



Química Verde

Reinaldo Camino Bazito

bazito@iq.usp.br



Grupo de Pesquisa em Química Verde e Ambiental



Tópicos

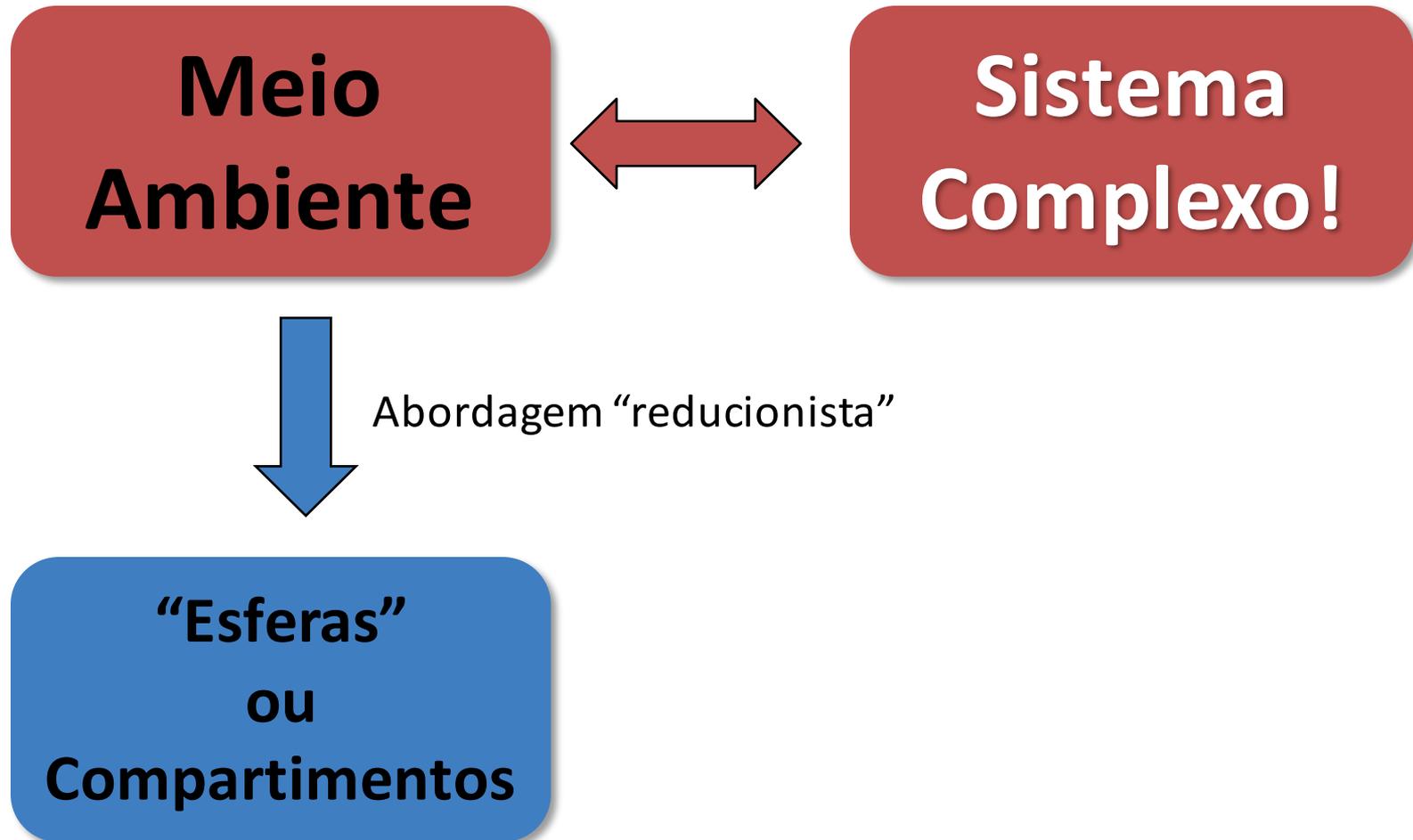
- Influência humana sobre o meio ambiente
- Os 12 princípios da Química Verde
- A Química Verde no Brasil



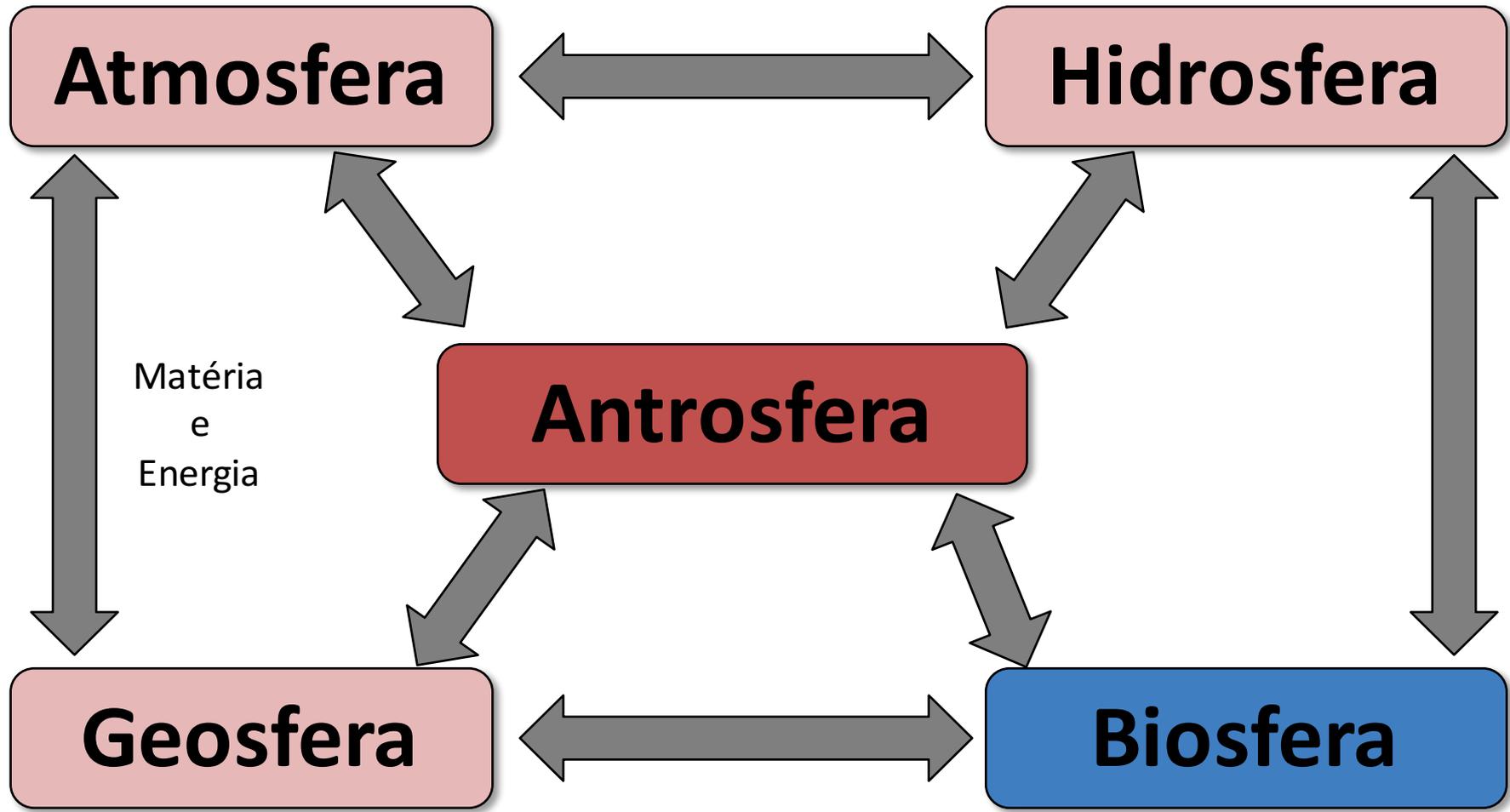
Influência humana sobre o meio ambiente



Meio Ambiente



Esferas ou Compartimentos



Percepção da Influência Humana

Industrialização



**Efeitos sobre
habitat e saúde**



**Preocupação
Ambiental**



<http://www.nickelinthemachine.com/wordpress/wp-content/uploads/smog-e.jpg>

- 1952: Grande Smog de Londres
- 1956: Clean Air Act (UK)



Química Ambiental



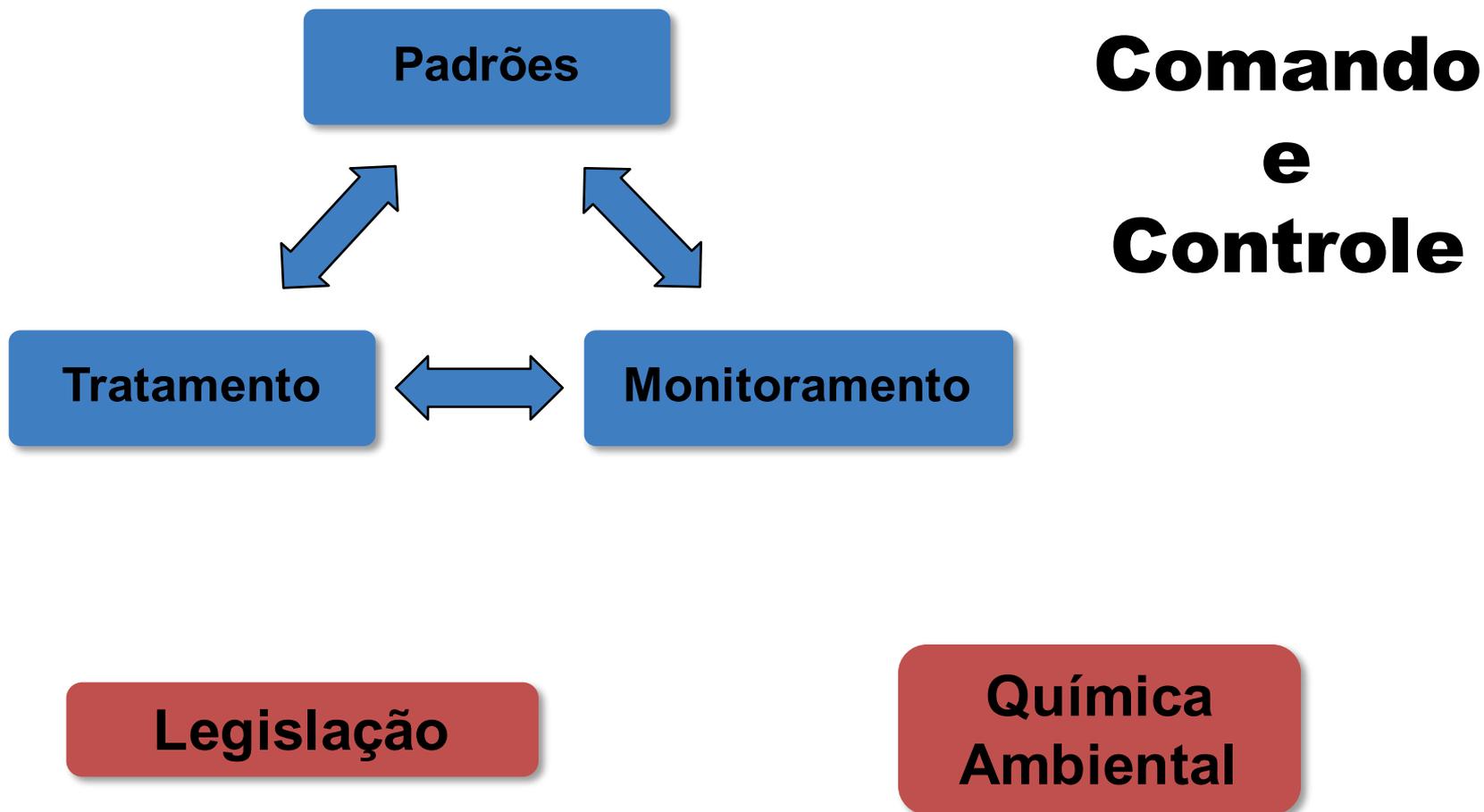
“Química do Meio Ambiente”:

Observa, mede, entende e prevê

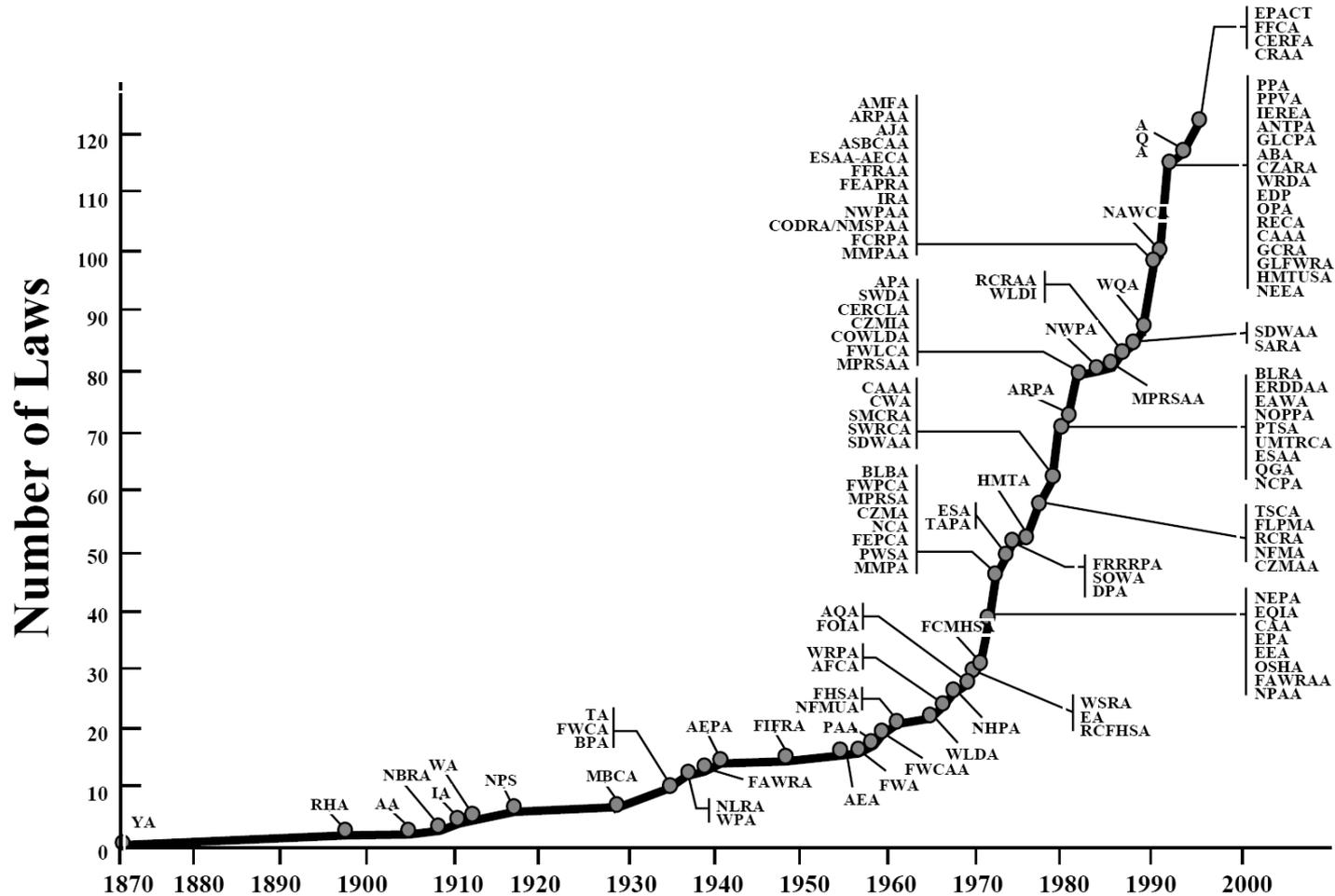


Como lidar com a Poluição?

Poluentes: Abordagem Tradicional



Legislação Ambiental - EUA



J.C. Warner - Proceedings of the OECD Workshop on Sustainable Chemistry (1998)



Comando e Controle

Custo crescente!

Necessidade de uma nova visão!



Desenvolvimento Sustentável!

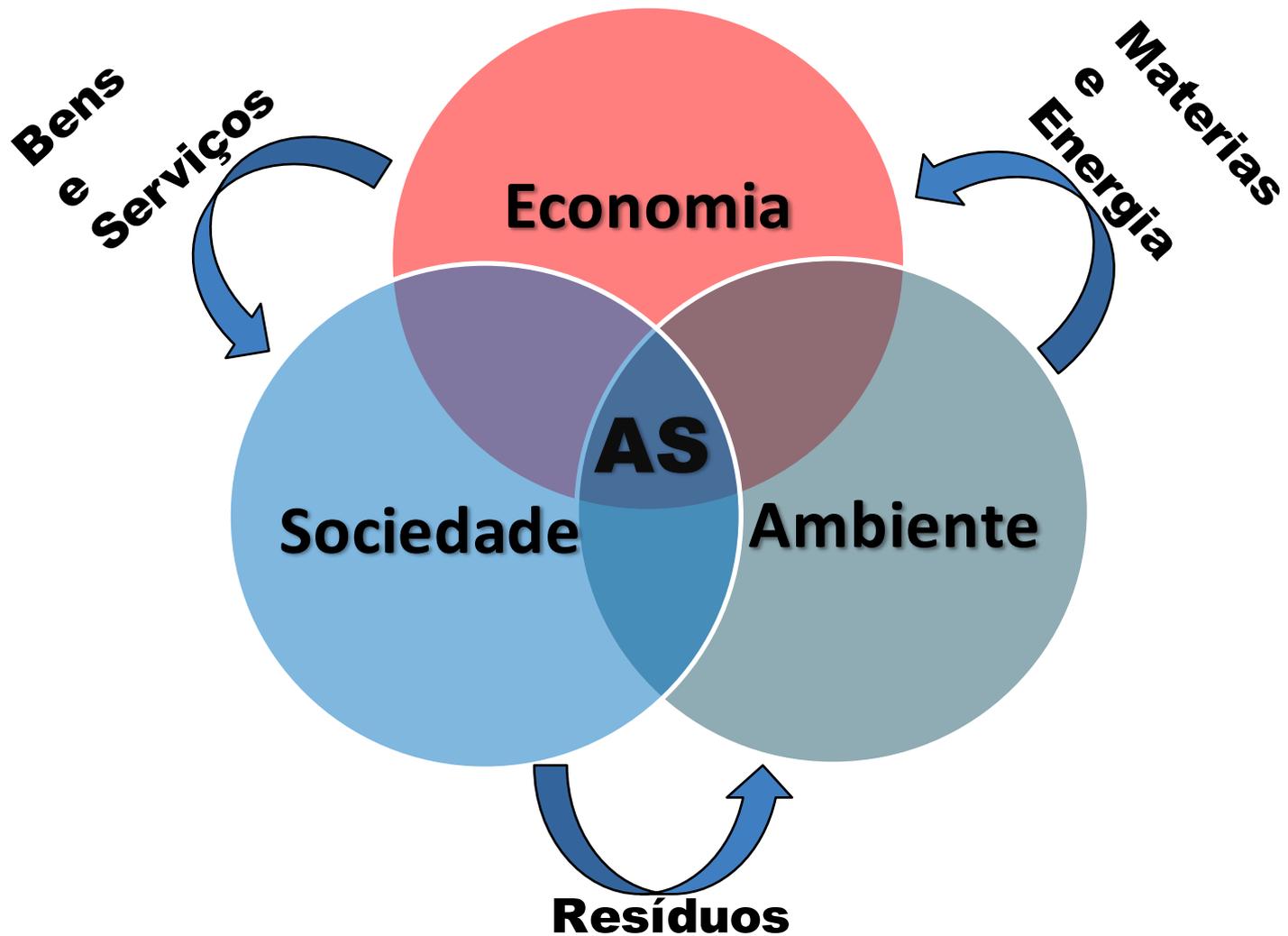


Desenvolvimento Sustentável

Supre as necessidades do presente
sem comprometer a habilidade das gerações futuras
de suprir suas próprias necessidades

United Nations World Commission on Environment and Development, *Our Common Future*; UN: Oslo, 1987 - Brundtland Report

Desenvolvimento Sustentável





O desenvolvimento pode ser sustentável?

Há limite para uso dos recursos naturais?



Recursos Naturais são Limitados!

- **Reservas minerais;**
- **Área cultivável ;**
- **Água doce;**
- **Energia;**
- **Outros recursos ...**

Não há desenvolvimento realmente sustentável!



O que fazer?

Reduzir o impacto!



Química Verde

Química Sustentável

Química Limpa

Química Benigna

Química Ecoeficiente



Química Verde

“A invenção, desenvolvimento e aplicação de produtos e processos químicos para reduzir ou eliminar o uso e a geração de substâncias perigosas”

Termo proposto na década de 90 por Paul Anastas (US-EPA)



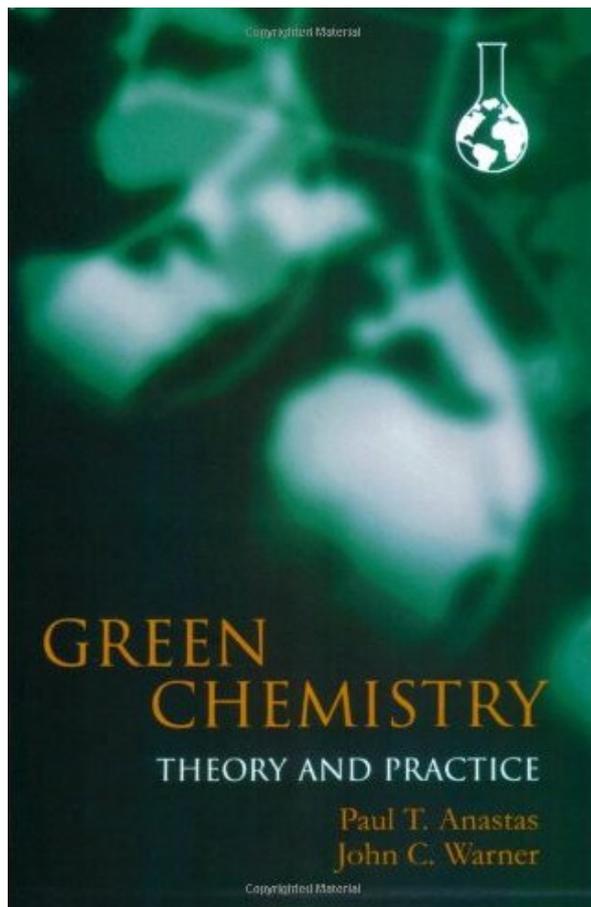
http://en.wikipedia.org/wiki/File:Paul_Anastas_files/shapeimage_2.jpg



http://www.learngreenchemistry.com/John_W



12 Princípios da Química Verde



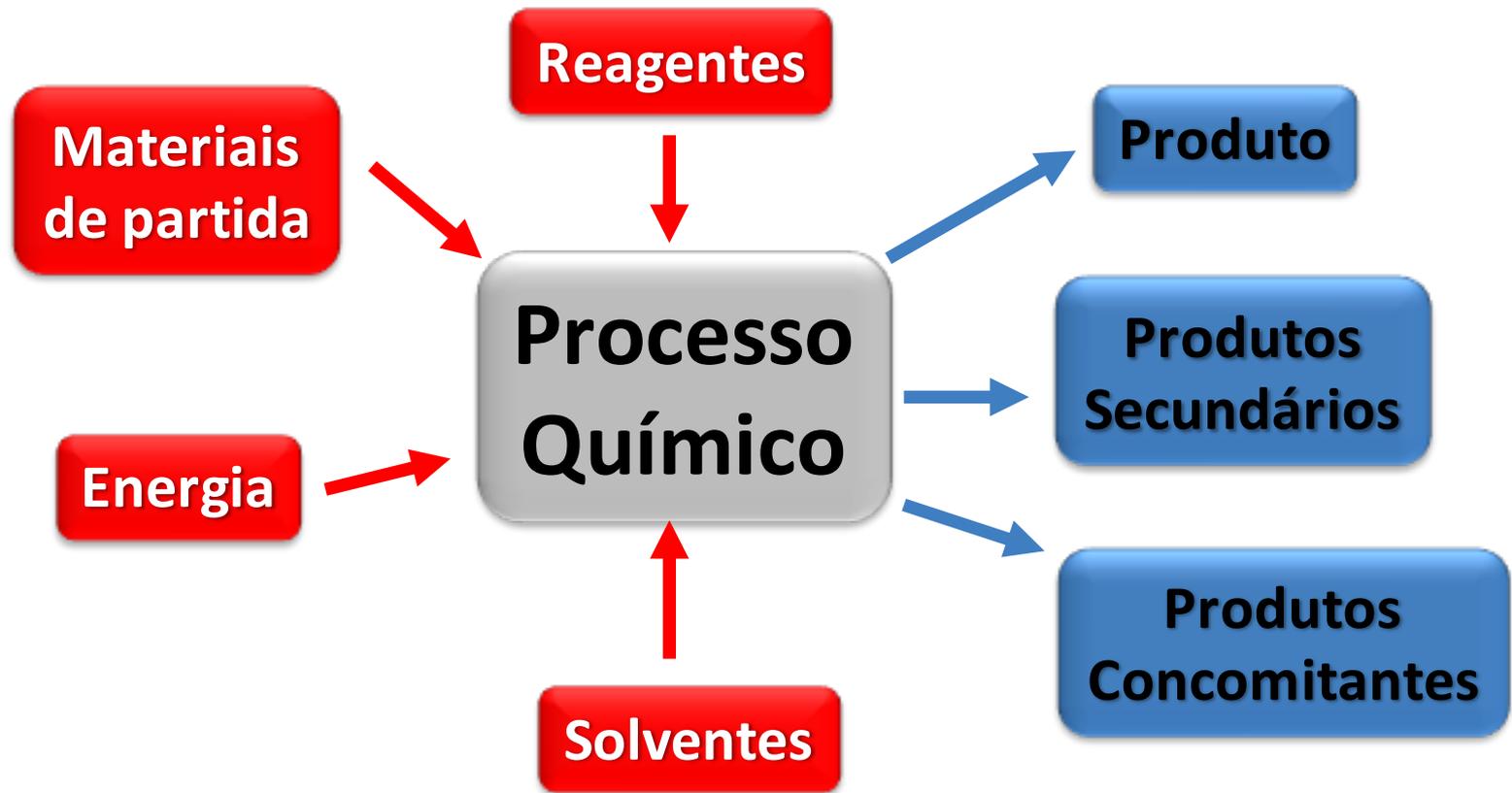
Paul T. Anastas
&
John C. Warner

Green Chemistry: Theory and Practice
Oxford University Press: New York, **1998**

Linhas gerais de atuação sobre um processo ou produto para torná-lo menos impactante ao meio ambiente.



Processos Químicos





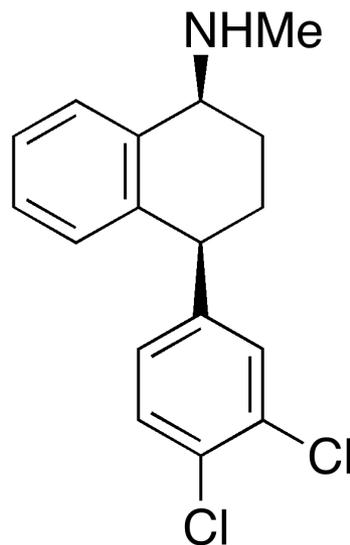
1º Princípio: Prevenção de Poluição

É melhor evitar resíduos que tratá-los ou limpá-los após sua formação.



1. Prevenção da formação de resíduos

- Produção da Sertralina (princípio ativo do antidepressivo Zoloft[®] da Pfizer)

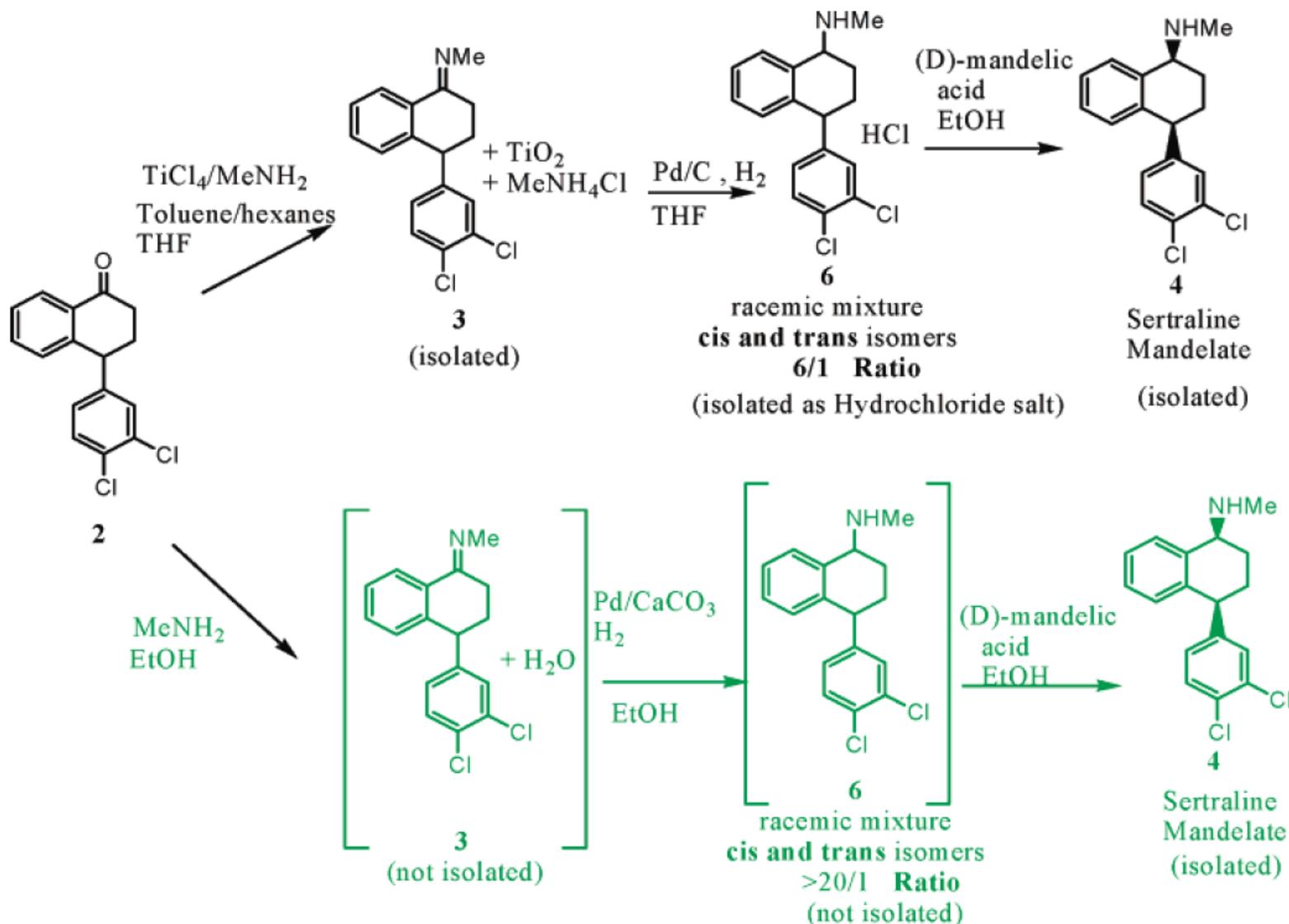


Sertralina

(1S,4S)-4-(3,4-diclorofenil)-N-metil-
1,2,3,4-tetraidronaftaleno-1-amina

US 2002 Greener Synthetic Pathways Award

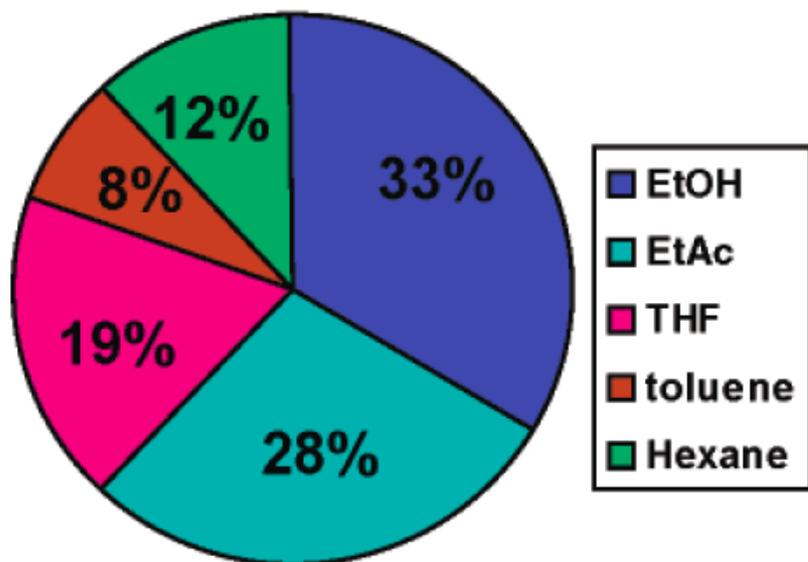
1. Prevenção da formação de resíduos





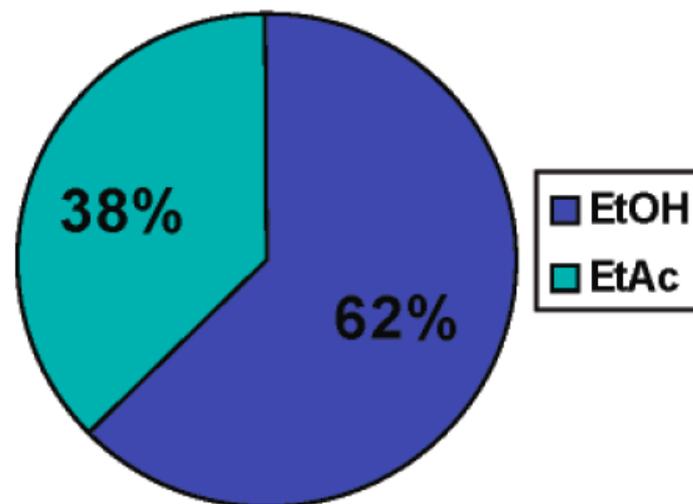
1. Prevenção da formação de resíduos

Sertraline Hydrochloride First Commercial Route



•EtOH	34,000 L
•EtAc	28,400 L
•THF	19,000 L
•Toluene	8,000 L
•Hexane	12,000 L
Total	101,400 L

Sertraline Hydrochloride New Route



•EtOH	15,000 L
•EtAc	9,000 L
Total	24,000 L

L/ton cloreto de sertralina



1. Prevenção da formação de resíduos

Como quantificar?

Fator E = Quantidade Resíduo (kg)/Produto (kg)

	Produção	Fator E
Commodities	10^4 - 10^6	<1 - 5
Química fina	10^2 - 10^4	5 - >50
Indústria Farmacêutica	10 - 10^3	25 - >100



R.A. Sheldon, *Chem & Ind*, 1997,12



1. Prevenção da formação de resíduos

Qual combustível é menos poluente:

Hidrogênio ou gasolina?

Diesel ou Biodiesel?



Avaliação de Ciclo de Vida

(Life Cycle Analysis ou Life Cycle Assessment)

LCA

“Metodologia para avaliar o impacto ambiental de uma determinada atividade, por toda a vida útil do produto gerado”



2º Princípio: Economia de Átomos

Métodos sintéticos devem ser projetados para maximizar a incorporação no produto final de todos os materiais usados no processo



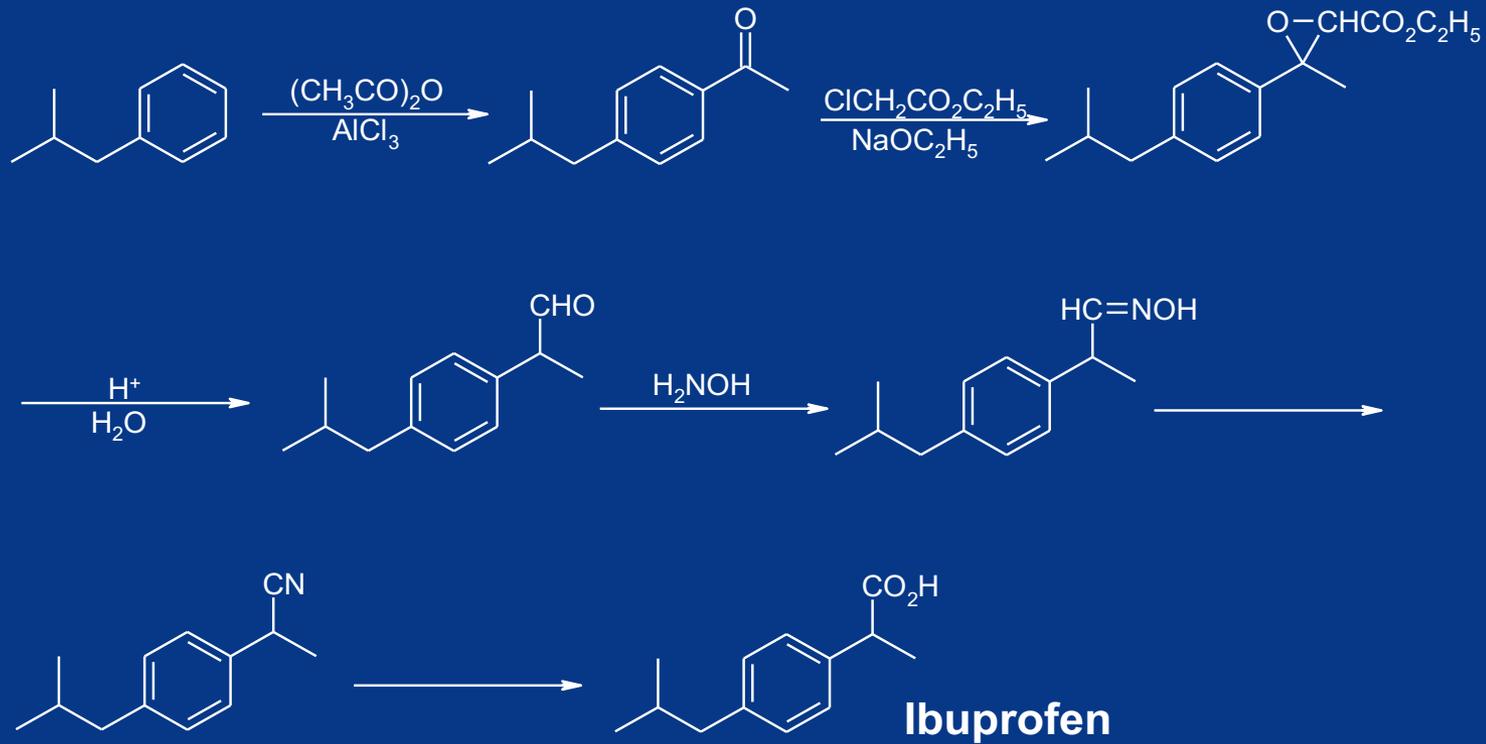
2º Princípio: Economia de Átomos



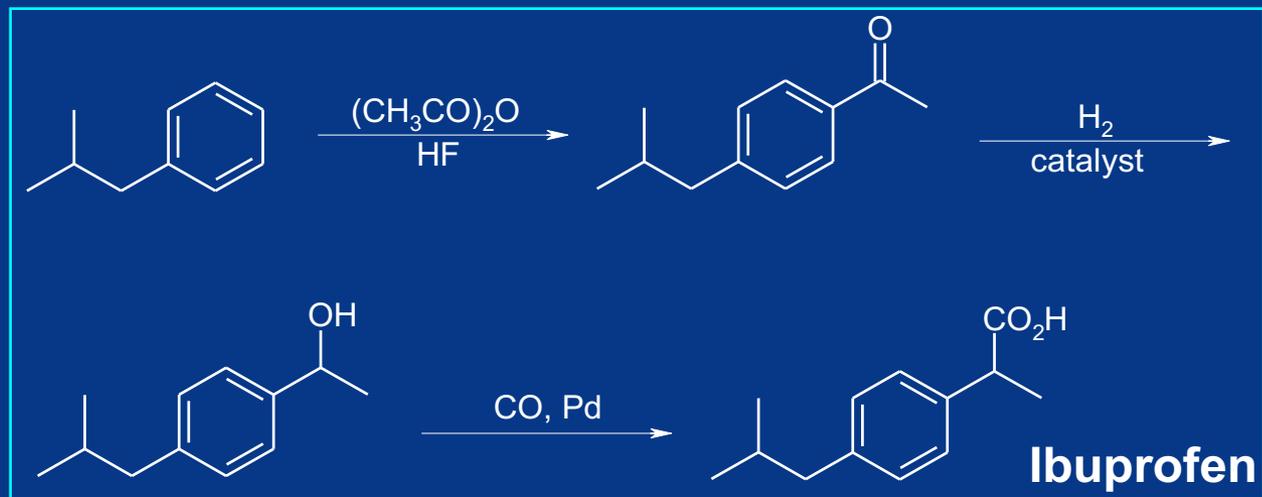
- Barry Trost

<http://www.stanford.edu/group/bmtrost/bmtcv.html>

Tradicional
40%



Verde
99%





2º Princípio: Economia de Átomos

Fração de átomos incorporados ao produto final

$$\% \text{ Economia Atômica} = \frac{\text{MM átomos usados}}{\text{FM de todos os reagentes}}$$



2º Princípio: Economia de Átomos

Ineficientes

- Eliminação;
- Substituição;
- Grignard;
- Wittig, etc

Eficientes

- Adição (incluindo Diels-Alder);
- Rearranjos;



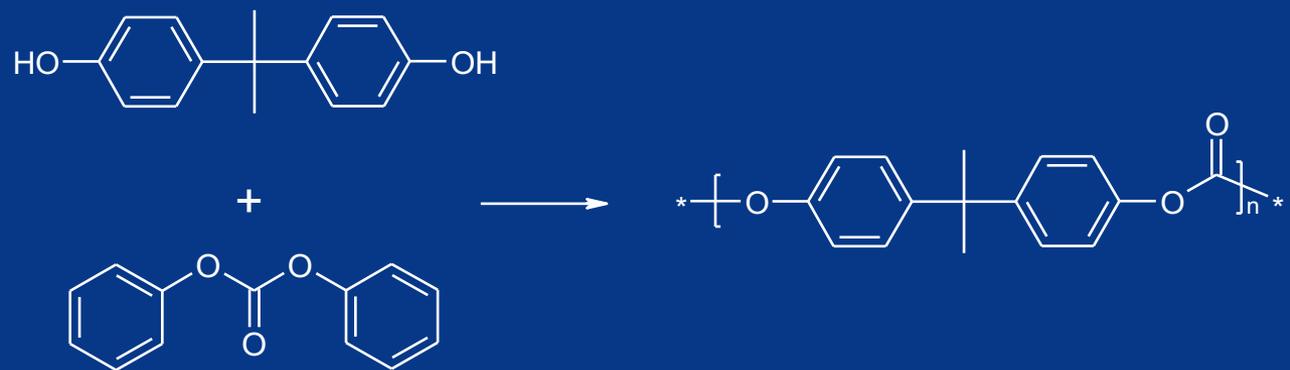
3º Princípio: Síntese mais segura

Sempre que possível, as metodologias sintéticas devem ser projetadas para usar e/ou gerar substâncias que possuam pouca ou nenhuma toxicidade ao ser humano ou ao ambiente.

Policarbonato Tradicional



Policarbonato Verde (sem fosgênio)

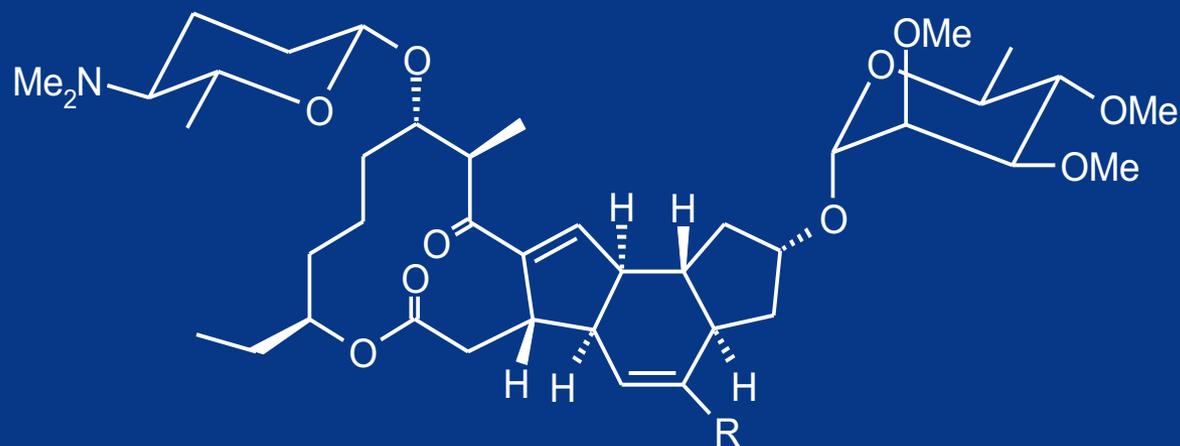




4º Princípio: Projeto de Produtos mais Seguros

Produtos químicos devem ser projetados para preservar sua eficácia mas reduzindo sua toxicidade

Inseticida Natural (*Saccharopolyspora spinosa*)



Spinosyn A: R = H

Spinosyn D: R = CH₃

“Spinosad” (Dow AgroSciences)



5º Princípio: Solventes e Auxiliares mais Seguros

O uso de substâncias auxiliares (solventes, agentes de separação, etc) deve ser eliminado sempre que possível e, quando usados, devem ser inócuos.



5º Princípio: Solventes e Auxiliares mais Seguros

- Sem solvente;
- Água;
- CO₂ supercrítico.



6º Princípio: Projeto para Eficiência Energética

Deve-se reconhecer os impactos ambientais e econômicos dos requisitos energéticos de processos químicos e estes devem ser minimizados. Métodos sintéticos devem ser conduzidos a temperatura e pressão ambientes, se possível.



7º Princípio: Uso de Matérias-Primas Renováveis

Matérias-primas devem ser renováveis sempre que técnica e economicamente factível.



Ácido Adípico Verde:



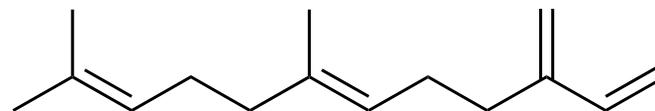


7º Princípio: Uso de Matérias-Primas Renováveis

Sempre que possível, matérias-primas obtidas de fontes renováveis devem ser utilizadas



7º Princípio: Uso de Matérias-Primas Renováveis



trans-β-Farneseno

(*E*)-7,11-dimethyl-3-methylenedodeca-1,6,10-triene
Biofene® (trans-β-farneseno) = isoprenóide
(sesquiterpeno) obtido por fermentação de
caldo de cana com organismos
“engenheirados” (biologia sintética)



Various (C10)

Isoprene (C5)

Muconic Acid (C6)

Fuels

Lubricants

Home &
Personal Care

Polymers &
Plastic Additives

Flavors &
Fragrances

Cosmetics

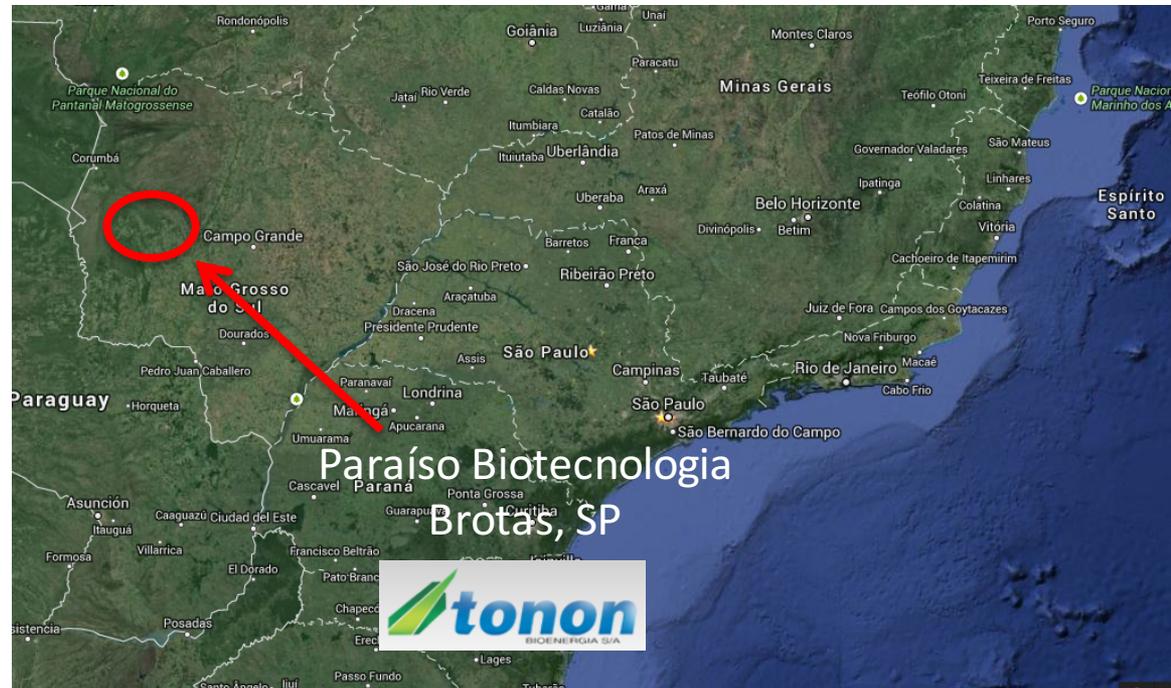




7º Princípio: Uso de Matérias-Primas Renováveis



- Decatur/Illinois (EUA)
- Brotas/SP (Brasil)





7º Princípio: Uso de Matérias-Primas Renováveis

- Biofene[®] (trans- β -farneseno) = isoprenóide (sesquiterpeno) – obtido por fermentação de caldo de cana com organismos “engenheirados” (biologia sintética)
- Decatur/Illinois (Tate & Lyle) Piracicaba/SP (Biomin do Brasil) Pradópolis/SP (Usina São Martinho/Paraíso Bioenergia) – objetivo 50 milhões de L/Ano – começa em 2013



7º Princípio: Uso de Matérias-Primas Renováveis



- Isobutanol – biologia sintética/levedura – fermentação de milho
- Luverne, MN (EUA)
- 22MGPY etanol / 18 MGPY isobutanol



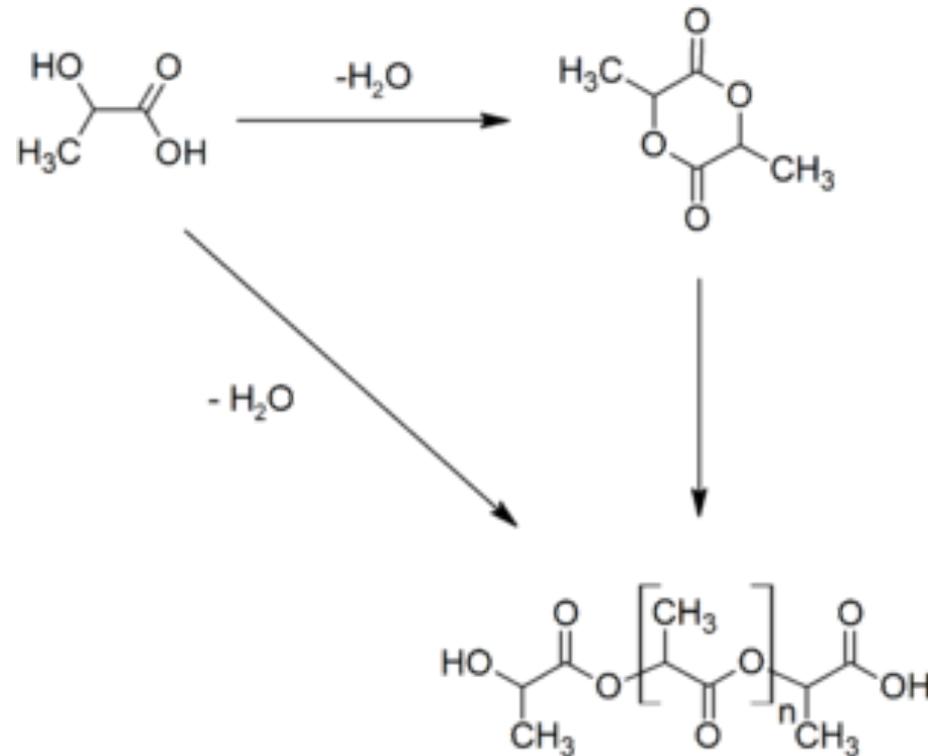
7º Princípio: Uso de Matérias-Primas Renováveis

ZeaChem

- Biorrefinaria
- Ácido acético/acetato de etila – fermentação de açúcares obtidos de celulose (pópulus) – processo acetogênico (organismo acetogênico) que não gera CO₂
- Etanol por hidrogenação (usando hidrogênio obtido da gaseificação da lignina – gás de síntese).



7º Princípio: Uso de Matérias-Primas Renováveis

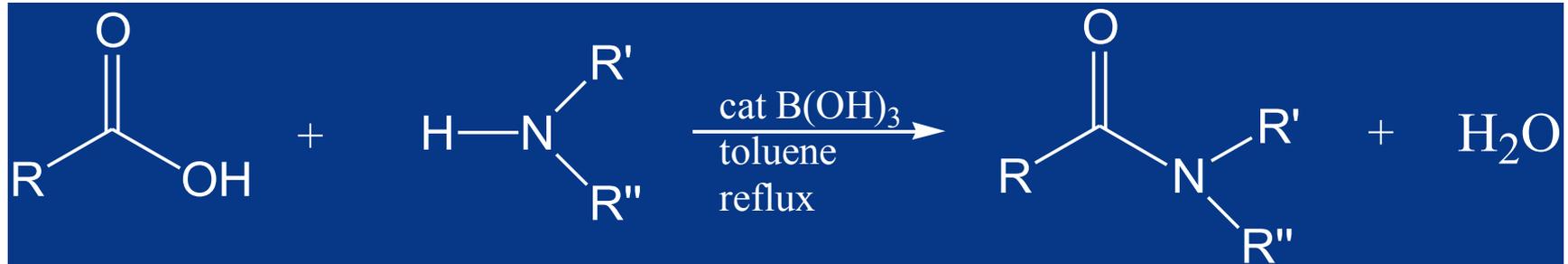


- Polilactato (Ingeo®)
- 150.000 ton/ano
- Fermentação caldo de milho
- Dextrose = ácido láctico = lactato = polímero



8º Princípio: Redução de Derivados

Derivatização desnecessária (uso de grupos bloqueadores, proteção/desproteção, modificação temporária de processos físicos/químicos) deve ser minimizada ou evitada se possível, porque essas etapas demandam reagentes adicionais e geram resíduos



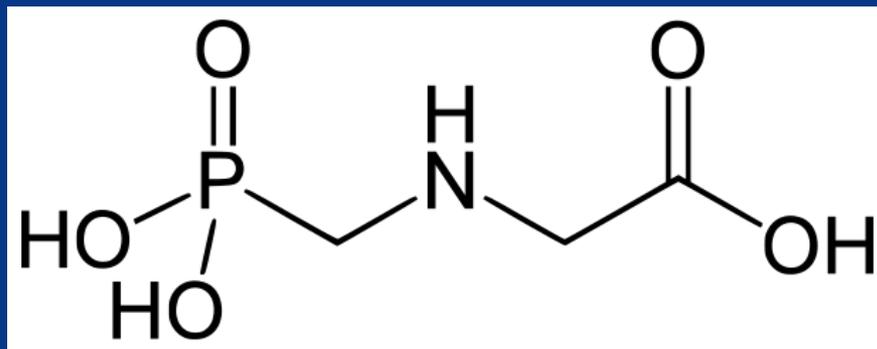


9º Princípio: Catálise

Reagentes catalíticos (tão seletivos quanto possível) são superiores a reagentes estequiométricos



Monsanto





10º Princípio: Projeto para Degradação

Produtos químicos devem ser projetados para que, ao final de sua vida útil, se degradem em produtos inócuos e não persistam no ambiente.



11º Princípio: Análise em tempo real para prevenção de poluição

Metodologias analíticas precisam ser desenvolvidas de modo a permitir monitoramento e controle de processos em tempo real, antes da formação de substâncias perigosas.



12º Princípio: Química Inerentemente mais Segura para prevenção de acidentes

Substâncias e a forma de uma substância usados em um processo químico devem ser escolhidos de modo a minimizar o potencial para acidentes químicos, incluindo derramamentos, explosões e incêndios.



Química Verde



“Química para o Meio Ambiente”:
busca a melhoria constante



A Química Verde no Brasil



Química Verde no Brasil

Universidade

- Educação
- Pesquisa

Lattes = 220 doutores

Perfil Industrial

Pouco Desenvolvida

Incentivo (\$)

FNMA : R\$ 20 milhões/ano

Legislação Ambiental

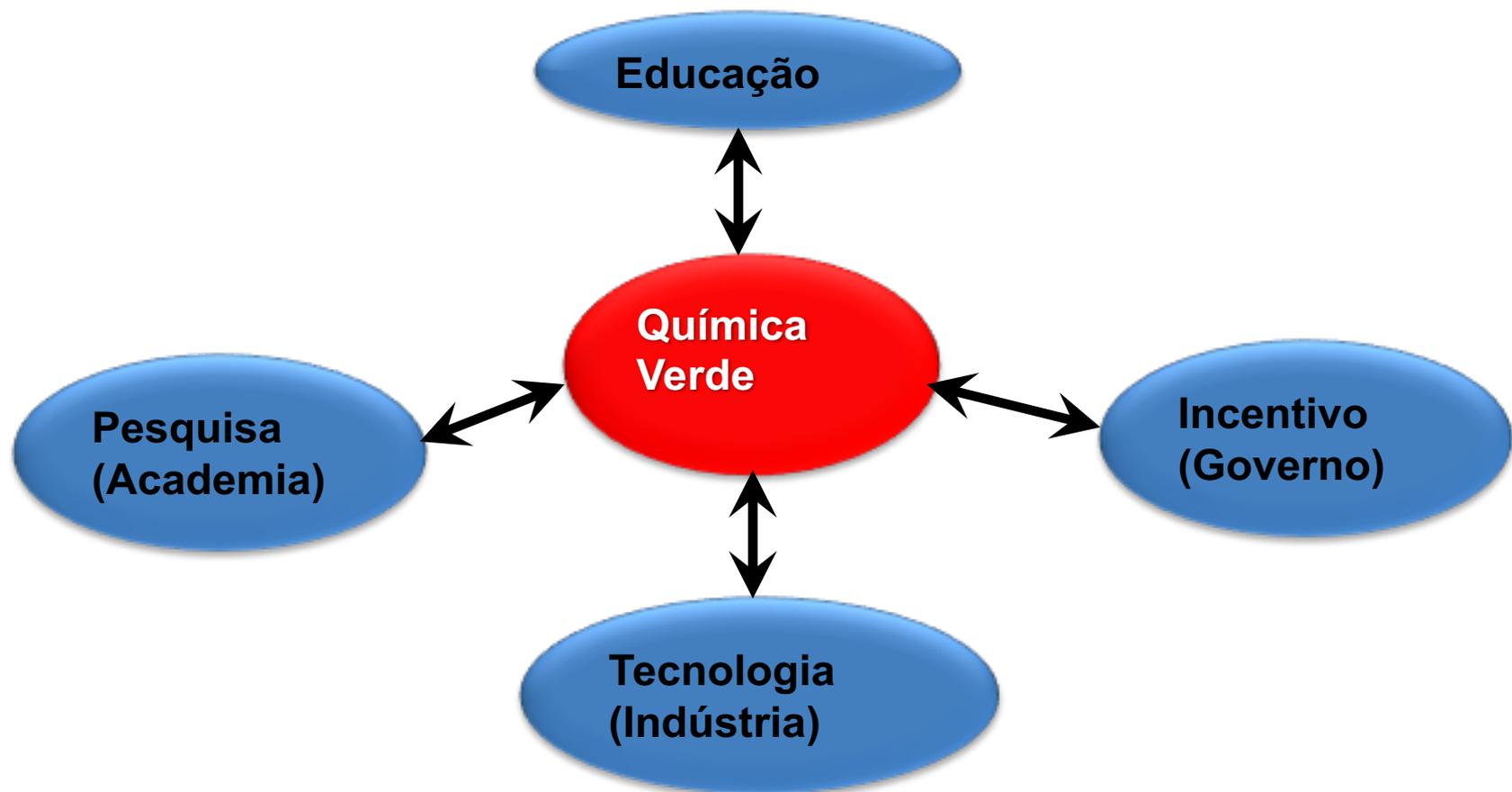
- 1981: Política Nacional Meio Ambiente
 - 1989: IBAMA e FNMA
 - 1998: Crimes Ambientais

?

R\$ 1,2 bilhões em multas não-pagas



Como desenvolver a Química Verde?





Educação



Mudança no modo de pensar

**Química
Verde**



“Filosofia”
Novo modo de pensar

Desafios:

- **Divulgação/Ensino**
- **Aceitação**
- **Aplicação!**



Divulgação e Ensino

- escolas de verão, minicursos, etc;
- cursos regulares na graduação e pós-graduação;
- permeação nas demais disciplinas (lab);
- ensino médio/fundamental



Aceitação e Aplicação

- atividades de pesquisa;
- empresas (via aluno egresso);
- pesquisa específica na área.



O Químico e o Meio Ambiente:

Visão Tradicional (comando/controlado)

- Química Analítica;
- Físico-Química;
- Noções C. Ambientais

Visão Verde (prevenção poluição)

- Química Orgânica
- Química Inorgânica;
- Ciência dos Materiais
- Ciências Ambientais
- Tecnologia



Indústria

Iniciativas no Brasil - Indústria



Atuação Responsável

Teclim – Rede de Tecnologias Limpas

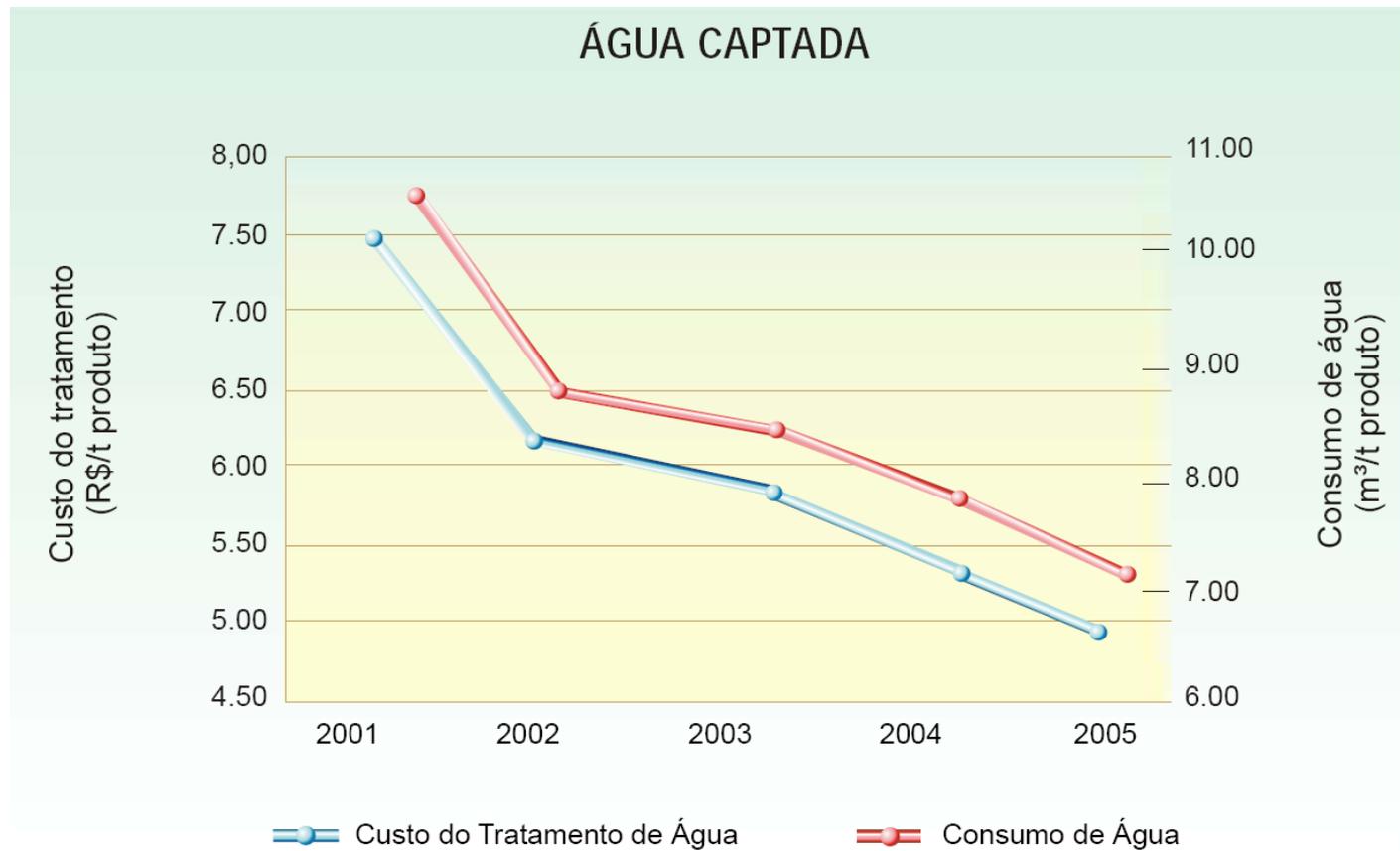


CEBDS

Conselho Empresarial Brasileiro
para o Desenvolvimento Sustentável



Uso Racional de Água

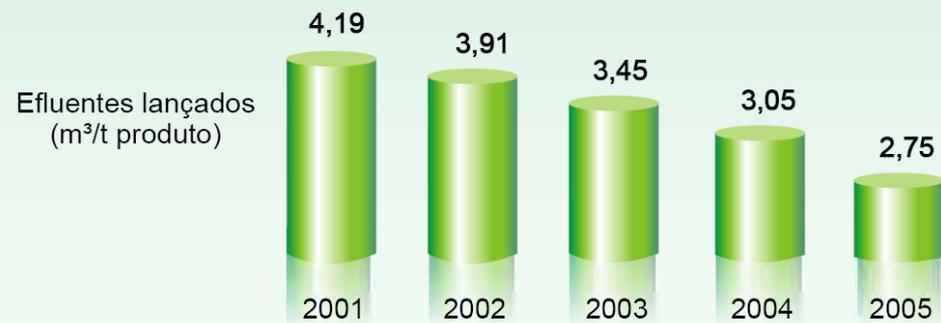


ABIQUIM (2006)



Redução Efluentes

VOLUME DE EFLUENTES LANÇADOS



GERAÇÃO DE RESÍDUOS PERIGOSOS E NÃO-PERIGOSOS

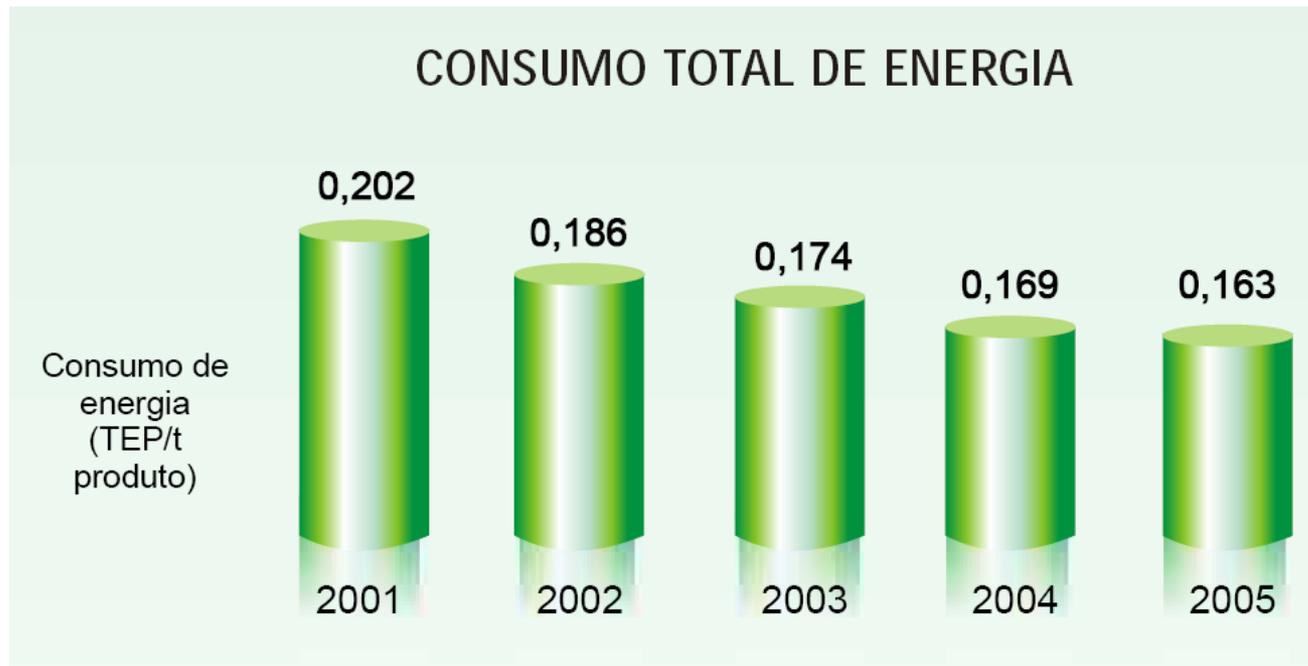


EMISSÃO DE DIÓXIDO DE CARBONO





Energia





Academia



Iniciativas no Brasil - Academia

220 doutores no Lattes

Diversos grupos em universidades e centros de pesquisa, atuando em:

- Catálise e Biocatálise;
- Solventes Alternativos;
- Materiais Renováveis;
- Processos;
- Análise de ciclo de vida.



Onde aprender e/ou trabalhar com a Química Verde

- Área de pesquisa que te agradar;
- Ensino;
- Empresas.