

Revisión

Una primera aproximación a la Química Verde o Química Sustentable o Sostenible (Green Chemistry)

Por **Laura Isabel Rossi**

lauraros@fcq.unc.edu.ar

Doctora en Ciencias Químicas. Profesora Adjunta, FCQ-UNC

Investigadora Adjunta, INFIQC-CONICET. Departamento de Química Orgánica, FCQ-UNC.

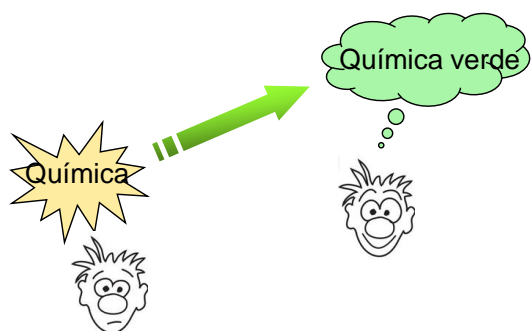
Resumen:

La Química Verde o Sustentable pretende revalorizar los aspectos positivos de la Química y evitar, a través de una revisión en la filosofía del trabajo diario, sus facetas negativas. Se puede decir que el principal interés es la disminución de la peligrosidad tanto de las sustancias químicas como de los procesos para obtenerlas, siendo su finalidad que la calidad de vida alcanzada en nuestros días no vaya en desmedro de las próximas generaciones

no sólo del ser humano sino de todo ser viviente sobre nuestro planeta.

Abstract:

Green chemistry aims to enhance the positive aspects of chemistry and to prevent the negative ones. The main interest is to decrease the use of dangerous chemical substances.



Para comenzar, nada mejor que definir la terminología a usar y luego hacer un poco de historia para entender el contexto en que surge y crece esta corriente dentro de la Química.

En el diccionario de La Real Academia Española(1) podemos encontrar las siguientes definiciones:

“química, ciencia que estudia la estructura, propiedades y transformaciones de la materia a partir de su composición atómica”; “verde, de color semejante al de la hierba fresca, la esmeralda, etc., que corresponde a la sensación producida por el estímulo de longitudes de onda de alrededor de 520 nm”; “sustentable, que se puede sustentar o defender con razones”, y para un mejor entendimiento, “sustentar, conservar algo en su ser o estado”; “sostenible, dicho de un proceso: que puede mantenerse por sí mismo, como lo hace, por ejemplo, un desarrollo económico sin ayuda exterior ni merma de los recursos existentes” o “especialmente en ecología y economía, que se

puede mantener durante largo tiempo sin agotar los recursos o causar grave daño al medio ambiente”. Entonces, los conceptos que definen a la *Química Sustentable* y *Sostenible* están de acuerdo con la definición dada por la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos, U.S. EPA (2) que dice: *La química verde consiste en productos y procesos químicos diseñados para reducir o eliminar impactos ambientales negativos. El empleo y la producción de estos productos químicos pueden incluir la reducción de residuos, componentes no tóxicos, y mejorar la eficiencia. La química verde es una actitud muy eficaz de prevención de la contaminación ya que aplica soluciones científicas innovadoras a situaciones ambientales del mundo real* (3).

Esta nueva forma de ver la química de siempre, se basa en doce principios que fueron propuestos por los Drs. Anastas y Warner cuando trabajaban para la EPA durante la última década del siglo XX (4). Son los siguientes:

- 1. Minimizar la generación de residuos:** Es mejor prevenir y/o evitar, desde el principio y en cualquier proceso, la generación de residuos que eliminarlos una vez que se han creado.
- 2. Maximizar la economía atómica:** El concepto de economía atómica fue introducido en 1991 por B.M. Trost como una medida de la eficiencia de una

reacción. La idea se basa en el diseño de métodos sintéticos en los que la incorporación al producto final de todos los materiales usados en la síntesis sea la mayor posible, haciendo que los pasos necesarios para la obtención de una sustancia sean lo más selectivos y se minimice la formación de subproductos y/o de residuos.

3. **Diseños sintéticos menos peligrosos para la salud y para el ambiente, tecnologías más seguras:** Siempre que sea posible, los métodos de síntesis deberán diseñarse para utilizar y generar sustancias que tengan poca o ninguna toxicidad, tanto para el hombre como para el medio ambiente.
4. **Uso y diseño de productos químicos menos tóxicos:** Los productos químicos se deben diseñar para efectuar la función deseada reduciendo al mínimo su toxicidad.
5. **Solventes y reactivos más seguros:** El uso de las sustancias auxiliares, por ejemplo disolventes, agentes de separación, grupos protectores etc. se debe reducir o eliminar cuando sea posible. En caso de ser necesarios deben ser lo más benignos con el medio ambiente.
6. **Uso eficiente de la energía:** Los requerimientos energéticos deben clasificarse por su impacto ambiental y económico, reduciéndose todo lo posible la incidencia negativa en el medio ambiente y en los costos de producción. Se intentará llevar a cabo los métodos de síntesis a temperatura ambiente y presión atmosférica.
7. **Uso de sustancias, materias primas, renovables:** Las materias primas deben ser preferentemente renovables en lugar de no renovables siempre que desde el punto de vista técnico y económico sea posible.
8. **Evitar o Reducir los derivados químicos, por ejemplo, los grupos protectores:** La derivatización innecesaria debe ser reducida al mínimo o, si es posible, evitada ya que la formación de derivados requiere

reactivos y disolventes adicionales, por lo que se generan más residuos.

9. **Uso de catalizadores, catálisis:** Es preferible potenciar el uso de catalizadores lo más selectivos posibles en lugar de emplear reactivos en cantidades estequiométricas para aumentar la selectividad, disminuir la temperatura del proceso y aumentar la conversión a producto disminuyendo los residuos.
10. **Diseño de productos que se degraden fácilmente al final de su vida útil:** Los productos químicos se deben diseñar de modo que en el final de su vida útil no persistan en el medio ambiente y se degraden de forma controlada o sean inocuos.
11. **Análisis de procesos en tiempo real para disminuir la polución:** Se desarrollarán al máximo los procedimientos y metodologías analíticas que permitan monitorear y controlar en tiempo real, a fin de evitar la formación de sustancias potencialmente peligrosas.
12. **Minimizar los potenciales accidentes químicos:** Se elegirán las sustancias, incluyendo su estado de agregación, para la realización de los procesos químicos de forma que se minimicen los riesgos de accidentes, por ejemplo, explosiones, fuego, derrames.

Los 12 principios tienden a generar un cambio en la concepción de hacer química, ya que la calidad de vida alcanzada por el ser humano se debe, en gran medida, a la generación de nuevas sustancias químicas y a la síntesis de compuestos existentes en la naturaleza. Sin embargo, y después de los grandes avances producidos en el siglo XX, es necesario analizar y evaluar las consecuencias indeseadas sobre el ambiente. Es así que es necesario disminuir los efectos nocivos que provienen, en muchos casos, de la industria química. Como ejemplo de entidades que se abocaron a analizar la situación a fin de generar cambios que mejoraran la situación ambiental, enfocando directamente a la industria química, podemos nombrar a la EPA, en Estados Unidos, y al

Consorzio Interuniversitario "La Chimica per l'Ambiente", INCA (5), en Italia, entre varias otras.

La idea general sobre la que se debe trabajar queda expresada en la siguiente ecuación: $Riesgo = Peligro \cdot Exposición (R=P \cdot E)$ de la cual la variable a reducir es el Peligro, ya que tanto generar como trabajar, con sustancias peligrosas debe ser considerado un error de diseño ya sea en una síntesis o un proceso.

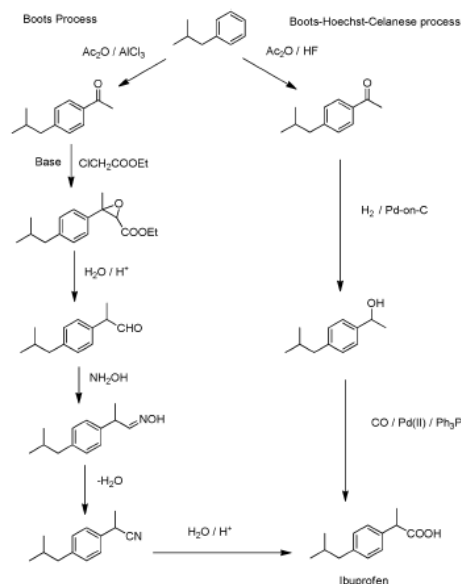
Por otra parte es importante cuantificar el cambio, y así poder decidir si las nuevas condiciones son más sustentables o sostenibles que las tradicionales. Desde la aparición del parámetro denominado Economía Atómica, AE por sus siglas en inglés, se han propuesto diversas medidas que intentan reflejar cuan "verdes" son las condiciones usadas en los procesos sintéticos alternativos. Algunos de estos parámetros son Atom Economy, AE(6); Reaction Mass Efficiency, RME; Carbon Efficiency, CE (7); Environmental Factor, E (8); entre otros. Además, la denominada "estrella verde" (GS, por sus siglas en inglés) cuantifica el aporte que se realiza sobre 10 de los 12 principios de la *Green Chemistry* (9).

Estrellas Verdes y métrica de masa en la síntesis oxalato de hierro (II) dihidratado (9)

Metric	GS1 Sulfuric acid, boiling temperature, 76% excess of oxalic acid	GS2 Ascorbic acid, boiling temperature, 76% excess of oxalic acid	GS3 Ascorbic acid, room temperature, 76% excess of oxalic acid	GS4 Ascorbic acid, room temperature, 4% excess of oxalic acid
GS				
GSAI	20.00	36.25	41.25	46.25
Yield %	92.0±1.9	93.6±0.3	96.1±0.2	87.5±1.2
E-factor	2.06±0.06	2.30±0.01	2.217±0.006	1.96±0.04
MI	3.06±0.06	3.30±0.01	3.217±0.006	2.96±0.04
AE	44.52	44.52	44.52	44.52
RME = AU	33.1±0.7	33.7±0.1	34.54±0.06	38.4±0.5
FeEE	92.0±1.9	93.6±0.3	96.1±0.2	87.5±1.2

* Number of experiments for every GS, N = 3
 MI - Mass intensity
 AE - Atom economy
 RME - Relative mass efficiency
 AU - Atom utilization
 FeEE - Iron element efficiency

Síntesis de ibuprofeno (10)



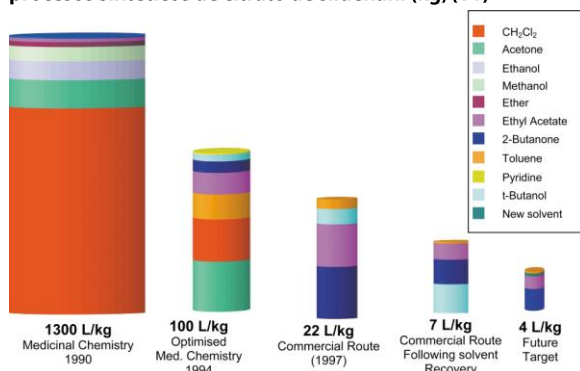
Ejemplos exitosos en la aplicación de los principios de sustentabilidad y sostenibilidad se pueden encontrar en la síntesis de ibuprofeno.

Este analgésico fue patentado en 1960 por Boots Pure Drug Company, y su proceso de síntesis consiste en seis etapas con reactantes en cantidades estequiométricas y con un AE=40%. En contraposición, y con un desarrollo sustentable, Boots Hoeschst-Celanese (BHC) mejoró el proceso a partir de 1992, comercializando ibuprofeno sintetizado en tres etapas catalíticas con un AE=77%. Este parámetro es solo un índice de la mejora ya que no nos detenemos a analizar los costos energéticos, complejidad de procesos de separación, materias primas, residuos y su disposición, etc.

Es así que, a este proceso sostenible se le otorgó, en 1996, el premio Presidential Green Chemistry Challenge en Estados Unidos.

También, la síntesis de citrato de sildenafil (Viagra™) ha tenido un desarrollo bajo estos conceptos y se pueden encontrar en la literatura análisis de las mejoras con un fuerte impacto en el ambiente dada la disminución de residuos generados (11).

Cantidad de residuos orgánicos (L) producidos por distintos procesos sintéticos de citrato de sildenafil (kg) (11)



Si bien el impacto ambiental de las grandes empresas es indiscutible, los conceptos y objetivos de la Química Verde pueden y deben ser aplicados en el día a día de los laboratorios de investigación, y no sólo en reacciones que lleven a la obtención de compuestos químicos novedosos sino pensando también en la mejora de síntesis conocidas de compuestos ya descritos (12).

Resumiendo, si el desafío es mantener e incrementar la calidad de vida, y esto debe estar acompañado por la minimización de los efectos nocivos para la salud humana y para el ambiente, una posible solución es la Química Verde. Y es así ya que, esta forma de encarar la química y sus procesos, provee los mecanismos necesarios para alcanzar los objetivos propuestos. Como expresó *Ronald Breslow*, "... la química es la ciencia que introduce nuevas sustancias en el mundo y somos responsables de su impacto en él."

Referencias bibliográficas

(1) www.rae.es
 (2) United States Environmental Protection Agency, U.S. EPA. www.epa.gov/greenchemistry/pubs
 (3) "Green chemistry consists of chemicals and chemical processes designed to reduce or eliminate negative environmental impacts. The use and production of these chemicals may involve reduced waste products, non-toxic components, and improved efficiency. Green chemistry is a highly effective approach to pollution prevention because it applies innovative scientific solutions to real-world environmental situations"
 (4) Anastas, P.T.; Wagner, J.C. Green Chemistry: Theory and Practice. New York (USA): Oxford University Press; 1998.
 (5) <http://www.incaweb.org/>
 (6) Trost, B. M. The atom economy - a search for synthetic efficiency. *Science* (1991) 254:1471-1477.
 (7) Constable, D.J.C.; Curzons, A.D.; Cunningham, V.L. Metrics to "green" chemistry - which are the best? *Green Chem.* (2002) 4: 521-527.

(8) Sheldon, R. A. Consider the environmental quotient. *ChemTech* (1994) 24: 38-47.
 (9) Ribeiro, M.G.T.C.; Costa, D.A.; Machado, A.A.S.C. "Green Star": a holistic Green Chemistry metric for evaluation of teaching laboratory experiments. *Green Chem. Lett. Rev.* (2010) 3: 149-159.
 (10) Sheldon, R. A. Fundamentals of green chemistry: efficiency in reaction design. *Chem. Soc. Rev.* (2012) 41: 1437-1451.
 (11) Dunn, P.J.; Galván, S.; Hettenbach, K. The development of an environmentally benign synthesis of sildenafil citrate (Viagra™) and its assessment by Green Chemistry metrics. *Green Chem.* (2004) 6: 43-48.
 (12) a) Rossi, L.I.; Velasco, M.I. Alternatives to free molecular halogens as chemoselective reactants: Catalysis of organic reactions with reusable complexes of halogen metal salts. *Pure Appl. Chem.* (2012) 84: 819-826. b) Velasco, M.I.; Kinen, C.O.; Hoyos de Rossi, R.; Rossi, L.I. A green alternative to synthesize azo compounds. *Dyes Pigm.* (2011) 90: 259-264. c) Kinen, C.O.; Rossi, L.I.; Hoyos de Rossi, R. The development of an environmentally benign sulfide oxidation procedure and its assessment by green chemistry metrics. *Green Chem.* (2009) 11: 223-228.