OTIMIZAÇÃO DA VERDURA QUÍMICA DO PROCESSO DE ISOLAMENTO E PURIFICAÇÃO DOS ÉSTERES METÍLICO E ETÍLICO DO ÁCIDO SALICÍLICO

Fernanda Borges dos Santos (PIBIC/FA), Marilei Casturina Mendes Sandri (Orientadora), e-mail: mcmsandri@gmail.com.

Universidade Estadual de Ponta Grossa / Departamento de Química.

Ciências Exatas e da Terra, Química Orgânica.

Palavras-Chave: *Química Verde, Ensino de Química, Síntese de Ésteres.*

Resumo

Nesse trabalho avaliou-se e otimizou-se o *workup* dos salicilatos de etila e metila, com vistas à aplicação didática. As análises *a priori* de protocolos disponíveis na literatura indicaram o acetato de etila como solvente mais verde e sua viabilidade se confirmou na avaliação de métricas de massa *a posteriori.*

Introdução

A Química Verde surgiu em 1990, visando tornar os processos químicos mais limpos e seguros, porém, o uso de solventes é um grande desafio, representando a maior parte dos resíduos na indústria, especialmente a farmacêutica (Prat *et al*., 2016). Portanto, o estudo propôs-se a avaliar e otimizar o *workup* (isolamento) do salicilato de etila e metila com diferentes solventes, para aplicação didática.

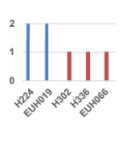
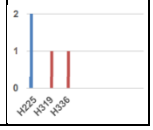
Materiais e Métodos

Avaliou-se *a priori* o processo de *workup* de protocolos que empregaram três diferentes solventes de extração em micro ou macroescala para os salicilatos de metila (SM) e etila (SE). São eles: éter etílico (Zandonai, 2013; Ribeiro, Amorim e Lopes, 2020); diclorometano (UFOP; Masetto e Soares, 2020); e acetato de etila (Barbosa *et al.,* 2016). As análises realizadas *a priori* envolveram as métricas Matriz Verde (MV) e Estrela Verde (EV), o guia de solventes GlaxoSmithKline (GKS) e a ferramenta SHE. O procedimento identificado *a priori* como sendo o mais verde (Barbosa *et al.*, 2021), passou por adaptações resultando nos protocolos adaptados - PA1 e PA2 - que foram testados experimentalmente e avaliados *a posteriori* com as métricas de massa Eficiência de massa (ME), Resíduo de solvente (WS) e Fator E.

Resultados e Discussão

As análises *a priori* mostraram que o procedimento de *workup* proposto por Barbosa *et al.,* (2016), com acetato de etila, apresenta o melhor índice de preenchimento da estrela (IPE) em relação aos demais, maiores vantagens de renovabilidade e degradabilidade dos reagentes, maior score na avaliação GSK e menos perigos físicos e à saúde em comparação ao éter etílico e ao diclorometano, como mostra a Tabela 1.

Tabela 1. Resultados a priori para o *workup* de SM e SE.

Solventes	IPE (%)	MV	GSK	Espectros de perigos potenciais
Éter etílico	25	Periculosidade; não renovabilidade e degradabilidade	(*score* < 3,5); P.e= 35°C; Altamente perigoso.	
Diclorometano	16,67	Idem	(*score* < 3,5); P.e= 40°C. Não recomendado	
Acetato de etila	41,67	Pontos fracos: periculosidade.	(7,5 < *score*); P.e= 77°C; recomendado.	

Os resultados de métricas de massa *a posteriori* para os protocolos adaptados de Barbosa *et al.* (2016) aplicados ao isolamento do SM e SE são mostrados na Tabela 2 e indicam que o uso de acetato de etila é um solvente viável para esse processo, tendo em vista valores similares de rendimento indicados na literatura com outros solventes e com pouca variação para quantidades reduzidas de solvente (PA2).

Tabela 2. Resultados *a posteriori* para o *workup* do SM e SE.

Protocolos	**ME (%)**	**WS (g/g)**	**Rendimentos (%)**	**Fator E**
PA1 - SM	0,94	106,98	61,45	63,48
PA2 - SM	1,94	52,72	58,19	41,02
Protocolos	**ME (%)**	**WS (g/g)**	**Rendimentos (%)**	**Fator E**
PA1 - SE	0,25	251,18	39,02	63,48
PA2 - SE	0,58	79,81	34,57	41,02

Conclusões

As análises *a priori* de protocolos disponíveis na literatura indicaram o acetato de etila como solvente mais verde e sua viabilidade se confirmou na avaliação de métricas de massa *a posteriori*.

Agradecimentos

Fundação Araucária e Universidade Estadual de Ponta Grossa.

BARBOSA, Maria Verônica de Sales et al. Síntese e caracterização do 2-(3-fenil-1, 2, 4-oxadiazol-5-il) fenol mediado por forno de micro-ondas doméstico. **Educação, Ciência e Saúde**, v. 3, n. 2, p. 17, 2016.

MASETTO, E. V.; SOARES, L. C. Síntese e avaliação da atividade antioxidante de salicilatos no biodiesel. **Jornada de iniciação científica e tecnológica**, v. 1, n. 10, 2020.

PRAT, Denis et al. CHEM21 selection guide of classical-and less classical-solvents. **Green Chemistry**, v. 18, n. 1, p. 288-296, 2016.

RIBEIRO, F. V.; AMORIM, A. P. O.; LOPES, C. S. Produção de Salicilato de metila (gelol) utilizando uma fonte de energia alternativa. Uma atividade experimental aplicada a alunos de ensino médio. **Revista Científica do IFAL**, Maceió, v. 11, n. 1, p. 1501-1514, nov. 2020.

UFOP**. Síntese do salicilato de metila (óleo de sempre-viva)**. Experimento 11 - QUÍMICA ORGÂNICA-QUI288-FARMÁCIA. Disponível em: https://www.professor.ufop.br/sites/default/files/legurgel/files/experimento_11_-_salicilato_de_metila.pdf. Acesso em: 20 set. 2024.

ZANDONAI, D. P. **A inserção da química verde no curso de licenciatura em química do DQ-UFSCar:** um estudo de caso. 2013. Dissertação (Mestrado Profissional) - Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2013.

ISSN 1676-0093