

# Indici per reazioni chimiche



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

## Indici semplici

Nel campo della chimica organica sintetica, la resa e la purezza sono due indici molto comuni e utilizzati, che caratterizzano la bontà di un processo chimico. La resa  $Y$  viene definita come il rapporto tra la quantità di prodotto ottenuta da una reazione (resa finale) e la quantità di prodotto teoricamente ottenibile, nel caso in cui tutto il reagente limitante  $R$  fosse convertito nel composto finale, in accordo con l'equazione stechiometrica del processo (resa teorica o stechiometrica); in questo modo viene implicitamente considerata una purezza dei reagenti pari al 100%.

Se  $n_R$  è la quantità (espressa in moli) del reagente limitante prima della reazione e  $a_P$  e  $a_R$  sono (rispettivamente) i coefficienti stechiometrici del prodotto  $P$  e del reagente limitante  $R$ , la resa è fornita da:

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

Se  $n_P$  è la quantità (espressa in moli) ottenuta in seguito alla purificazione, allora il valore che si ottiene è detto resa finale; generalmente, la resa definita con l'equazione sopra riportata viene espressa come percentuale (resa percentuale).

Prima di realizzare effettivamente una reazione, è possibile calcolarne la cosiddetta atom economy, semplicemente rifacendosi alla sua equazione stechiometrica. Per valutare l'atom economy, è necessario sommare tra loro le masse atomiche delle specie presenti sulla sinistra dell'equazione stechiometrica e calcolarne la frazione che compare nel prodotto. Secondo la definizione appena fornita, quindi, questo calcolo permette di avere un'idea su quale sia l'approccio sintetico da preferire sotto il profilo economico; il concetto di atom economy è stato introdotto per la prima volta da B. M. Trost nel 1995 [1].

La purezza di un prodotto può essere determinata tramite diverse procedure cromatografiche (TLC, GC o HPLC) e viene solitamente espressa come percentuale; bisogna, tuttavia, sottolineare che ciascun metodo analitico presenta delle limitazioni: la GC, ad esempio, permette di analizzare solo sostanze che evaporano a temperature inferiori ai 250 °C, senza decomporsi.

L'efficienza di massa  $e_S$  di una reazione viene definita come il rapporto tra la massa del prodotto puro ottenuto  $m_P$  e la somma delle masse di tutte le sostanze introdotte nell'ambiente di reazione durante l'esperimento:

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

dove l'indice  $i$  si riferisce a tutte le specie. Agenti refrigeranti come acqua o ghiaccio, che non entrano in contatto con l'ambiente di reazione, non vengono presi in considerazione secondo questo tipo di approccio; nel caso del (molto più raffinato) metodo dell' Input Analysis, invece, si tiene conto anche di questo genere di contributi.

L'efficienza di massa  $e_S$  come è stata definita sopra, è molto simile all'inverso del fattore E (Environmental Factor - fattore ambientale), introdotto da R. Sheldon nel 1994 [2]. Nel nostro caso, tuttavia, si preferisce utilizzare un indice di efficienza il cui valore cresca al migliorare della situazione.

L'efficienza energetica  $e_E$  di una reazione viene definita (analogamente a quanto visto prima) come il rapporto tra la massa del prodotto puro ottenuto  $m_P$  e l'energia consumata durante l'esperimento:

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

dove l'indice  $k$  si riferisce a tutti i contributi energetici determinabili separatamente: in generale, si fa riferimento all'energia elettrica prelevata dalla rete. In questo genere di valutazione, si include anche, ad esempio, l'energia spesa per produrre il ghiaccio di raffreddamento. Consigli importanti su come misurare contributi energetici di questo tipo si trovano nell'articolo NOP dal titolo **Energia: indici e misurazione**.

I valori di atom economy, efficienza di massa ed efficienza energetica vengono automaticamente calcolati per tutti gli esperimenti NOP; essi possono essere trovati sotto la voce del menu Valutazione, sotto-menù Indici, sulla pagina di ogni esperimento (**Esempio**).

## EATOS

Una valutazione delle reazioni chimiche (anche delle sintesi multi-step) basata sulle sostanze può essere realizzata tramite l' Environmental Assessment Tool for Organic Syntheses (letteralmente: Strumento di valutazione ambientale per sintesi organiche, EATOS, **Sito EATOS**) [3].

Questo approccio è basato sul fattore E di Sheldon (cfr. sopra), cioè rapporta la quantità totale delle sostanze necessarie per una reazione con il prodotto effettivamente ottenuto.

Per ciascuna delle sostanze usate, viene definito un Fattore di carico (Q) a partire dai valori MAK (Maximale Arbeitsplatz Konzentration - Concentrazione massima sul luogo di lavoro in Germania), dai simboli di pericolo, dalle Frasi di rischio R (cfr. l'articolo NOP **Frasi R e S**), dai valori LD<sub>50</sub> e LC<sub>50</sub>, e (talvolta) dai costi, in funzione delle necessità specifiche dell'operatore. L'indice ambientale (Environmental Index - EI), usato molto spesso per la valutazione e comparazione di processi e tecniche sintetiche, viene calcolato come la somma delle masse di tutte le sostanze usate, ciascuna moltiplicata per il fattore Q corrispondente.

Questo modello di valutazione è stato implementato su un software disponibile gratuitamente; tra le altre cose, esso permette anche il calcolo del fattore E di Sheldon e dell'atom economy delle reazioni inserite.

Una breve descrizione del metodo di valutazione EATOS, così come un'applicazione per il confronto tra l'**esperimento 4010** con una procedura alternativa, è disponibile nell'articolo NOP **Valutazione dell'impatto ambientale delle reazioni chimiche**; è, inoltre, disponibile un manuale per EATOS: **Installazione ed uso del software EATOS**.

## Riferimenti bibliografici

- [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 28 maggio 2008*