiometri dari produk P dan reagen pembatas R , rendemen dinyatakan oleh

$$Y = \frac{n_P a_R}{n_R a_P}. \quad (1)$$

Jika n_P adalah jumlah setelah pemurnian, hal ini disebut hasil final. Umumnya, rendemen yang didefinisikan dengan persamaan ini akan dinyatakan dalam persentase (persen hasil atau persentase hasil).

Sebelum menjalankan reaksi, anda dapat terlebih dahulu menghitung yang disebut atom ekonomi dari persamaan stoikiometri. Atom ekonomi menyatakan fraksi mana dari jumlah massa atom pada sisi kiri dari persaaam akan muncul pada sisi produk. Dengan melihat definisi ini, hal ini merupakan evaluasi pendekatan sintetik dari sisi pandang ekonomi. Konsep atom ekonomi diperkenalkan oleh B. M. Trost pada tahun 1995 [1].

Kemurnian produk ditentukan dengan kromatografi lapis tipis (KLT), kromatografi gas (GC) atau kromatografi cair kinerja tinggi (HPLC) dan juga dinyatakan dalam persentase. Namun, harus dicatat bahwa setiap sistem analisis memiliki keterbatasan. Sebagai contoh, pada kromatografi gas hanya senyawa yang dapat dievaporasi pada temperatur sampai 250 °C tanpa dekomposisi yang dapat dianalisis.

Efisiensi massa dari reaksi didefinisikan sebagai rasio massa produk yang diperoleh dan dimurnikan m_P dibagi dengan jumlah massa semua senyawa yang digunakan pada campuran reaksi selama eksperimen:

$$e_S = \frac{m_P}{\sum_i m_i} \quad (2)$$

dimana indeks i berlaku untuk semua senyawa yang digunakan. Pendingin seperti air pendingin atau e_S , yang tidak dicampur dengan campuran reaksi menurut kesepakatan kami tidak diperhitungkan. Perhitungan untuk senyawa semacam ini adalah pekerjaan yang lebih detail pada metoda analisis input.

Efisiensi massa e_S seperti yang didefinisikan disini serupa dengan kebalikan dari faktor E (faktor lingkungan) seperti yang diperkenalkan oleh R. Sheldon pada tahun 1994 [2]. Kami menggunakan indeks efisiensi sehingga nilai yang lebih tinggi sesungguhnya menunjukkan adanya perbaikan.

Efisiensi energi e_E reaksi didefinisikan dalam analogi sebagai rasio massa yang diperoleh dan dimurnikan m_P dibagi dengan jumlah energi yang dikonsumsi selama percobaan:

$$e_E = \frac{m_P}{\sum_k E_k} \quad (3)$$

dimana indeks k berlaku untuk semua konsumsi energi yang dapat diukur secara terpisah, yaitu secara umum adalah energi listrik yang digunakan. Pada pengukuran ini, termasuk energi yang digunakan untuk menghasilkan es untuk pendinginan. Petunjuk penting untuk pengukuran kontribusi energi seperti ini ditampilkan pada artikel German NOP [Energy metrics and measurements](#).

Atom ekonomi, efisiensi massa dan efisiensi energi dihitung secara otomatis untuk eksperimen NOP dan dapat ditemukan pada menu entry "evaluation", submeni "indices" pada setiap halaman eksperimen ([contoh link](#)).

Alat uji lingkungan untuk sintesis organik (Environmental Assessment Tool for Organic Syntheses/EATOS)

Evaluasi berdasarkan senyawa pada reaksi kimia (termasuk reaksi banyak tahap) dapat dilakukan dengan Environmental Assessment Tool for Organic Synthesis (EATOS, [Website EATOS](#)) [3].

Pendekatan ini berdasarkan pada faktor Sheldon E (lihat di atas), yaitu pada jumlah total senyawa yang digunakan pada reaksi yang berhubungan dengan produk yang dihasilkan.

Untuk setiap senyawa yang digunakan faktor environmental load Q didefinisikan yang diturunkan dari nilai MAK (di German: konsentrasi workplace maksimum), Simbol bahaya, frasa R (lihat Artikel NOP [frasa R dan S](#)), nilai LD_{50} dan nilai LC_{50} , tetapi juga dapat berdasarkan harga, bergantung pada pusat evaluasi dari pengguna. Indeks Lingkungan EI, digunakan sebagian besar untuk evaluasi pembandingan pada langkah sintesis dan tehnik yang berbeda dihitung sebagai jumlah massa semua senyawa dikalikan dengan faktor Q_{nya} yang berhubungan.

Konsep evaluasi diimplementasikan dengan program yang tersedia secara bebas dan platform yang tidak bergantung. Program juga menghitung atom ekonomi dan faktor Sheldon E untuk reaksi yang digunakan.

Anda dapat menemukan penjelasan singkat dari pendekatan evaluasi EATOS dan juga aplikasinya untuk membandingkan **eksperimen 4010** dengan metoda alternatif pada artikel "**Bewertung der umweltverträglichkeit von chemischen Reaktionen**". Kami juga menawarkan manual (**Bedienungs- und Benutzungsanleitung für EATOS**) di German.

References

- [1] B. M Trost. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl*, 34:259 – 281, 1995.
- [2] R. Sheldon. *Chemtech*, 24(3):38 – 47, 1994.
- [3] M. Eissen and J. O. Metzger. Environmental performance metrics for daily use in synthetic chemistry. *Chem. Eur. J.*, 8(16):3580 – 3585, 2002.

update April 28, 2008