



Evaluación del grado de verdor de la Síntesis del Complejo $\text{CuCl}_2(\text{DMSO})_2$ a Escala Micro Empleando la Métrica Escala Verde

Evaluation of the Greenness of the Complex $\text{CuCl}_2(\text{DMSO})_2$ Synthesis to Micro Scale Using the Green Scale Metric

Guillermo Garzón García¹., Juan Guillermo Morales G¹., Luis Alfredo Lopez L²

1-Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia.

2-Smurfit Kappa

Resumen

Los objetivos básicos de la Química Verde se fundamentan en los 12 principios formulados por Anastas. En diversos trabajos de investigación se sostiene que las reacciones y los procesos estudiados son verdes, sin demostrar qué tanto cumplen con los planteamientos de la Química Verde. Por ello, con el fin de contribuir a un cambio cultural y educativo que acerque la química a la búsqueda diaria de la sostenibilidad, en esta investigación se emplea una métrica conocida como Escala Verde, de acuerdo a la metodología sugerida por el profesor René Miranda. Esta métrica sirve para analizar de forma crítica y bajo el protocolo de la Química Verde, desarrollos experimentales, tanto de publicaciones en revistas, como de prácticas de laboratorio, estableciendo criterios para determinar qué tan verde es un experimento o proceso químico. El protocolo de la Química Verde no establece un número mínimo de principios que deben satisfacerse para que un proceso, un producto químico o una reacción química sean considerados como verdes. La métrica Escala Verde se usó para determinar el grado de verdor de la reacción de síntesis del complejo cobre-dimetilsulfóxido, correspondiente a una práctica de laboratorio de Química Inorgánica a escala micro, en un programa de Química.

La herramienta metodológica usada es mixta: cualitativa, mediante un código de colores (café a verde) y semicuantitativa, a través del uso de una escala numérica tipo Likert (1-10), indicando así cuál es el grado de acercamiento al protocolo de la química verde. Se muestra el diagrama de flujo experimental, incluyendo sus

pictogramas e indicando, a la vez, para los reactivos y solventes qué tipo de daño y/o riesgo pueden representar al ambiente y la salud, como también el nivel de peligrosidad de los compuestos utilizados, lo cual genera una conciencia sobre las precauciones y controles que se deben tener durante el desarrollo de un experimento químico. La evaluación del acercamiento verde da un valor promedio de 8 que corresponde a “muy buen acercamiento verde”.

Palabras clave: química verde, desarrollo sostenible, Cu-DMSO, escala verde,

Abstract

The Green Star graphical metric was used to study the greenness of the synthesis reaction of the copper-dimethylsulfoxide complex by evaluating the compliance of each of the 12 principles of green chemistry. Changes in solvent and temperature allowed to improve the Green Star Area Index. The used methodology enables the student to identify the risks to health and to the environment, as well as to know the level of dangerousness of the used compounds, which generates an awareness of the precautions and controls that must be taken during the development of a chemical experiment.

The Green Star graphical metric was used to study the greenness of the synthesis reaction of the copper-dimethylsulfoxide complex by evaluating the compliance of each of the 12 principles of green chemistry. Changes in solvent and temperature allowed to improve the Green Star Area Index. The used methodology enables the student to identify the risks to health and to the environment, as well as to know the level of dangerousness of the used compounds, which generates an awareness of the precautions and controls that must be taken during the development of a chemical experiment.

The Green Star graphical metric was used to study the greenness of the synthesis reaction of the copper-dimethylsulfoxide complex by evaluating the compliance of each of the 12 principles of green chemistry. Changes in solvent and temperature allowed to improve the Green Star Area Index. The used methodology enables the student to identify the risks to health and to the environment, as well as to know the level of dangerousness of the used compounds, which generates an awareness of the precautions and controls that must be taken during the development of a chemical experiment.

Keywords: green chemistry, Cu-DMSO, green scale

El principal objetivo de la química verde (Anastas, 2000) es el diseño de productos y procesos químicos que reducen o eliminan la síntesis y uso de sustancias peligrosas y otros impactos perjudiciales para la salud humana y el medio ambiente. Desde el punto de vista académico, es esencial que los estudiantes de química adquieran una visión de la química en un contexto global de Ciencia-Tecnología –Sociedad (Aikenhead, 1994) y se concienticen de la importancia de la química verde para asegurar sustentabilidad. Actualmente el uso y producción de sustancias peligrosas y la producción de enormes cantidades de residuos, son los asuntos más importantes con relación al desarrollo sostenible y que la química verde puede ayudar a resolver (Kirchoff, 2005).

En el Informe Brundtland (Unesco, 1987), se señalaba que “el desarrollo sostenible requiere la satisfacción de las necesidades básicas de todos, en particular las de los mas pobres, a las que se deberá otorgar prioridad preponderante”, así como que el “desarrollo sostenible es aquel que garantiza las necesidades del presente sin comprometer las posibilidades de las generaciones futuras para satisfacer sus propias necesidades”.

Los objetivos básicos de la Química Verde se fundamentan en los 12 principios formulados por Anastas y Warner (Anastas, 2000), enunciados en la Tabla 1 y se constituyen en los mandamientos de la nueva química.

Tabla 1. Los doce principios de la Química verde

P1	Prevención: es mejor prevenir la generación de un residuo, que tratarlo o eliminarlo después de haberlo generado.
P2	Economía atómica: los métodos de síntesis deberán diseñarse de tal forma que se incorporen al máximo, en el producto final, todos los sustratos usados durante el proceso.
P3	Síntesis químicas menos peligrosas: los métodos de síntesis deberán ser diseñados para utilizar y generar sustancias que presenten baja o nula toxicidad , tanto para el ser humano como para el ambiente.
P4	Diseño de químicos seguros: los productos químicos se diseñarán de manera que mantengan su eficacia y baja toxicidad.
P5	Uso de disolventes seguros o auxiliares: evitar el empleo de sustancias auxiliares como disolventes, reactivos de separación, etc.,y en el caso de que se empleen, éstos deberán ser lo mas inocuos posible.

P6	Diseño de la eficiencia energética: los requerimientos energéticos en un proceso químico se catalogan por su impacto económico y al medio ambiente; por lo tanto, se sugiere llevar a cabo los métodos de síntesis a temperatura y presión ambiente.
P7	Uso de materias primas renovables: la materia prima debe ser preferiblemente renovable en lugar de agotable, siempre que sea técnica y económicamente viable.
P8	Reducir derivados: evitar el uso de grupos de bloqueo, de protección-desprotección o la modificación temporal de los procesos físicoquímicos; su empleo requiere reactivos adicionales y genera residuos.
P9	Catálisis: considerar el empleo de catalizadores, lo mas selectivos posible, de preferencia de origen natural.
P10	Diseñar sustancias biodegradables: los productos deberán ser diseñados de tal manera que al final de su vida útil no persistan en el ambiente.
P11	Análisis en tiempo real para prevenir la contaminación: las metodologías analíticas necesarias serán desarrolladas en el momento del proceso, lo que permitirá un seguimiento y control en tiempo real del proceso, previo a la formación de sustancias peligrosas.
P12	Químicos seguros para prevenir accidentes: las sustancias y la forma de una sustancia usada en un proceso químico deberá ser elegida para reducir el riesgo de accidentes químicos, incluyendo las emanaciones, explosiones e incendios.

Una estrategia efectiva para alcanzar la transformación de la química a química verde entre los estudiantes de un Programa de Química, consiste en el uso de procedimientos de laboratorio más verdes, especialmente en experimentos de síntesis, y su evaluación cuidadosa. Para el presente estudio se ha seleccionado un experimento de síntesis de un complejo de coordinación a escala micro, incluido en el Manual de Laboratorio de Química Inorgánica.

Resulta entonces de gran interés que las prácticas, experimentos y proyectos que se diseñan y realizan en los laboratorios de docencia tengan un acercamiento cada vez mas verde; por esa razón en el presente estudio se muestra en detalle una metodología para evaluar el acercamiento verde de una reacción química, con la finalidad de que este ejercicio educativo permita conocer y aplicar de forma crítica los 12 principio de la Química Verde.

Es importante resaltar, que en relación al protocolo de la Química Verde, no está estipulado un número mínimo de principios a cubrir para que un proceso, un producto químico o una reacción sean considerados como verdes.

La herramienta metodológica que se emplea en este trabajo para llevar a cabo la evaluación del grado de verdor de la reacción seleccionada, corresponde al campo conocido como Métricas de la Química Verde, tales como la Estrella Verde (Ribeiro, 2012, Garzón, 2016, Pérez, 2017)), la Escala Verde (Miranda, 2012 y 2016) y Métricas de Masa (Ribeiro, 2012). La métrica Estrella Verde (Ribeiro, 2012) hace una comparación visual del área de la estrella de color verde a través del cálculo del parámetro denominado Índice de Área de Estrella Verde (IAEV). La métrica denominada Escala Verde, es mixta: cualitativa, mediante un código de color y semicuantitativa, a través del uso de una escala numérica tipo Likert (1-10); indicando de conformidad con el código de colores y la escala tipo Likert que va de totalmente café (1) a totalmente verde (10), cuál es el grado de acercamiento al protocolo de la Química Verde.

Con la herramienta conocida como Métricas de Masa, MM, se calculan los parámetros que se usan para evaluar la minimización de desperdicio tales como Factor Ambiental [Factor A](Mckenzie, 2005), Intensidad de la Masa [IM] (Van Arnum, 2005), o la incorporación de los átomos de los reactivos en el producto, Economía Atómica [EA] (Cheney, 2008), Utilización Atómica [UA], Eficiencia Relativa de la Masa, [ERM](Andraos, 2007) y Eficiencia del Elemento X [EEX] (Andraos, 2007). Estas métricas se han usado en la educación química a nivel de pregrado y posgrado.

En el presente trabajo se ha usado la métrica holística conocida como Escala Verde (Miranda, 2016,) para evaluar el grado de verdor de una reacción de síntesis inorgánica mediante la evaluación del cumplimiento de cada uno de los 12 principios de la Química Verde. También se usa la Escala Verde para escoger el protocolo más verde entre varios posibles disponibles en la literatura, como también para evaluar el cambio de verdor cuando se introducen mejoras en un proceso químico.

II. METODOLOGÍA

Para evaluar el grado de verdor de una reacción química, la construcción de la métrica conocida como Escala Verde, comienza con un inventario de todas las sustancias involucradas (materias primas, productos, subproductos, solventes, catalizadores, y otros) a partir del protocolo de la reacción.. Luego se colecciona para cada sustancia la información sobre riesgos a la salud humana, el medio ambiente y accidentes químicos potenciales. Para construir esta métrica, los riesgos de las sustancias involucradas generalmente se obtienen de las fichas de seguridad de los fabricantes de productos químicos o del

Sistema Armonizado Global de Clasificación y Rotulado de Compuestos Químicos (Ribeiro, 2014). El protocolo de la reacción de síntesis seleccionada (Szafran, 1999) es el siguiente:

Se colocan 150 mg de cloruro de cobre (II) en un beaker de 5 mL equipado con una barra magnética de agitación. Se agrega 1 mL de etanol absoluto y se agita hasta que se disuelva todo el cloruro de cobre (II). Se agregan lentamente 250 μ L de DMSO. La reacción exotérmica inmediata produce un precipitado verde claro. Se agita la mezcla hasta que se homogenice. Se recolecta el producto filtrándolo al vacío. Se lavan los cristales del producto con dos porciones de 250 μ L de etanol frío. Se seca el material sobre papel de filtro.

La herramienta metodológica que se usa en este trabajo es mixta: cualitativa, mediante un código de color (figura 1) y semicuantitativa, a través del uso de una escala numérica tipo Likert (**1-10**), indicada entre paréntesis. (figura 2) La herramienta de evaluación incluye el código de colores y la escala tipo Likert que va de totalmente café (**1**) a totalmente verde (**10**), como se observa en la Figura 2.



Figura1.Código de color para evaluar un acercamiento verde



Figura 2 Escala de análisis y evaluación

Para aplicar la métrica Escala Verde, primero se hace el diagrama de flujo del método experimental de la síntesis que se va a evaluar, luego se incluyen los pictogramas de los reactivos y disolventes, mostrando, con respecto a cuál principio de la Química Verde se está evaluando, qué tan verde o café es su aplicación o incidencia en la escala del 1 al 10 conforme a lo mostrado en las figuras 1 y 2.

El esquema básico del experimento para evaluar el grado de verdor de la reacción de síntesis, consta de los siguientes pasos:

1-Leer cuidadosamente el protocolo de la reacción a evaluar para lograr la mejor comprensión posible.

2-Escribir la reacción general del proceso.

3-Construir un diagrama de flujo del método experimental, asignando a cada etapa una letra en minúscula y orden alfabético consecutivo.

4-Colocar para cada etapa experimental un cuadro que contenga un número que indique el principio que se abarca, y evaluar, mediante el código de color propuesto en la Figura 2, el grado de acercamiento verde (color-tono) de éstos, lo cual se complementa con la evaluación indicada entre paréntesis.

5-Incluir los pictogramas correspondientes a la toxicidad, inflamabilidad, corrosión y daño al medio ambiente, de todas las sustancias involucradas (reactivos,

disolventes, productos y residuos generados) para lo cual se debe tener conocimiento de la propiedades físicas, químicas y toxicológicas de todos ellos, para cada paso del desarrollo experimental.

6-Elaborar, mostrando el orden en el cual aparecen cada uno de los pasos experimentales en el diagrama de flujo, la evaluación justificada en los Doce Principios de la Química Verde, mostrando qué principio de la Química Verde se está evaluando, teniendo en cuenta: a) qué tan verde o café es en la escala de 1-10; b) cuál es el daño y / o riesgo para el ambiente.

7- Realizar la evaluación integral del acercamiento verde del proceso, explicando porqué se considera que se cumplieron o no determinados principios de la Química Verde.

8- Presentar al final del diagrama de flujo experimental la escala tipo Likert de asignación numérica y de color correspondiente, la cual se determina mediante la sumatoria de las evaluaciones realizadas, y dividiendo entre el total de eventos analizados. La reacción química es: $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O} + 2(\text{CH}_3)_2\text{SO} \rightarrow [\text{CuCl}_2((\text{CH}_3)_2\text{SO})_2] + 2\text{H}_2\text{O}$

El diagrama de flujo con la asignación numérica de los diferentes principios se muestra en la figura 3

Evaluación total del proceso

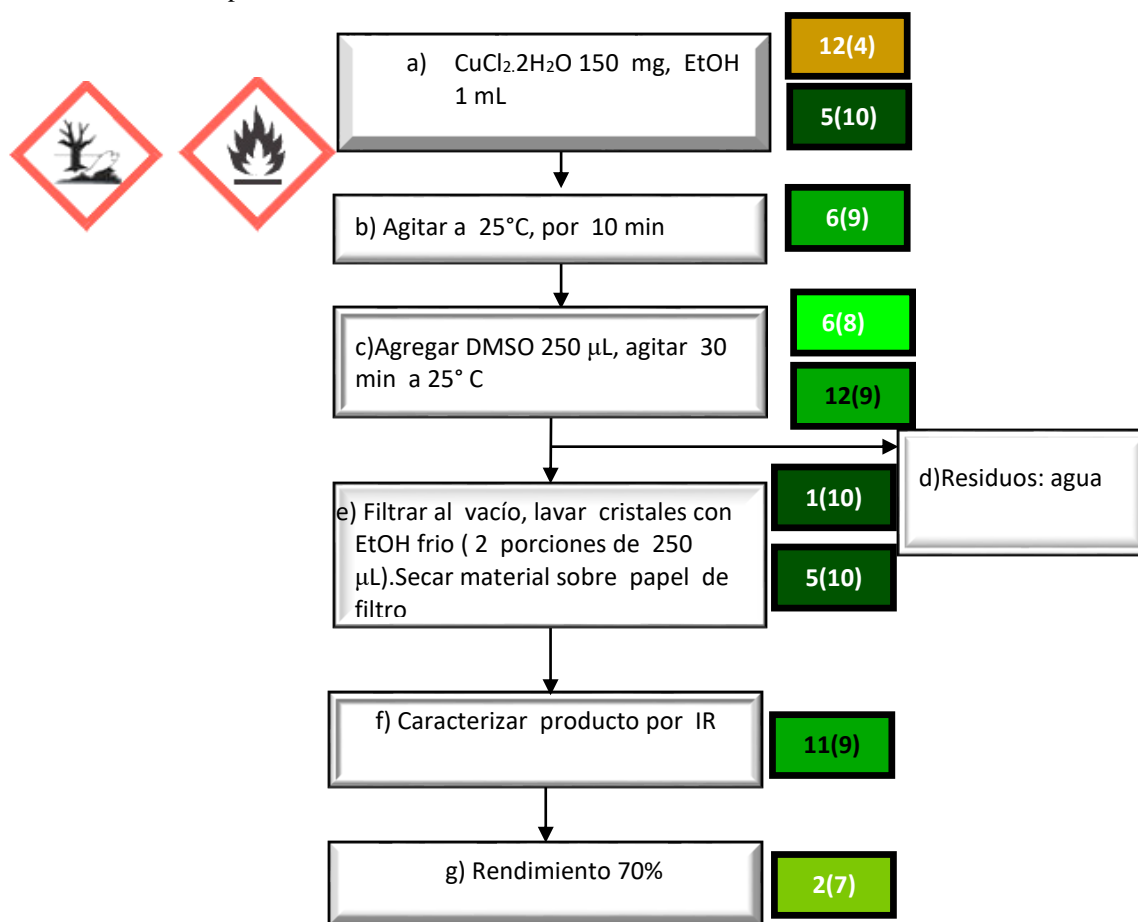




Figura 3 Diagrama de flujo del proceso sintético

III. RESULTADOS Y DISCUSION

A continuación se dan los resultados experimentales obtenidos al escoger del Manual de Laboratorio de Química Inorgánica II la práctica titulada “Complejo metálico de cobre - dimetil sulfóxido” para hacerle un estudio del grado de verdor de la reacción.

Mediante el uso de los símbolos indicativos del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de productos Químicos, GHS, y las fichas de seguridad, se consiguió información para los compuestos utilizados en la reacción: dimetilsulfóxido, cloruro de cobre dihidratado y etanol absoluto. Se asignaron los valores de la evaluación del acercamiento verde de la reacción a cada uno de los pasos, como sigue:

Paso a: El CuCl_2 está catalogado como tóxico para el ambiente y para el ser humano, pero como la cantidad usada es a nivel de microescala, este paso se califica como ligeramente café (4) con relación al principio 12. Se emplea etanol como solvente, el cual a pesar de ser un disolvente inflamable, es considerado verde en función de su baja toxicidad y buena degradabilidad, además de ser usado a escala micro. Por esta razón, se puede considerar esta parte del proceso con respecto al principio 5 como totalmente verde (10).

Paso b: En cuanto al diseño de la eficiencia energética, principio 6, el gasto energético es bajo, por lo que es adecuado evaluarlo con un gran acercamiento verde (9).

Paso c: El dimetil sulfóxido no es considerado peligroso para el medio ambiente, además por su uso a escala micro, este paso se considera con gran acercamiento verde (9) con relación al principio 12. Con relación al diseño de la eficiencia energética, principio 6, dado que el tiempo de reacción no es prolongado y la temperatura es baja, es apropiado evaluarlo con un muy buen acercamiento verde (8). **Paso d:** El único subproducto generado es agua, molécula residual verde (10).

Paso e: Para el lavado de los cristales se empleó etanol frío en muy pequeñas cantidades el cual a pesar de ser un disolvente inflamable, es considerado verde en función de su baja toxicidad y buena degradabilidad. Por esta razón,

se considera esta parte del proceso con respecto al principio 5 como totalmente verde (10).

Paso f: La caracterización del complejo formado se hizo por espectroscopia infrarroja, lo cual califica al proceso en cuanto al principio 11 como totalmente verde (9).

Paso g: La economía atómica es de 70% lo que implica un buen acercamiento verde (7).

La evaluación final se determinó mediante la sumatoria de todas las evaluaciones realizadas (76) la cual se divide entre el total de eventos realizados (9), obteniendo de esta forma la evaluación correspondiente para esta reacción, la cual se considera con un “muy buen acercamiento verde” (8).

IV. CONCLUSIONES

*.-La métrica Escala Verde permite una evaluación del grado de verdor de la reacción mediante un simple análisis visual del código de colores y un cálculo usando la escala tipo Likert de 1 a 10.

*.- La Escala Verde por ser una métrica holística de la química verde es muy útil para evaluar el grado de verdor de una reacción química específica. Esta utilidad es una consecuencia de las características de la Escala Verde: i) permite una comparación fácil del verdor de diferentes alternativas de procedimientos experimentales por simple análisis visual y puede ser fácilmente expresada por un número entre 1 y 10; ii) permite una rápida identificación, por análisis visual directo, de los aspectos que necesitan optimización para mejorar el verdor y iii) es fácil de construir aunque a veces es difícil obtener toda la información necesitada relacionada con las propiedades tóxicas y ambientales de los compuestos involucrados en la reacción.

*.-La metodología propuesta en este experimento y los resultados obtenidos permiten al estudiante familiarizarse con los 12 principios de la química verde y evaluarla a través de la métrica Escala Verde y ganar experiencia en aquellos aspectos que se deben cambiar para mejorar el verdor de las reacciones químicas y procesos químicos.

*.- Después de revisar paso a paso el cumplimiento de los principios de La Química Verde la evaluación del verdor dio como resultado “muy buen acercamiento verde”, con un valor numérico de 8 en la escala Likert.

*.-En la evaluación del verdor de una síntesis química la Escala Verde Verde permite identificar claramente los riesgos a la salud y ambientales, como también el nivel de peligrosidad ante un potencial accidente, lo cual genera una

conciencia sobre las precauciones y controles que se deben tener en cuenta durante el desarrollo de un experimento químico.

*.-La Escala Verde es una métrica de la Química Verde mas fácil de usar e interpretar que otras métricas conocidas.

*.-Es importante que los estudiantes de química aprendan a aplicar la métrica Escala Verde cuando diseñan y realizan experimentos bajo diferentes condiciones.

*.-La química a escala micro trae enormes beneficios ambientales y de seguridad en el laboratorio. Aun los compuestos tóxicos al medio ambiente reducen apreciablemente su peligrosidad. Además reduce significativamente el tratamiento y disposición de los desperdicios.

V. BIBLIOGRAFÍA

-Aikenhead, G. What is STS Science Teaching? In *STS Education –International Perspectives on Reform*; Solomon, J., Aikenhead, G., Eds.; Teachers College Press: New York, **1994**.

- Anastas, P.T.; Warner, J.C. *Green Chemistry: Theory and Practice*; Oxford University Press: London, **1998**.

- Anastas, P.T.; Heine, L. G.; Williamson, T.C. *Green Chemical Syntheses and Processes*; American Chemical Society: Washington, DC. **2000**

- Andraos, J.; Sayed, M. J. *J. Chem. Educ.* **2007**, 84, 1004-1010.

-Broun, B.; Charney, R.; Clarens, A.; Farrugia, J.; Hitchens, C. *J. Chem. Educ.*, **2006**, 83, 1126-1129.

-Cheney, M. L.; Zaworotko, M.J.; Beaton, S.; Singer, R.D. *J. Chem. Educ.* **2008**, 85, 1649-1651.

- Garzón, G.; Ochoa, R.; López, L.A. Evaluación de la verdosidad de la síntesis del complejo cobre –dimetilsulfóxido a escala micro empleando la métrica Estrella Verde. 51° Congreso Mexicano de Química. Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Septiembre 28 – Octubre 2 de **2016**. Pachuca, México.

-Goncalves, F.; Yunes, S.F.; Guaita, R.I.; Marques, C.A.; Pires, T.M.; Pinto, R.L. La dimensión ambiental de la experimentación en la enseñanza de la química: consideraciones sobre el uso de la métrica holística “estrella verde”. *Educación Química*, **2017**, 28, 99-106.

-Kirchhoff, M.M. Promoting Sustainability through Green Chemistry. *Resour. , Conserv. Recycl.***2005**,44, 237-243.

- Lancaster, M. Green Chemistry-An introductory Text; The Royal Society of Chemistry: Cambridge, **2002**.

-McKenzie, L.C.; Huffman, L.M.; Hutchison, J.E. *J. Chem. Educ.***2005**, 82, 306-310.

Miranda, R.¿Qué tan verde es un experimento? *Edu. Quim.***2011**, 22, 214-248.

Miranda , R Química Verde Experimental. Primera edición . Universidad Nacional Autónoma de México.**2012**.

Miranda R"Química Verde: Una vía para contribuir a la sostenibilidad". 51° Congreso Mexicano de Química. Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Septiembre 28- Octubre 2 de **2016**.Pachuca, México.

- Ribeiro, M. Gabriela T.; 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(2), 149-159.

-Ribeiro, M. Gabriela T.; Machado A. Metal Acetylacetonate Synthesis Experiments: Which is greener?A.S.C. *J. Chem. Educ.* **2011**,88(7), 947-953

-Ribeiro, M. Gabriela T.; Machado A. Novas Metricas Holisticas Para Avaliacao da Verduras de reacoes de sintese em laboratorio. A.S.C. *Quim Nova*, **2012**, 35, 1879-1883.

-Ribeiro, M. Gabriela T.; Yunes, S.F.;Machado A. J. Assessing the Greenness of Chemical Reactions in the Laboratory Using Updated Holistic Graphic Metrics Based on the Globally Harmonized System of Classification and Labeling of Chemicals. *J.Chem. Educ.* **2014**, 91, 1901-1908.

-UNESCO, International Congress on Environmental Education and Training, Moscú/París, **1987**.

-Van Arnum, S.D. *J. Chem. Educ.* **2005**, 82,

- Szafran Zvi; Pike Ronald; Singh Mono. *Microscale inorganic Chemistry* . John Wiley & Sons, Inc, **1999**.

CURRICULOS

Guillermo Garzón García. Químico Universidad Nacional de Colombia; M.Sc. Purdue University, Estados Unidos; Ph.D. Northwestern University, Estados Unidos; Posdoctorado Texas A&M University, Estados Unidos; Especialista en Administración de la Calidad Total y la Productividad, Universidad del Valle, Colombia. Profesor de Dedicación Exclusiva de la Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Universidad Santiago de Cali, miembro del grupo de investigación GIEMA. Experiencia investigativa en Química Inorgánica y Aseguramiento de la Calidad. Investigador Asociado en la clasificación de Colciencias.

Luis Alfredo López Loaiza. Tecnólogo en Mantenimiento Electrónico e Instrumentación Industrial del Sena; Químico de la Universidad Santiago de Cali. Experiencia en Automatización Industrial y Control de Procesos Industriales en Smurfit Kappa.

Juan Guillermo Morales García. Estudiante de Química de la Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Universidad Santiago de Cali, miembro del grupo de investigación GIEMA.

*Para citar este artículo: Garzón García G., Morales G JG., Lopez L LA. Evaluation of the Greenness of the Complex $\text{CuCl}_2(\text{DMSO})_2$ Synthesis to Micro Scale Using the Green Scale Metric. Revista Bistua.2017.15(2):03-15

+ Autor para el envío de correspondencia y la solicitud de las separatas: Guillermo Garzón García. -Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Universidad Santiago de Cali, Cali, Colombia. email: ggarzon@usc.edu.co

Recibido: Septiembre 15 de 2016

Aceptado: Enero 15 de 2017