

## ATIVIDADE 2

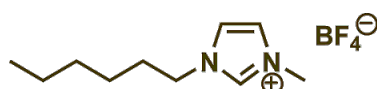
QFL1606- Química Ambiental III - 2023

Data de entrega: 03/10/2023

Nome:

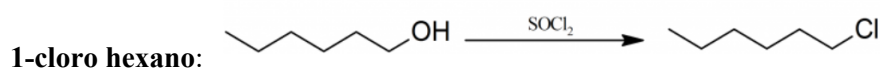
n°USP:

As métricas de química verde podem ser usadas para a tomada de decisões. Uma indústria química pretende produzir um líquido iônico denominado tetrafluoroborato de 1-hexil-3-metil-imidazol.

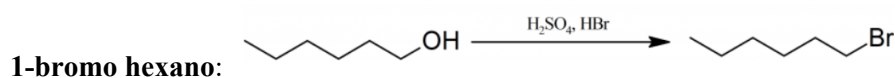


Em seu laboratório de desenvolvimento, serão testadas duas rotas sintéticas distintas que partem do 1-metil-imidazol e empregam diferentes halogenetos de alquila. A Rota 1 emprega o 1-cloro-hexano e a Rota 2 emprega do 1-bromo-hexano. Cada rota sintética desse líquido iônico ocorre em três etapas: Etapa 1 – preparação do halogeneto de alquila, Etapa 2 – Reação de alquilação e Etapa 3 – Reação de troca do contraíon. Monte as duas rotas sintéticas com os dados fornecidos abaixo.

Considere os dados para a síntese dos halogenetos de alquila (**Etapa 1**):

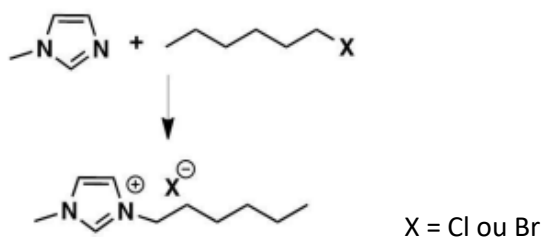


1,5 mol de cloreto de tionila ( $\text{SOCl}_2$ ) é colocado em um balão de fundo redondo. Adiciona-se gota-a-gota 0,5 mol de hexanol, sob agitação durante 2 h. Deixa a mistura em refluxo por mais 2 h. Ao final, destila-se para eliminar o excesso de cloreto de tionila. O produto obtido é lavado com 200 mL de água destilada. O rendimento final é 65%.



Num sistema de resfriamento, trata-se 1 mol de hexanol com 0,5 mol de ácido sulfúrico concentrado (98%), e depois 1,25 mol de ácido bromídrico (48%). A mistura obtida é aquecida por 6 h, sob refluxo. Em seguida, faz-se destilação a vapor e o 1-bromo hexano é separado em funil de separação empregando-se 2 x 20 mL de ácido sulfúrico concentrado a frio e em seguida lavando-se o produto final com 200 mL de água destilada. O rendimento final é de 80%.

Considere os dados para a reação de alquilação do 1-metil-imidazol (**Etapa 2**) empregando-se os dois haletos de alquila distintos, conforme a equação abaixo. OBS.



Em balão de fundo redondo, adiciona-se 1 mol do halogeneto de alquila preparado na Etapa 1 e 1,1 mol do 1-metil-imidazol em 150 mL de acetonitrila. Mantém-se o sistema em refluxo, a 60°C por 60 horas. Evapora-se o solvente e o produto final é lavado com 3 x 200mL de éter etílico, e seco a 40°C. O rendimento é de 75%.

Considere os dados para a reação de troca de contraíon (**Etapa 3**) que pode empregar os dois sais obtidos na Etapa 2 para chegar ao produto desejado, o líquido iônico tetrafluoroborato de 1-hexil-3-metil-imidazolio. A reação envolve misturar cloreto ou brometo de hexil-metil-imidazólio (1 mol) com tetrafluoroborato de sódio (1,1 mol) em 200 mL de água, mantendo a agitação por 30 min. A fase aquosa foi removida por decantação e diclorometano (600 mL) foi adicionado ao sistema para facilitar a separação de fases. A fase orgânica foi secada com carbonato de sódio (100 g) e filtrada em coluna de alumina e celite (gasto de material aproximado de 1000 g, podendo ser regenerado). O solvente foi removido sob vácuo resultando no produto com rendimento de 80%.

Informações sobre reagentes:

| REAGENTES   |               | 1-metil-imidazol | 1-cloro-hexano (X = Cl) | 1-bromo-hexano (X = Br) |      |
|---|---------------|------------------|-------------------------|-------------------------|------|
| <b>Efeitos Toxicológicos / Ambientais</b>                         |               |                  |                         |                         |      |
| Toxicidade para humanos   |               | □                | ●                       | □                       |      |
| Toxicidade para organismos aquáticos                              |               | ●                | □                       | ○                       |      |
| Persistência no ambiente  |               | ◆                | ●                       | ◆                       |      |
| Bioacumulação   |               | ★                | ○                       | ○                       |      |
| <b>Avaliação qualitativa relativa entre todas as substâncias:</b> |               |                  |                         |                         |      |
| ★   | Baixo         | □                | Médio                   | ◆                       | Alto |
| ●   | Baixo a Médio | ○                | Médio a Alto            |                         |      |

Dados:

1-metil-imidazol: 82,1 g/mol

1-cloro hexano: 120,6 g/mol

Hexanol: 102,0 g/mol

Cloreto de Tionila: 119,0 g/mol

Ácido Sulfúrico: 98,0 g/mol; d = 1,83 g/mL

Ácido Bromídrico: 80,9 g/mol; d = 1,49 g/mL

Acetonitrila: 41g/mol; d = 0,786 g/mL

Éter etílico: 74,1 g/mol; d = 0,713 g/mL

Tetrafluoroborato de sódio: 109,8 g/mol

Diclorometano: d = 1,33 g/mL

Responda apresentando todos os cálculos:

a) (peso 8,0) Considerando as informações dadas desenhe as duas rotas de síntese do líquido iônico tetrafluoroborato de 1-hexil-3-metil-imidazolio e calcule o Fator E ou a Intensidade Mássica para as duas rotas. Apresente os cálculos (Sugestão: fazer o fluxograma de processo para produzir 1 kg do produto final. Atenção: uniformizar as quantidades entre as etapas de síntese). Indique qual delas (Rota 1 que emprega o 1-cloro-hexano ou a Rota 2 que emprega do 1-bromo-hexano) você recomendaria para a produção. Justifique considerando valores encontrados e as definições das métricas utilizadas.

b) (peso 2,0) Considerando os efeitos tóxico-ambientais apresentados no quadro de informações sobre os reagentes, indique se você recomendaria para a produção a mesma rota escolhida na questão (a) ou se consideraria mudar de opinião. Explique.