



Casa abierta al tiempo

**Evaluación cuantitativa de la
aceptabilidad ambiental en experimentos
de algunos de los programas curriculares
de la división de CBS en la UAM-I**

Tesis que presenta:

Nadya Ivette Birrichaga Bonilla

Para obtener el grado de:

**Maestro en Ciencias (Energía y Medio
Ambiente)**



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA
METROPOLITANA

UNIDAD IZTAPALAPA

POSGRADO EN ENERGÍA Y MEDIO
AMBIENTE

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E
INGENIERÍA

**Evaluación cuantitativa de la aceptabilidad ambiental en
experimentos de algunos de los programas curriculares de la
división de CBS en la UAM-I**

Tesis

Que para obtener el grado de:
Maestro en Ciencias (Energía y Medio Ambiente)

Presenta:
Nadya Ivette Birrichaga Bonilla

Director:
M. en B.E. Enrique Mendieta Márquez

Co-directora:
Dra. Irma C. Gavilán García

México, Cd. de México a 8 de septiembre del 2017

Agradecimientos

La Maestría en Ciencias (Energía y Medio Ambiente) de la Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa, pertenece al Padrón Nacional de Posgrados de Calidad del CONACyT y cuenta con apoyo del mismo consejo con el convenio 003893; por lo que agradece la beca recibida, a través del convenio No. (CVU/Becario): 658785/574962 para el desarrollo de esta tesis.



Agradecimientos y dedicatorias personales

A la **UAM** por las enseñanzas brindadas dentro de sus recintos.

A la **Dra. Irma Gavilán García** y al **M. en B. E. Enrique Mendieta Márquez** por asesorarme y con lo cual hacer de este trabajo y tesis una realidad.

Agradecimiento y dedicatoria

A mis padres **Blanca O. Bonilla Martínez** y **Jesús Birrichaga Membrillo** por su amor, trabajo y sacrificios, gracias a ustedes he logrado convertirme en lo que soy, es un privilegio ser su hija, son los mejores padres.

Dedicatorias

A mi hermana **Tanya V. Birrichaga Bonilla** por ser además mi amiga y apoyo incondicional, estoy muy orgullosa de tenerte como hermana.

A mis abuelos **Jesús Birrichaga de la Rosa** y **Ma. Elena Membrillo Poblano** por amarme tanto, apoyarme y estar al pendiente de mí, son admirables.

A mi abuelita **Elodia Martínez Navarro** por ser mi ejemplo a seguir y tener un gran corazón.

A todos y cada uno de los miembros de mi familia porque siempre me han acompañado en mis logros. Los quiero.

A mis amigas **Montserrat M.**, **Marisol H.** y **Mariana G.**, espero nuestra amistad perdurará por siempre y tengamos muchos más momentos inolvidables.

A **Antonio Calleja** por todo el tiempo, amor y apoyo brindado en estos últimos años.



Publicaciones y congresos

Publicaciones

Gavilán, I., Mendieta, E., Birrichaga, N. (2016) Diseño de una estrategia para la evaluación del factor de aceptabilidad ambiental en experimentos de química en la UAM-I. *Revista Tendencias en Docencia e Investigación en Química*. **2** México.

Congresos

VII Congreso Internacional de Docencia e Investigación en Química 2016. Ponencia modalidad oral "Aceptabilidad ambiental en experimentos de química en la UAM-I"

XXI Simposio del Departamento de Ciencias de la Salud 2016. Ponencia modalidad oral "Implementación de la estrategia de evaluación de la aceptabilidad ambiental en un curso de laboratorio de química orgánica II en la UAM-I"



Comité tutorial

Director:

M. en B. E. Enrique Mendieta Márquez

Co-directora:

Dra. Irma C. Gavilán García



El jurado designado por la

Comisión Académica del Posgrado en Energía y Medio Ambiente

de la Unidad Iztapalapa, aprobó la tesis que presentó

NADYA IVETTE BIRRICHAGA

El día **8 de septiembre** del año **2017**

Miembros del Jurado:

Dr. Gustavo Ávila Zarraga

Presidente

Dr. Sergio Alatorre Santamaría

Secretario

M.C. Ignacio López y Celis

Vocal



Contenido

1.1	Introducción.....	11
1.2	Antecedentes.....	12
2.1	Hacia una química sustentable.....	15
2.2	Evaluación de aceptabilidad ambiental de una reacción.....	16
2.3	Evaluación del riesgo.....	19
2.4	Costo.....	20
2.5	Manejo de residuos.....	20
2.6	Ejemplo de la evaluación de factor de aceptabilidad ambiental y los conceptos relacionados.....	21
2.7	Objetivo general.....	23
2.8	Objetivos particulares.....	23
3.1	Selección de experimentos.....	24
3.2	Evaluación de la sustentabilidad.....	26
3.3	Implementación de la estrategia en un curso de docencia de la UAM-I.....	29
4.1	Síntesis de ácido fumárico.....	31
4.1.1.	Técnica tradicional.....	31
4.1.2.	Técnica alternativa.....	37
4.2.	Síntesis de aspirina.....	42
4.2.1.	Técnica tradicional.....	42
4.2.3.	Técnica alternativa.....	48
4.4.	Síntesis de paracetamol.....	53
4.4.1.	Técnica tradicional.....	53
4.4.2.	Técnica alternativa.....	61
4.4.	Síntesis de un éster.....	66
4.4.4.	Técnica tradicional (salicilato de metilo).....	67
4.4.5.	Técnica tradicional (acetato de isoamilo).....	73
4.4.6.	Técnica alternativa (propionato de etilo).....	79
4.5.	Deshidratación de ciclohexanol.....	84
4.5.1.	Técnica tradicional.....	84
4.5.3.	Técnica alternativa.....	90
4.6.	Síntesis de un azocompuesto.....	95
4.6.1.	Técnica tradicional.....	95
4.6.3.	Técnica alternativa.....	101
4.7.	Síntesis de borneol.....	107



4.7.1. Técnica tradicional	107
4.8. Síntesis de benzoína	113
4.8.1. Técnica alternativa.....	113
4.9. Síntesis de furfural.....	119
4.9.1. Técnica alternativa.....	119
4.10 Implementación de la estrategia	124
4.10.1. Percepción de los alumnos.....	125
5.1 Ácido fumárico.....	126
5.2 Ácido acetilsalicílico	127
5.3 Paracetamol.....	128
5.4 Éster	129
5.5 Deshidratación del ciclohexanol.....	130
5.6 Síntesis de un azocompuesto	131
5.7 Síntesis de borneol	132
5.8 Síntesis de benzoína	133
5.9 Síntesis de furfural	134
5.10 Implementación de la estrategia	135
5.10.1. Percepción de los alumnos.....	135
Anexo 1	139
Anexo 2	146
Anexo 3	152
Anexo 4	160
4.1 Síntesis de ácido fumárico.....	160
4.2. Síntesis de aspirina	164
4.3 Síntesis de paracetamol	169
4.4. Síntesis de un éster	176
4.5. Deshidratación de ciclohexanol	183
4.6. Síntesis de un azocompuesto	188
4.7. Síntesis de borneol	193
4.8. Síntesis de benzoína	195
4.9. Furfural	197

Resumen

Este estudio propone la evaluación e implementación de experimentos de química orgánica desde la perspectiva de sustentabilidad. Se evaluó la técnica tradicional (aquella que se realiza en los laboratorios de docencia de la UAM-I) y una alternativa para la síntesis de un mismo compuesto comparando los resultados de ambas juzgando la idoneidad de cada ruta según los parámetros cuantitativos utilizados. Esta comparación se llevó a cabo en nueve tipos de reacciones químicas las cuales forman parte importante de la formación profesional de los alumnos dentro de la División de Ciencias Biológicas y de la Salud en la Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa. Se puede asegurar que, al introducir en el aula este tipo de enfoques, se va familiarizando al alumnado con el tema ambiental ya que se puede analizar y determinar qué tan limpia es cada técnica experimental.

Introducción y antecedentes

1.1 Introducción

Los problemas ambientales que vivimos en la actualidad han avanzado de forma progresiva en los últimos años, afectando la calidad de vida de los habitantes del planeta y la integridad de su patrimonio natural, lo cual ha generado la necesidad de promover acciones tendientes a preservar el medio ambiente. Gran parte de estos problemas se genera por procesos químicos, uso indiscriminado de recursos naturales, manejo inadecuado de residuos sólidos urbanos, residuos peligrosos y residuos de manejo especial. Por consiguiente, ha surgido un conjunto de acciones encaminado a reducir el deterioro ambiental, denominado “química verde”. (*Centi y Peerathinem, 2003; Kirchoff, 2005; García, 2009*) Desde su inicio conceptual en 1991, la química verde ha crecido de forma continua nacional e internacionalmente, con la creación de organismos, redes, instituciones, revistas y programas educativos. (*Kirchoff, 2005; Anastas y Kirchoff, 2002*)

El programa de Química Verde, que se desarrolló a finales del siglo XX, fue propuesto originalmente en los Estados Unidos de Norteamérica (*Anastas y Warner, 1998*), y en la actualidad también se aplica en la Unión Europea, así como en otras partes del mundo. Esta estrategia, que se ha aplicado tanto a nivel educativo, como a nivel científico e industrial, busca implementar buenas prácticas en la síntesis de compuestos químicos. La propuesta consta de 12 principios, los cuales fueron planteados por Paul Anastas, quien entonces se encontraba trabajando en la EPA (Agencia de Protección Ambiental, por sus siglas en inglés) y por John C. Warner (Universidad de Massachusetts, Lowell) (*Anastas y Warner, 1998*). Estos principios son una guía que ayuda a explicar y aplicar lo que significa la definición de la Química Verde (*Fuhrhop y Li, 2003*).

Estos 12 principios proporcionan un marco de referencia para que los químicos puedan aplicar la filosofía de la química verde, y los cuales son los siguientes:

- Prevención en la generación de residuos.
- Maximizar la economía atómica.
- Síntesis empleando sustancias no tóxicas.
- Diseño seguro, con productos químicos eficaces y de poca toxicidad.
- Evitar el uso de sustancias auxiliares.
- Eficiencia energética.
- Uso de materias primas renovables.
- Reducción de derivados.
- Catálisis: se emplearán catalizadores lo más selectivos posibles.
- Degradación limpia para que los productos químicos no persistan en el medio ambiente.
- Análisis (monitoreo) continuo de contaminación.
- Seguridad intrínseca y prevención de accidentes.

Cuando un químico toma en cuenta estos principios, él mismo favorece al medio ambiente y a la larga se pueden disminuir los gastos económicos de las compañías al reducir el costo que implica el control de la contaminación y la cantidad de energía utilizada. Esta propuesta cae dentro de un concepto más amplio como lo es la sustentabilidad (desarrollo sustentable o sustentabilidad ecológica) (*León y Juaristi, 2009*). En este sentido, se han propuesto prácticas destinadas a favorecer la sostenibilidad

del planeta, mediante la conservación y uso racional de bienes y servicios ambientales, así como la planificación y administración eficiente de los recursos naturales por parte de las autoridades competentes, teniendo en cuenta tres aspectos fundamentales: el ambiente, la economía y la sociedad (Kirchoff, 2005; Manley, et al., 2008), por ser estos, las bases de la sostenibilidad y aplicabilidad de los principios de la química verde.

En la actualidad, existen muchos estudios en los cuales se utiliza la química verde para reducir el impacto ambiental de los residuos industriales y lograr un manejo adecuado de los recursos ambientales. (Vargas y Ruiz; 2007) Sin embargo, son muchos los retos pendientes a los cuales debemos dar respuesta, y por lo tanto es necesario seguir investigando sobre las interacciones ambientales en un rango de escalas espacial y temporal, teniendo en cuenta el ciclo de vida completo de los productos, desarrollar nuevas metodologías de detección, identificación y separación de contaminantes, mecanismos de los cambios fotoquímicos y los de toxicidad, impulsar las fuentes renovables de materias primas, adelantar estudios en el campo de la biomasa, y en la reutilización de residuos de las catálisis en las células solares fotovoltaicas (Vilches y Perez, 2011).

1.2 Antecedentes

En 1972, la educación ambiental aparece como una propuesta viable para contribuir a enfrentar los problemas ambientales y sus consecuencias. En la Conferencia de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente Humano, celebrada en Estocolmo, Suecia, se acordó desarrollar un programa educativo sobre cuestiones ambientales a nivel mundial, por lo que en 1975 la UNESCO en cooperación con el Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente (PNUMA) pusieron en marcha el Programa Internacional de Educación Ambiental (PIEA), a cargo de William Stapp, de la Escuela de Recursos Naturales de la Universidad de Michigan en Estados Unidos de Norteamérica. El PIEA orientó sus objetivos hacia el diseño y la promoción de contenidos educativos, materiales didácticos y métodos de aprendizaje para este nuevo enfoque educativo. Esto es, inclinado eminentemente hacia la educación escolar y particularmente al nivel básico. Las tareas de promoción se llevaron a cabo a través de varias estrategias, pero principalmente mediante un programa editorial que produjo una serie que publicó treinta títulos que abordaron temas diversos de la educación ambiental para distintos niveles educativos. (González y Arias, 2009).

Desde 1985 se iniciaron en el país los trabajos para incorporar en las tareas de la gestión ambiental a las instituciones de educación superior e investigación científica. En marzo de ese año, en Amealco, Querétaro, con la asistencia de 25 representantes de diversas instituciones, se llevó a cabo la instalación en México de la Red de Formación Ambiental para América Latina y el Caribe, promovida por el PNUMA. Sus principales objetivos fueron:

1. Establecer los mecanismos de coordinación necesarios entre las instituciones que llevan a cabo actividades de investigación y formación ambiental, así como con los sectores público, privado y social.
2. Propiciar el intercambio de información entre centros e institutos de investigación y educación superior y entre ellos y los sectores público, privado y social.
3. Promover la creación de mecanismos adecuados para que los resultados de la investigación ambiental de las instituciones educativas del nivel superior sustenten actividades de

planeación, legislación, normatividad e información básica para la validación de la toma de decisiones de los sectores público, privado y social.

4. Detectar las necesidades de investigación, capacitación, asesoría e información en materia ambiental, de los sectores público privado y social en las diversas regiones del país.
5. Asesorar en materia de evaluación, planeación y gestión ambiental a los vértices de decisión involucrados en la planeación del desarrollo.
6. Coadyuvar con la Secretaria de Desarrollo Urbano y Ecología en la definición de lineamientos de política, estrategia y líneas de acción en investigación y formación ambiental, de acuerdo a los lineamientos establecidos por el Programa Nacional de Desarrollo Tecnológico y Científico (Prondetec).
7. Establecer los mecanismos de planeación, formulación, programación, instrumentación y operación para la formación, investigación y asesorías sobre temas ambientales con un enfoque integrador, multidisciplinario y retroalimentador que permita una interrelación adecuada entre el manejo de los recursos materiales y la sociedad en general.
8. Contribuir a la formación de cuadros técnicos, de investigadores, docentes y de tomadores de decisiones, con base en la potencialidad de oferta y demanda existente en cada región.
9. Proponer mecanismos de financiamiento para el fomento de las actividades de asesoría, capacitación, investigación, intercambio de información y operación de la Red.
10. Establecer mecanismos de acción participativa que involucren a la sociedad en la solución de los problemas ambientales.
11. Desarrollar metodologías y establecer criterios y normas para la investigación sobre la temática ambiental.
12. Proponer mecanismos de concertación que permitan vincular investigaciones afines y complementarias.
13. Establecer centros y programas de intercambio sobre temas ambientales.
14. Establecer y actualizar un glosario de conceptos y términos empleados en el campo de la ciencia y la tecnología ambientales.
15. Mantener actualizado el diagnóstico de las actividades de investigación, capacitación, asesoría e información en la temática ambiental.

En 1987 la UNESCO, con objeto de alcanzar el desarrollo sostenible, planteó en consecuencia con lo anterior, tres objetivos principales para la educación ambiental:

- 1) Fomentar el conocimiento de la interdependencia entre los elementos económicos, sociales, políticos y ecológicos para estimular una actitud de compromiso;
- 2) Proporcionar a cada persona oportunidades de adquirir el conocimiento, los valores, las actitudes, la responsabilidad y las herramientas necesarias para proteger y mejorar el medio natural;
- 3) Crear nuevos modelos de comportamiento de los individuos, los grupos y la sociedad en su conjunto, hacia el medio ambiente. *(UNESCO, 1987)*

La ONU declaró al periodo 2005-2014 “La década de la educación por el desarrollo sostenible”. Su objetivo fue integrar los principios, valores y prácticas del Desarrollo Sostenible en todos los aspectos de la educación y el aprendizaje, con el objetivo de fomentar cambios de comportamiento necesarios para preservar en el futuro la integridad del medio ambiente y la viabilidad de la economía, y para que las generaciones actuales y venideras gocen de justicia social. La educación por sí sola no será

suficiente para lograr un futuro más sostenible, sin embargo, sin la educación y el aprendizaje para el desarrollo sostenible, no podremos lograr esta meta. El papel de la educación en el logro de la sostenibilidad es fundamental ya que no hay posibilidad de lograrlo, si no hay un cambio educativo. (ONU, 2002).

A la fecha hay pocos documentos relacionados con el tipo de acercamiento de química verde propuesto en el campo de la docencia, sin embargo, el uso de los parámetros evaluados se presenta en investigación y en la industria desde hace varias décadas.

Marco teórico

2.1 Hacia una química sustentable

Muchos de los peligros que se suelen asociar al "desarrollo científico y tecnológico" han puesto en el centro del debate la cuestión de la "sociedad del riesgo", según la cual, como consecuencia de dichos desarrollos científico-tecnológicos actuales, crece cada día la posibilidad de que se produzcan daños que afecten a una buena parte de la humanidad y que enfrentan a la sociedad a decisiones cada vez más arriesgadas. Sin embargo, en los líderes de opinión, tanto en los sectores de la producción, como en los académicos y gubernamentales, es cada vez más crucial el rol que juega la prevención de la salud humana y del ambiente, y muchos convenios internacionales apuntan en este sentido (*López y Luján, 2000*)

Se ha construido así un consenso general acerca de la necesidad de dirigir los esfuerzos de la investigación e innovación hacia el logro de tecnologías favorecedoras de un desarrollo sustentable, incluyendo la búsqueda de nuevas fuentes de energía, el incremento de la eficacia en la obtención de alimentos, el uso de fuentes renovables para la producción de productos químicos, la optimización de procesos industriales, el uso de catalizadores cada vez más específicos, de biocatalizadores y de biotransformaciones, el diseño de nuevos medicamentos para la prevención de enfermedades, de procedimientos más seguros para la prevención de catástrofes, el diseño integral de transporte de productos químicos para reducir su potencial impacto ambiental, etc.

¿Cómo se plantea la construcción de un nuevo orden de valores que permita alcanzar un desarrollo sustentable, de forma sostenida en el tiempo? El lograrlo implica ser capaces de generar, en los futuros químicos y a través de proyectos educativos ad hoc, conocimientos, disciplina, creatividad y capacidad de análisis, confrontación y propuesta. Esto implica impartir y recibir una formación educativa de calidad, plena de valores y basadas en el análisis cotidiano de la necesidad de hacer realidad una Química Sustentable.

Enseñar química basada en la sustentabilidad es un objetivo que va más allá de una asignatura más en el currículo. No se trata de reproducir técnicas, sino es una invitación al análisis sobre el tipo de tecnología que permitan innovar, este nuevo enfoque requiere de un cambio de perspectiva que sea asumido en forma responsable hacia los recursos no renovables. (*Oulton y Col, 2004; Bernal, 2007; Birrichaga, 2014*)

La enseñanza de la Química Orgánica es un ejemplo claro del cambio de paradigma a lo largo de los últimos 50 años, solo basta dar un vistazo a algunos ejemplos experimentales (tabla 1): (*Castro, 2006; Pájaro y Olivero, 2011*)

Tabla 1. Ejemplos de la evolución en la síntesis química (Elaboración propia).

Oxidación de alcoholes	En los 60's	En los 80's	En el 2000	En el 2010
Agente oxidante	Reactivo Jones	PCC ó PDC	Monopersulfato de potasio	Hipoclorito de sodio
Escala de obtención	10 g	1-3 g	50-100 mg	1-3 g

En la tabla anterior observamos primeramente que de pasar del uso del reactivo de Jones (ácido crómico), en el cual se usaba Cr(III) para oxidar alcoholes, al uso de PCC o PDC (Clorocromato de piridinio y Dicromato de piridinio), los cuales también contenían cromo, pero las condiciones de reacción eran suaves llegando incluso a la síntesis a temperatura ambiente. En el 2000 se deja de usar el cromo para pasar al uso de un compuesto monopersulfato de potasio (Oxone) y por último ya en el 2010 se reporta el uso de hipoclorito de sodio el cual es un compuesto menos complejo y caro que el anterior. Lo segundo que observamos es que la cantidad de obtención ha disminuido ya que la tendencia de síntesis en docencia es realizarlas a escalas cada vez más pequeñas para disminuir la cantidad de reactivos utilizadas pero sobretodo la cantidad de residuos producidos.

Es necesario cambiar los valores y principios, como único medio de subsanar las diferencias crecientes entre los países desarrollados y subdesarrollados, así como la sobreexplotación de los recursos naturales y las riquezas de las naciones, con objeto de hacer realidad la igualdad, la justicia, el entendimiento cultural y, por lo tanto, la paz, como condiciones indispensables para el logro de un desarrollo sustentable, de forma sostenida en el tiempo y en el planeta. (*Dicks, 2012*)

2.2 Evaluación de aceptabilidad ambiental de una reacción

Para poder evaluar la sustentabilidad de una síntesis orgánica es importante examinar todos sus componentes, tales como economía atómica, eficiencia de masas, consumo energético y factor de aceptabilidad ambiental, entre otros. (*Gavilán et al., 2015; Birrichaga, 2014*)

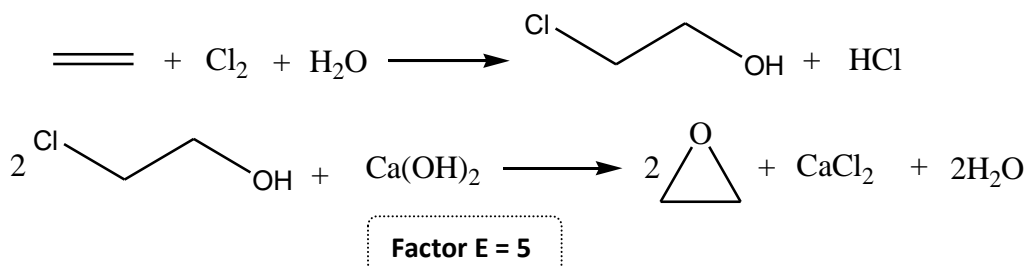
Algunos de estos componentes se desarrollan a continuación.

a) Factor de aceptabilidad ambiental

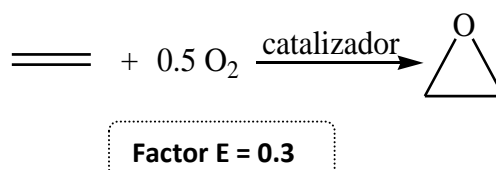
Prevenir la generación de residuos es el primer principio de la química verde. Los residuos pueden presentarse en muchas formas e impactan al ambiente dependiendo de su naturaleza, toxicidad, cantidad y la manera en que son liberados. Una medida simple de la masa de residuo por kilogramo de producto deseado en una reacción es el llamado factor de aceptabilidad ambiental (E) que es una herramienta para evaluar rápidamente si un proceso está optimizado. Este factor lo introdujo Roger Sheldon (1992). El valor deseable para este parámetro es cero y es adimensional.

$$\text{factor de aceptabilidad ambiental (E)} = \frac{\text{masa del residuo}}{\text{masa del producto deseado}} \quad \text{Ec. 1}$$

Un caso muy bien estudiado con el que es posible ilustrar cómo el factor de aceptabilidad ambiental puede variar para la misma transformación global es la síntesis del oxirano. Industrialmente el oxirano es importante en la síntesis de muchas sustancias químicas, incluyendo el etilenglicol (anticongelante), y otros glicoles, poliglicoléteres, y etanolaminas. El factor de aceptabilidad ambiental para esta síntesis en dos pasos (Esquema 1), mediante la formación de una clorohidrina como intermediario, es 5. Esto significa que por cada kilogramo de oxirano obtenido, 5 kilogramos de residuo se producen (incluyendo agua, ácido clorhídrico y cloruro de calcio (II)), los cuales claramente tienen que eliminarse. Cuando la síntesis de oxirano se modifica y se usa oxígeno y una superficie catalítica (Esquema 2), en este caso ya no se requiere cloro molecular ni hidróxido de calcio, y el valor de factor de aceptabilidad ambiental se reduce a 0.3. Esto representa una reducción significativa en la cantidad de residuo que se produce. (*Dicks, 2012*)



Esquema 1. Síntesis del oxirano en dos pasos (Dicks, 2012)



Esquema 2. Síntesis del oxirano en un solo paso (Dicks, 2012)

El factor de aceptabilidad ambiental es una medida muy útil para que los estudiantes entiendan la problemática de la generación de residuos, lo cual impulsa al desarrollo de procesos limpios y menos dañinos en la docencia experimental y la industria química. Es importante resaltar que la limitación del factor de aceptabilidad ambiental es que no identifica la naturaleza del impacto ambiental generado por los residuos, ya que no discrimina entre diferentes tipos de estos, es decir, no diferencia entre 1 kg de agua o 1 kg de hidróxido de sodio.

b) Economía atómica teórica

La economía atómica (EA) es uno de los principios de la química verde más importantes y fundamentales. Este parámetro también es conocido como la eficiencia atómica, y fue incorporada por Trost (1991). Es la medición intrínseca de la cantidad de átomos pertenecientes a las materias primas que terminan formando parte del (los) producto(s) deseados en una transformación química. Y se obtiene de la relación del peso molecular de la molécula de interés (producto) y la suma de los pesos moleculares de todos los reactivos. El valor deseable en este parámetro es de 100 y se expresa en porcentaje.

$$\% \text{ Economía atómica teórica} = \frac{\text{PM del producto deseado}}{\text{Suma de los PM de todos los reactivos}} \times 100 \quad \text{Ec. 2}$$

c) Economía atómica experimental

Es también muy importante calcular la “economía atómica experimental” usando la masa real de los reactivos y la masa teórica del producto deseado. La economía experimental está, por lo tanto, basada en la cantidad real de reactivos usados en una síntesis experimental. El valor deseable en este parámetro es de 100 y se expresa en porcentaje.

$$\% \text{ Economía atómica experimental} = \frac{\text{masa teórica del producto}}{\text{Suma de masas de todos los reactivos usados}} \times 100 \quad \text{Ec. 3}$$

d) Eficiencia de masas

Fue introducido por Curzons, et. al. (2005) y se define como el cociente entre la masa del producto obtenido y purificado dividida por la suma de las masas de todos los compuestos introducidos en la mezcla de reacción durante el experimento:

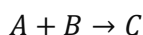
$$\text{Eficiencia de masas} = \frac{\text{masa del producto deseado}}{\text{suma de masas de entrada}} \quad \text{Ec. 4}$$

Los refrigerantes como el agua fría o el hielo, que no se mezclan con el medio de reacción no se toman en cuenta de acuerdo con la convención empleada. La eficiencia de masa tal y como se ha definido aquí es similar a la inversa del factor E (factor medioambiental). (Andraos, 2005) El valor deseable de este parámetro es de 1 y es una expresión adimensional.

e) Rendimiento teórico

Es la cantidad de producto obtenido en una reacción química, puede ser dado como la masa en gramos o moles.

Para una reacción de tipo:



$$R = ([A] \text{ moles del reactivo limitante}) \times (\text{proporción estequiometrica } \left[\frac{C}{A} \right]) \times (\text{PM del producto deseado } [C]) \quad \text{Ec. 5}$$

PM: peso molecular; unidades g/mol

f) Rendimiento experimental

Representa la efectividad de una reacción, es calculado al dividir la cantidad de producto obtenido en moles o gramos entre el rendimiento teórico en moles o gramos:

$$\%R = \left(\frac{\text{masa real del producto}}{\text{masa teorica del producto}} \right) \times 100 \quad \text{Ec. 6}$$

El valor deseable para este parámetro es 100 y se expresa en porcentaje.

g) Intensidad de masa

Está definida como la relación de la masa total usada en un proceso (paso) y la masa del producto final. (Constable y Jiménez-González, 2012). Toma en cuenta el rendimiento, la estequiometría, disolvente y los reactivos usados en la síntesis. La masa total también incluye químicos (excepto el agua) usados en procedimientos como lavados con soluciones ácidas, básicas, salinas o disolventes orgánicos, así como extracciones y/o cristalizaciones. El valor deseable del parámetro es de cero. El valor resultante es adimensional.

$$\text{Intensidad de masa} = \frac{\text{masa total usada en una síntesis (kg)}}{\text{masa del producto (kg)}} \quad \text{Ec. 7}$$

También es útil comparar la intensidad de masa (IM) con el factor de aceptabilidad ambiental, donde:

$$\text{Factor de aceptabilidad ambiental} = \text{Intensidad de masa} - 1 \quad \text{Ec. 8}$$

h). Productividad de masa

Si expresamos la intensidad de masa como su recíproco y lo convertimos en un porcentaje, es similar a la economía atómica. Es el porcentaje de materiales en una síntesis química que realmente se incorporan al producto deseado. El valor deseable del parámetro es de 100. El valor resultante es un porcentaje. (Constable y Jiménez-González, 2012)

$$\begin{aligned} \text{Productividad de masa} &= \frac{1}{\text{Intensidad de masa}} \times 100 \\ &= \frac{\text{masa del producto}}{\text{masa total usada en una síntesis}} \times 100 \end{aligned} \quad \text{Ec. 9}$$

2.3. Evaluación del riesgo

De acuerdo con la Norma Oficial Mexicana NOM-018-STPS-2000 “Sistema para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicas peligrosas en los centros de trabajo”, la cual establece la forma de identificación y clasificación de las sustancias. Las propiedades que toma en cuenta son daños a la salud, inflamabilidad y radiactividad, dándole valores en una escala de 0 a 4 para indicar el grado de peligro que presentan, siendo 4 el de mayor peligro (tabla 2).

Esta norma establece dos opciones de identificación, una en forma de rombo y otra de rectángulo, el modelo rombo coincide completamente con el sistema de identificación de materiales peligrosos establecido por la Asociación Nacional de Protección contra Incendios (National Fire Protection Association, NFPA) en el estándar NFPA 704, mientras que el modelo rectángulo concuerda con el Sistema de Identificación de Materiales Peligrosos HMIS por sus siglas en inglés (Hazardous Materials Identification System) desarrollado por la Asociación Nacional de Pinturas y Recubrimientos, ambos sistemas desarrollados en los Estados Unidos.

Los números significan:

Tabla 2. Clasificación de riesgo de acuerdo a la NOM-018-STPS-2000

Número	Salud/azul	Inflamabilidad/rojo (en base al punto de inflamabilidad)	Reactividad/amarillo
0	Sin riesgo	No inflamable	Estable
1	Ligeramente peligroso	Más de 93°C	Inestable si se calienta
2	Peligroso	Menos del 93°C	Cambio químico violento
3	Peligro extremo	Menos de 38°C	Detona con calor y/o golpe
4	Mortal	Menos de 23°C	Detona

2.4. Costo

En este aspecto se pueden evaluar los costos que implica llevar a cabo una ruta sintética, tomando en cuenta reactivos, auxiliares, el material necesario para llevar a cabo la técnica experimental, equipos requeridos, así como los costos de tratamiento o disposición de sus residuos. Sin embargo, en la presente tesis solo se cuantificarán algunos de estos aspectos.

2.5. Manejo de residuos

Conjunto de actividades realizadas en el post-consumo para disminuir el impacto ambiental de los residuos obtenidos cuando se lleva a cabo una ruta sintética.

El manejo de los residuos peligrosos incluye los procesos de minimización, reciclaje, recolección, almacenamiento, tratamiento, transporte y disposición. Actualmente, los países industrializados tienden a promover la minimización y reciclaje de los residuos peligrosos como la opción desde el punto de vista ambiental.

Alternativas para su manejo:

Hay varias alternativas para el manejo de los residuos peligrosos. Las principales son las siguientes:

- **Reciclaje:** La alternativa más productiva es la que después de un proceso específico convierte a los residuos peligrosos en materia prima que se puede utilizar después en otro proceso productivo diferente.
- **Destrucción:** También existe la opción de destruir los residuos peligrosos, al hacerlo las cenizas generadas pueden ser confinadas de una manera mucho más práctica y así ser clasificados como residuos estabilizados. Un ejemplo son medicamentos caducos o fuera de especificaciones
- **Confinamiento:** Los residuos peligrosos se estabilizan, se separan y concentran los componentes peligrosos en volúmenes reducidos y finalmente se estabilizan para evitar la generación de lixiviados.

Es importante conocer qué clase de residuos se consideran peligrosos

Son considerados como peligrosos a los remanentes que resultan de un proceso productivo, que por su composición, presentación o combinación pueda ser un peligro presente o a futuro, ya sea directa o indirectamente para la salud humana y el entorno.

La Norma Oficial Mexicana NOM-052-SEMARNAT-2005, establece las características, el procedimiento de identificación, clasificación y los listados de residuos peligrosos.

Un residuo es peligroso si se encuentra en alguno de los siguientes listados:

Listado 1: Clasificación de residuos peligrosos por fuente específica.

Listado 2: Clasificación de residuos peligrosos por fuente no específica.

Listado 3: Clasificación de residuos peligrosos resultado del desecho de productos químicos fuera de especificaciones o caducos (Tóxicos Agudos).

Listado 4: Clasificación de residuos peligrosos resultado del desecho de productos químicos fuera de especificaciones o caducos (Tóxicos Crónicos).

Listado 5: Clasificación por tipo de residuos, sujetos a Condiciones Particulares de Manejo.

Si el residuo no se encuentra en ninguno de los listados del 1 a 5 y es regulado por alguna de las siguientes Normas Oficiales Mexicanas, éste se sujetará a lo dispuesto en el Instrumento Regulatorio correspondiente.

- Los lodos y biosólidos están regulados por la NOM-004-SEMARNAT-2002.
- Los bifenilos policlorados (BPC's) están sujetos a las disposiciones establecidas en la NOM-133-SEMARNAT-2000.
- Los límites máximos permisibles de hidrocarburos en suelos están sujetos a lo definido en la NOM-138-SEMARNAT/SS-2003.
- Los jales mineros se rigen bajo las especificaciones incluidas en la NOM-141-SEMARNAT-2003.
- Los biológico-infecciosos en su manejo, están sujetos a lo establecido en la NOM-087-SEMARNAT-SSA1-2002.

Si el residuo no está listado o no cumple con las particularidades establecidas en las citadas Normas Oficiales Mexicanas, se deberá definir si es que éste presenta alguna de las características de peligrosidad (Corrosividad, Reactividad, Explosividad, Toxicidad, inflamabilidad o Biológico-Infecciosa), esta determinación se llevará a cabo mediante alguna de las opciones siguientes:

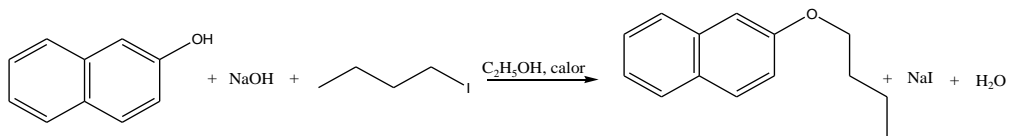
- Caracterización o análisis CRIT de los residuos junto con la determinación de las características de Explosividad y Biológico-Infeccioso.
- Manifestación basada en el conocimiento científico o la evidencia empírica sobre los materiales y procesos empleados en la generación del residuo.
- Si el generador sabe que su residuo tiene alguna de las características de peligrosidad.
- Si el generador conoce que el residuo contiene un constituyente tóxico que lo hace peligroso.
- Si el generador declara, bajo protesta de decir verdad, que su residuo no es peligroso.

La Norma Oficial Mexicana (NOM-053-SEMARNAT-1993), establece el procedimiento para llevar a cabo la prueba de extracción para determinar los constituyentes que hacen a un residuo peligroso por su toxicidad al ambiente.

2.6. Ejemplo de la evaluación de factor de aceptabilidad ambiental y los conceptos relacionados

Un ejemplo típico de un experimento a nivel licenciatura involucra la conversión del 2-naftol a 2-naftilbutiléter usando hidróxido de sodio y 1-yodobutano, mediante una síntesis de éteres de Williamson, se requiere mezclar 0.56g de hidróxido de sodio y 1.0g de 2-naftol en 20 mL de etanol, seguido de reflujo, se agregan 1.62g (1.0 mL) de 1-iodobutano, después de calentamiento adicional, el producto se precipita en un baño hielo-agua. La masa máxima del producto reportada por los estudiantes es de 1.29g. Una vez planteada la ecuación balanceada de la reacción pueden ser calculados, el porcentaje de rendimiento, el porcentaje de la economía atómica teórica, el porcentaje de la economía atómica experimental, la eficiencia total de reacción, y el factor de aceptabilidad ambiental, pueden ser calculados.

A continuación se presenta una reacción que proporciona algunas ideas útiles en el uso de los principios de la química verde. (Birrichaga, 2014)



Masa molar (g/mol): 144.17 (1.0g) 40.0 (0.56g) 184.02 (1.62g) 200.28 (1.29g) 149.89 18.02

$$1\text{g de 2 - naftol} \times \left(\frac{1 \text{ mol de 2 - naftol}}{144.17\text{g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de 1 - yodobutano}}{1 \text{ mol de 2 - naftol}} \right) \times \left(\frac{184.02 \text{ g}}{1 \text{ mol de 1 - yodobutano}} \right) = 1.28 \text{ g de 1 - yodobutano}$$

∴ el 2 - naftol es el reactivo limitante

$$1\text{g de 2 - naftol} \times \left(\frac{1 \text{ mol de 2 - naftol}}{144.17\text{g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de 2 - naftilbutileter}}{1 \text{ mol de 2 - naftol}} \right) \times \left(\frac{200.28 \text{ g}}{1 \text{ mol de 2 - naftilbutileter}} \right) = 1.39 \text{ g de 2 - naftilbutileter}$$

Rendimiento teórico = 1.39 g de 2 - naftilbutileter

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{1.29 \text{ g}}{1.39 \text{ g}} \times 100 = 93\%$$

$$\% \text{ Economía atómica teórica} = \frac{200.28 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{144.17 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 40.0 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 184.02 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 54\%$$

$$\% \text{ Economía atómica experimental} = \frac{1.39 \text{ g}}{1.0\text{g} + 0.56\text{g} + 1.62\text{g}} = 44\%$$

Eficiencia total de reacción = 95% × 43% = 41%

$$\text{Factor de aceptabilidad ambiental} = \frac{(1.0 \text{ g} + 0.56\text{g} + 1.62 \text{ g}) - 1.29\text{g}}{1.29\text{g}} = 1.5$$

$$\text{Eficiencia de masa} = \frac{1.29\text{g}}{3.18} = 0.77$$

$$\text{Intensidad de masa} = \frac{4.47\text{g}}{1.29\text{g}} = 3.46$$

$$\text{Productividad de masa} = \frac{1.29\text{g}}{4.47\text{g}} \times 100 = 28.86$$

2.7. Objetivo general

Diseñar una estrategia para la evaluación del factor de aceptabilidad ambiental para la enseñanza experimental bajo la perspectiva de la sustentabilidad.

2.8. Objetivos particulares

- Realizar la selección de experimentos que se lleven a cabo en los cursos de química en los que sea factible realizar la evaluación de distintos parámetros ambientales y económicos.
- Evaluar el factor de aceptabilidad ambiental de los experimentos seleccionados.
- Proponer experimentos que puedan complementar la evaluación de aceptabilidad en los cursos de química.
- Implementar en un curso experimental la estrategia de evaluación.

Metodología

3.1 Selección de experimentos

Para el estudio se seleccionaron una serie de experimentos que se apegan a los cursos experimentales de Química Orgánica, que forman parte del plan de estudios de las carreras de Ingeniería Bioquímica Industrial e Ingeniería de los Alimentos, que se imparten en la Universidad Autónoma Metropolitana unidad Iztapalapa. Para lo cual se obtuvo una matriz con las prácticas y se seleccionaron aquellas que pudieran representar el enfoque de aceptabilidad ambiental (tabla 3).

Tabla 3. Matriz de experimentos de los cursos de laboratorio de Química Orgánica I y II con potencial para la evaluación del factor de aceptabilidad ambiental. (Elaboración propia, 2016)

	Experimento de estudio	Evaluación de la técnica tradicional	Comparación de la técnica tradicional con la técnica alternativa	Propuesta de nueva síntesis
1	Deshidratación del ciclohexanol. Reacción de eliminación E1			
2	Isomerización de ácido maléico			
3	Obtención del cloruro del <i>ter</i> -butilo			
4	Oxidación del ciclohexanol			
5	Obtención de ácido fenoxiacético por la síntesis de Williamson			
6	Obtención de acetato de β -naftilo			
7	Síntesis de la aspirina			
8	Reacción de Cannizzaro: Obtención de alcohol bencílico y ácido benzoico			
9	Síntesis de la <i>p</i> - Nitroanilina en tres etapas. Preparación de Acetanilida			
10	Preparación de un azocompuesto. Anaranjado de metilo			
11	Formación de osazonas			
12	Obtención de un éster. Salicilato de metilo			
13	Destilación simple y determinación del punto de ebullición			
14	Síntesis de <i>p</i> -Nitrofenol			
15	Adición de yodo a dobles enlaces C=C			
16	Síntesis de paracetamol en dos etapas.			
17	Saponificación. Hidrólisis de glicéridos			
18	Identificación de grupos funcionales orgánicos			
19	Síntesis del cloruro de <i>n</i> -butilo			
20	Grupo carbonilo : síntesis de <i>n</i> -butiraldehído a partir de <i>n</i> -butanol			
21	Obtención de un aldehído. Síntesis de <i>o</i> -hidroxibenzaldehído			
22	Síntesis de borneol por reducción del alcanfor			

Tabla 3. Continuación

	Experimento de estudio	Evaluación de la técnica tradicional	Comparación de la técnica tradicional con la técnica alternativa	Propuesta de nueva síntesis
23	Síntesis de un heterociclo: obtención de 3,5-dimetilpirazol			
24	Síntesis del acetato de isoamilo (éster)			
25	Obtención de un detergente por micrométodo			
26	Síntesis de fluoresceína: emisión y absorción de luz			
27	Síntesis de una amida. Adición nucleofílica sobre un derivado del ácido carboxílico			
28	Síntesis malónica. Obtención del ácido hexanoico			
29	Síntesis y propiedades del luminol o 3-aminofthalhidricida			
30	Obtención del furfural a partir de material residual			
31	Obtención de benzocaína			

Al final se eligieron los 9 experimentos en la modalidad marcada con color rojo (tabla anterior) y los potenciales de evaluación son los siguientes (Tabla 4).

Tabla 4. Matriz de experimentos con potencial para la evaluación de aceptabilidad ambiental (Elaboración propia, 2016)

	Experimento de estudio	Potencial de evaluación
1	Síntesis de ácido fumárico	Síntesis a temperatura ambiente
2	Síntesis de aspirina	Síntesis a temperatura ambiente
3	Síntesis de paracetamol	Disminución de pasos intermedios
4	Síntesis de un éster	Disminución de pasos intermedios
5	Deshidratación del ciclohexanol	Uso de resina como catalizador
6	Síntesis de un azocompuesto	La técnica tradicional es a temperatura ambiente
7	Síntesis de borneol	El subproducto se genera en mayor proporción.
8	Síntesis de benzoína	Uso del cianuro de sodio como catalizador
9	Síntesis de furfural	Obtención a partir de material residual

3.2 Evaluación de la sustentabilidad

Para cada ruta de síntesis se calcularon los siguientes factores:

a) Parámetros ambientales de evaluación

Tabla 5. Parámetros ambientales de evaluación. (Elaboración propia, 2016).

Parámetro	Fórmula	Valor deseable
Economía atómica teórica	$\% \text{ EAt} = \frac{\text{PM del producto deseado}}{\text{Suma de los PM de todos los reactivos}} \times 100$	100%
Economía atómica experimental	$\% \text{ EAe} = \frac{\text{masa teorica del producto deseado}}{\text{suma de masas de entrada}} \times 100$	100%
Eficiencia de masas	$\text{EM} = \frac{\text{masa exp. del producto deseado}}{\text{suma de masas de entrada}}$	1
Factor de aceptabilidad ambiental	$\text{E} = \frac{\text{masa del residuo}}{\text{masa del producto deseado}}$	0
Intensidad de masa	$\text{IM} = \frac{\text{masa total usada en una síntesis (kg)}}{\text{masa del producto (kg)}}$	0
Productividad de masa	$\text{PM} = \frac{1}{\text{Intensidad de masa}} \times 100$	100%

b) Evaluación del riesgo

Para el caso de los laboratorios de docencia fue factible implementar la norma de comunicación de riesgo mediante la siguiente estrategia (Gavilán et al. 2006).

Primer paso. Identificar la reacción a llevar a cabo en el experimento

Segundo paso. Hacer una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Tercer paso. Identificar los códigos de riesgo de cada reactivo

Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identificar qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad.

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordar de mayor a menor.

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento.

c) Costo

Los costos que implicó llevar a cabo una ruta sintética, tomando en cuenta reactivos, materias auxiliares, así como los costos de tratamiento o disposición de sus residuos.

Para homologar los precios se tomaron de:

Reactivos

- Merck Millipore

Dado que el material se encuentra disponible en los laboratorios de docencia de la UAM-Iztapalapa no se tomó en cuenta para el cálculo de los costos por equipo por práctica.

d) Manejo de residuos

La evaluación de este punto se realizó en base a la suma de factores y actividades necesarios para tratar cada uno de los residuos en cada técnica experimental, donde cada uno de estas operaciones unitarias es equivalente a 1, excepto los valores de destino final donde drenaje/ basura valen 1, incineración 2 y confinamiento 3 (Tabla 5).

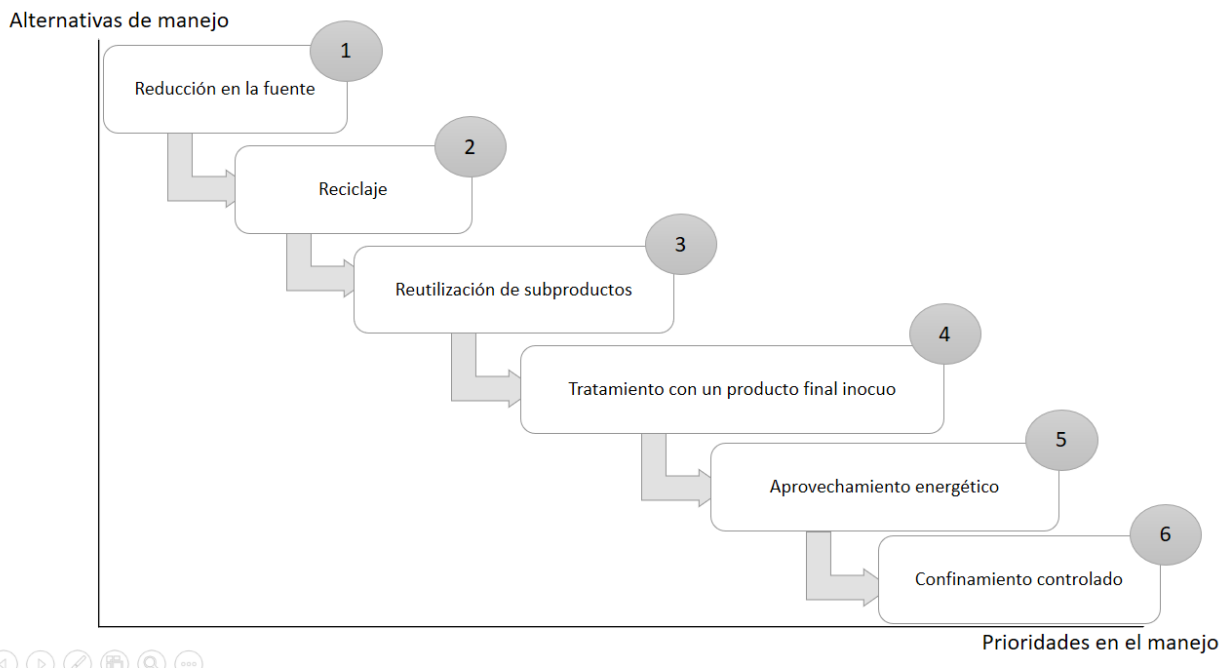
Tabla 6. Ponderación de manejo de residuos. (Elaboración propia, 2016).

Nombre del experimento		
Residuo		
Clasificación		
Equipo de protección	Bata	
	Lentes	
	Guantes	
	Mascarilla	
Tratamientos físicos	Separación de fases	
	Sedimentación	
	Filtración	
	Adsorción con carbón activado	
	Destilación	
	Secar y evaporar	
Tratamientos químicos	Extracción	
	Neutralización	
	Precipitación química	
	Floculación química	
	Oxidación	
Destino final	Reducción	
	Drenaje/basura	
	Incineración	

	Confinamiento	
TOTAL		0

Esta ponderación se propuso basándose en las prioridades ambientales en el manejo de residuos, que se pueden observar en el siguiente diagrama, originalmente fue publicada por primera vez en el Acta de Prevención de la Contaminación (Pollution Prevention Act.) del año de 1990 y se presentó como “Pirámide de manejo de residuos”. Esta fue desarrollada por la Agencia para la Protección Ambiental (EPA- Environmental Protection Agency) de los Estados Unidos de Norteamérica. El gráfico ilustra el orden apropiado en que se deben manejar los residuos, con el fin de obtener resultados de menor impacto negativo para el medio ambiente.

Figura 1. Prioridades ambientales en el manejo de residuos. (Elaboración propia, 2016).



Las distintas alternativas de manejo están orientadas en primer lugar, a incentivar la reducción en la fuente del volumen de residuos generados; siguiendo con el aprovechamiento y transformación de los subproductos para reincorporarlos a diferentes procesos de producción (excepto el uso como combustible alternativo); posteriormente se establece la compactación o disminución de volumen y de emisiones a través de diversos procesos; y, finalmente, confinamiento controlado. Esta sería la forma ideal del manejo de residuos.

3.3 Implementación de la estrategia en un curso de docencia de la UAM-I

Se probaron 3 técnicas experimentales, síntesis de ácido acetilsalicílico, síntesis de p-hidroxiacetanilida y síntesis de ácido fumárico, las dos primeras se probaron en 2 diferentes grupos de laboratorio de química orgánica II, mientras que la última se probó en 3 grupos de laboratorio de química orgánica I. Estas técnicas experimentales seleccionadas se probaron a través del uso de protocolos que contenían los factores de evaluación ambiental mediante el cual los estudiantes reforzaran el concepto de sustentabilidad a través de su trabajo experimental.

Secciones del protocolo experimental

- I. Nombre del experimento
- II. Reacción
- III. Mecanismo
- IV. Tipo de reacción: Sustitución, eliminación, adición, etc.
- V. Técnicas experimentales aplicables: Reflujo, destilación simple, filtración, recristalización, etc.
- VI. Reactivos y productos:
 - a. Cantidad (masa molecular)
 - b. Código de riesgo
 - c. Reactividad
 - d. Toxicidad
- VII. Equipo requerido
- VIII. Procedimiento y diagrama del proceso
- IX. Evaluación
 - a. Economía atómica
 - b. Rendimiento
 - c. Masa del producto deseado
 - d. Suma de las masas de entrada
 - e. Eficiencia de masas
 - f. Factor de aceptabilidad ambiental E (g residuos / g producto)

Los protocolos usados en la implementación de la estrategia se presentan en los anexos 1,2 y 3.

Después de implementar la estrategia en los grupos de docencia experimental se compararon los valores de los parámetros obtenidos por cada grupo para cada técnica y los valores obtenidos en la evaluación de la sustentabilidad que se presenta en el escrito para certificar su reproducibilidad por los alumnos.

Se realizaron encuestas de respuesta cerrada para conocer la percepción de los alumnos, en donde se probaron las técnicas anteriormente analizadas, y mediante el uso de tablas de frecuencia se analizaron las respuestas por carrera.



Posgrado en Energía y Medio Ambiente

Universidad Autónoma Metropolitana



Fecha:

Carrera:

Trimestre en que ingresaron a la UAM:

Trimestre:

UEA:

Grupo:

Lea cuidadosamente cada pregunta, seleccione y justifique la respuesta que usted considera aplica en cada caso.

Pregunta	Sí	No	No se	Justificación
<i>¿Es importante conocer los parámetros de economía atómica teórica y experimental, factor de aceptabilidad, eficiencia de masas para la realización de una práctica?</i>				
<i>¿Consideras que el formato del protocolo está más completo que los que has utilizado?</i>				
<i>¿Es la primera vez que escuchas el concepto de aceptabilidad ambiental?</i>				
<i>¿Los códigos de riesgo que vienen en el protocolo te permiten tomar medidas adicionales a la hora de realizar el experimento?</i>				
<i>Si tuvieras 2 alternativas para la síntesis de un mismo producto, una usando mechero pero con menos rendimiento y menor consumo energético, y con microondas con mayor rendimiento y mayor gasto energético. ¿Será suficiente esta información para que tú selecciones una de las rutas?</i>				

Resultados

A continuación se desarrollan las técnicas experimentales de estudio así como los cálculos de la evaluación cuantitativa de cada una de estas. Para consultar el procedimiento completo y los materiales necesarios ver el anexo 4.

4.1 Síntesis de ácido fumárico

Esta reacción se lleva a cabo en los laboratorios de docencia de Química Orgánica I, es una reacción de isomerización, específicamente de la síntesis de ácido fumárico a partir de anhídrido maléico o isomerización de ácido maléico. Se trata de la hidrólisis de un anhídrido en medio ácido para dar el diácido *cis*, éste se isomeriza posteriormente obteniéndose el diácido *trans*.

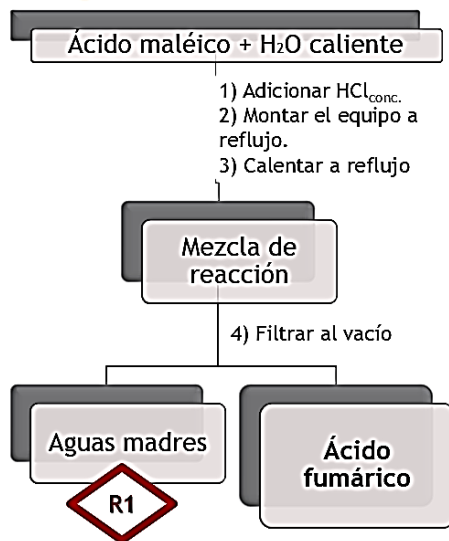
Las técnicas experimentales que se realizaron se presentan en la tabla 6. Donde la técnica alternativa se puede realizar únicamente con la presencia de energía solar.

Tabla 7. Resumen de las técnicas experimentales de la reacción de síntesis del ácido fumárico. (Elaboración propia, 2016).

Técnica tradicional	Técnica alternativa
Tiempo de reacción: 1 h	Tiempo de reacción: 15 min
En un matraz de bola de una boca de 50 mL colocar 1 g de anhídrido maléico y disolver en 2 mL de agua caliente. Después agregar poco a poco 2.5 mL de ácido clorhídrico concentrado	Preparar solución saturada de ácido maléico. Pesar 3.75 g de ácido maléico y agregar lentamente 5 mL de agua destilada hasta disolver
Colocar el refrigerante en posición de reflujo y calentar a ebullición con agitación magnética durante 1 hora. Los cristales de ácido fumárico se formarán en el seno de la reacción	En un matraz aforado de 25 mL coloque 5 mL de la solución saturada de ácido maléico
Al término del reflujo enfriar el matraz con agua y filtrar al vacío	Agregar lentamente 2 gotas de bromo. Exponer el matraz a la luz del sol hasta la aparición de cristales
Recristalizar de una solución de ácido clorhídrico al 10%.	Detener la reacción cuando no se observe más la formación de cristales
Pesar y determinar el punto de fusión del producto y compararlo con el de la materia prima	Filtrar al vacío y recristalice el producto de agua

4.1.1. Técnica tradicional

A continuación se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica tradicional y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.



R1: Desechar neutro

Tabla 8. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

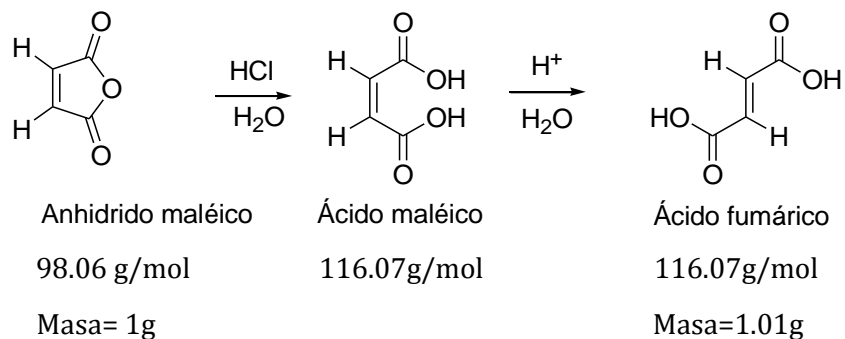
Reactivo	Cantidad
Anhídrido maléico	1.0 g
Ácido clorhídrico concentrado	2.5 mL
Agua	2 mL

Tabla 9. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Anhídrido maléico	3	1	1	B
Ácido clorhídrico concentrado	3	0	1	B

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



$$\begin{aligned}
 & 1\text{g de anhídrido maléico} \times \left(\frac{1 \text{ mol de anhídrido maléico}}{98.06 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de ác maléico}}{1 \text{ mol de anhídrido maléico}} \right) \\
 & \times \left(\frac{1 \text{ mol de ác fumárico}}{1 \text{ mol de ác maléico}} \right) \times \left(\frac{116.07 \text{ g}}{1 \text{ mol de ác fumárico}} \right)
 \end{aligned}$$

= 1.18 g de ácido fumárico

∴ Rendimiento teórico = 1.18 g de ácido fumárico

$$\% \text{Rendimiento} = \frac{1.01 \text{ g}}{1.18 \text{ g}} \times 100 = 84.9\%$$

$$\% \text{EAt} = \frac{116.07 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{98.06 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 18.01 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 100\%$$

$$\% \text{EAe} = \frac{1.18 \text{ g}}{1.0 \text{ g} + 1.998} \times 100 = 39.36\%$$

$$\% \text{ETR} = 84.9\% \times 39.36\% = 33.42\%$$

$$E = \frac{3.232 \text{ g}}{1.01 \text{ g}} = 3.2$$

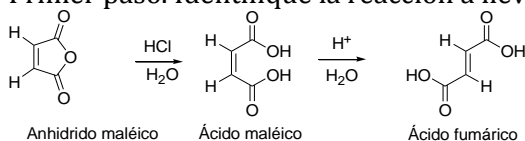
$$EM = \frac{1.01 \text{ g}}{5.9} = 0.2$$

$$IM = \frac{0.0059 \text{ kg}}{0.001011 \text{ kg}} = 5.84$$

$$PM = \frac{0.001011 \text{ kg}}{0.0059 \text{ kg}} \times 100 = 17.14\%$$

Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



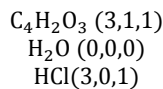
Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:



Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:



Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	C ₄ H ₂ O ₃ y HCl
Inflamabilidad	C ₄ H ₂ O ₃
Reactividad	C ₄ H ₂ O ₃ y HCl

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
HCl	2.5 mL
H ₂ O	2 mL
C ₄ H ₂ O ₃	1 g

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- Por volumen
HCl
- Por riesgo potencial
C₄H₂O₃

Gasto energético

Datos de la canastilla:

- 171 Watts

Tiempo de calentamiento:

- 1 hora a reflujo

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(J) = P(W) \times t(s)$$

$$E = 171 W \times 3600s$$

$$E = 615600 J = \mathbf{615.6 kJ}$$

Costo

Tabla 10. Calculo del costo de la técnica tradicional de la síntesis del ácido fumárico. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de ácido fumárico (Tradicional)				
		Costo(\$)/unidad (1Kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	Anhídrido maléico	838	1 g	0.838
	Ácido clorhídrico	58	2.5 mL	0.145
	Agua destilada	31	2 mL	0.062
Auxiliar	Ácido clorhídrico 10%	20	50 mL	1.000
Residuos	Hidróxido de sodio al 50%	90	2.5 mL	0.225
Total				2.270

Manejo de residuos

Tabla 11. Evaluación del manejo de residuos de la técnica tradicional de la síntesis del ácido fumárico. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de ácido fumárico (Tradicional)		
Residuo	Aguas madres acidas	
Clasificación	corrosivo y reactivo	
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	0
	Secar y evaporar	0
Tratamientos químicos	Extracción	0
	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
Destino final	Reducción	0
	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
TOTAL		5
Confinamiento		0

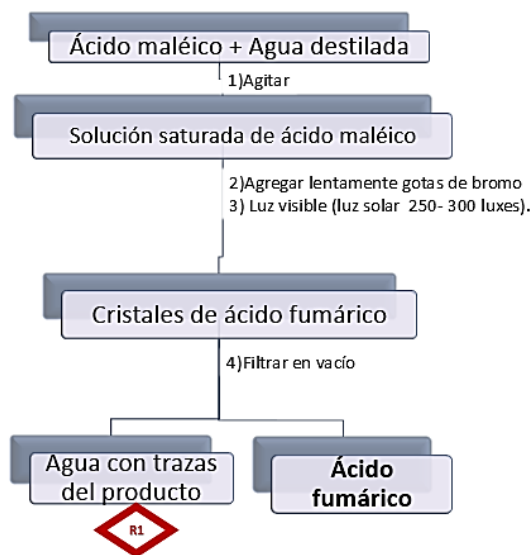
Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 11).

Tabla 12. Resultados de la síntesis de ácido fumárico mediante la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		# de experimento				Promedio
		1	2	3	4	
Economía atómica teórica (%)		100	100	100	100	100
Economía atómica experimental (%)		39.36	39.36	39.36	39.36	39.36
Rendimiento experimental (%)		84.9	84.5	88.20	88.60	86.55
Eficiencia de masas		0.2	0.20	0.20	0.20	0.20
Factor de aceptabilidad ambiental		3.20	3.20	3.20	3.20	3.20
Intensidad de masa		5.84	6.00	5.84	5.84	5.88
Productividad de masa		17.14	16.68	17.14	17.14	17.02
Evaluación de riesgo	Por volumen	HCl				HCl
	Por riesgo	C ₄ H ₂ O ₃				C₄H₂O₃
Gasto energético		615.6 kJ				615.6 kJ
Costo (\$)		2.27				2.27
Manejo de residuos		5				5

4.1.2. Técnica alternativa

A continuación se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica alternativa y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.



R1: Agregar bisulfito de sodio, neutralizar y desechar.

Tabla 13. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

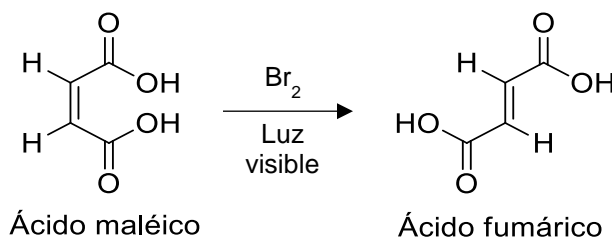
Reactivo	Cantidad
Ácido maléico	3.75 g
Agua destilada	5 mL
Bromo	3 gotas

Tabla 14. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Ácido maléico	2	1	0	A
Bromo	3	0	3	B

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



$$116.07 \text{ g/mol} \qquad 116.07 \text{ g/mol}$$

$$\text{Masa} = 3.75 \text{ g} \qquad \text{Masa} = 3.53 \text{ g}$$

$$3.75 \text{ g de } \text{ác maléico} \times \left(\frac{1 \text{ mol de } \text{ác maléico}}{116.07 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de } \text{ác fumárico}}{1 \text{ mol de } \text{ác maléico}} \right) \times \left(\frac{116.07 \text{ g}}{1 \text{ mol de } \text{ác fumárico}} \right)$$

$$= 3.75 \text{ g de } \text{ác fumárico}$$

∴ Rendimiento teórico = 3.75 g de ácido fumárico

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{3.53 \text{ g}}{3.75 \text{ g}} \times 100 = 94.1\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{116.07 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{116.07 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 100\%$$

$$\% \text{ EAe} = \frac{3.75 \text{ g}}{3.75 \text{ g}} \times 100 = 100\%$$

$$\% \text{ ETR} = 94.1\% \times 100\% = 94.1\%$$

$$E = \frac{1.765 \text{ g}}{3.53 \text{ g}} = 0.5$$

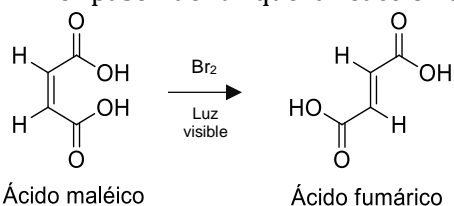
$$EM = \frac{3.53 \text{ g}}{8.85 \text{ g}} = 0.4$$

$$IM = \frac{0.00885 \text{ kg}}{0.00353 \text{ kg}} = 2.51$$

$$PM = \frac{0.00353 \text{ kg}}{0.00885 \text{ kg}} \times 100 = 33.89\%$$

Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



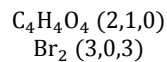
Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:



Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:



Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	Br ₂
Inflamabilidad	C ₄ H ₄ O ₄
Reactividad	Br ₂

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
C ₄ H ₄ O ₄	3.75 g
Br ₂	4 gotas

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- a. Por volumen
C₄H₄O₄
- b. Por riesgo potencial
Br₂

Gasto energético

Tiempo de exposición:

- 20 minutos

El flujo luminoso (Φ_v) en lumens (lm) es igual a 0.09290304 veces la iluminancia (E_v) en luxes (lx) por la superficie de área (A) en pies cuadrados (ft²):

$$\Phi_v(\text{lm}) = 0.09290304 \times E_v(\text{lx}) \times A(\text{ft}^2)$$

La potencia (P) en watts (W) es igual al flujo luminoso (Φ_v), dividido por la eficacia luminosa (η) en lumens por watt (lm/W):

$$P(\text{W}) = \Phi(\text{lm}) / \eta \left(\frac{\text{lm}}{\text{W}} \right)$$

Entonces la potencia (P) es igual a 0.09290304 veces la iluminancia (E_v) por la superficie de área (A), dividida por la eficacia luminosa (η):

$$P(\text{W}) = 0.09290304 \times E_v(\text{lx}) \times \frac{A(\text{ft}^2)}{\eta(\text{lm/W})}$$

Si consideramos:

$$E_v = 300 \text{ lx}$$

$$\eta = 93 \text{ lm/W (Murphy, 2011)}$$

$$A=0.0016\text{m}^2=0.01722\text{ft}^2$$

Entonces:

$$P = 0.09290304 \times 300 \text{ lx} \times \frac{0.01722\text{ft}^2}{93 \frac{\text{lm}}{\text{W}}}$$

$$P = 5.16 \times 10^{-3} \text{ Watts}$$

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(J) = P(W) \times t(s)$$

$$E = 5.16 \times 10^{-3} \text{ W} \times 1200\text{s}$$

$$E = 6.192 \text{ J}$$

Costo

Tabla 15. Cálculo del costo de la técnica alternativa de la síntesis del ácido fumárico. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de ácido fumárico (Alternativa)				
		Costo (\$)/unidad(1Kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	Ácido maléico	1319	3.75 g	4.950
	Bromo	3770	3 gotas	3.770
Auxiliar	Agua destilada	31	5 mL	0.155
Residuos	Bisulfito de sodio	65	10 g	0.650
	Hidróxido de sodio al 50%	90	2.5 mL	0.225
Total				9.750

Manejo de residuos

Tabla 16. Evaluación del manejo de residuos de la técnica alternativa de la síntesis del ácido fumárico. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de ácido fumárico (Alternativa)		
Residuo		Agua, bromo y trazas del producto
Clasificación		corrosivo y reactivo
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0

	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	0
	Secar y evaporar	0
	Extracción	0
Tratamientos químicos	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
	Reducción	1
Destino final	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
	Confinamiento	0
TOTAL		6

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 17).

Tabla 17. Resultados de la síntesis de ácido fumárico mediante la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		# de experimento				Promedio
		1	2	3	4	
Economía atómica teórica (%)		100.00	100.00	100.00	100.00	100.00
Economía atómica experimental (%)		42.00	42.00	42.00	42.00	42.00
Rendimiento experimental (%)		94.1	88.4	93.80	97.30	93.40
Eficiencia de masas		0.4	0.40	0.40	0.40	0.40
Factor de aceptabilidad ambiental		0.50	0.90	1.00	0.70	0.78
Intensidad de masa		2.47	2.63	2.49	2.39	2.50
Productividad de masa		40.40	37.96	40.10	41.78	40.06
Evaluación de riesgo	Por volumen	CH ₃ COOH				CH₃COOH
	Por riesgo	Br ₂				Br₂
Gasto energético		6.192J				6.192J
Costo (\$)		9.75				9.75
Manejo de residuos		6				6

4.2. Síntesis de aspirina

Esta reacción se lleva a cabo en los laboratorios de docencia de Química Orgánica II, por tratamiento del ácido salicílico con anhídrido acético se obtiene el ácido acetilsalicílico, un compuesto tan eficaz como el salicilato sódico, pero de reducidos efectos secundarios.

El ácido acetilsalicílico es un éster de ácido acético y ácido salicílico (este último actúa como "alcohol"). Aunque se pueden obtener ésteres de ácido por interacción directa del ácido acético con un alcohol o un fenol, se suele usar un sustituto del ácido acético, anhídrido acético, como agente acetilante. Éste permite producir ésteres de acetato con velocidad mucho mayor, que por la acción directa del ácido acético. La reacción que tiene lugar es:

Para poder comprender las diferencias entre las técnicas experimentales a continuación se presenta un resumen de ellas en la siguiente tabla (tabla 18)

Tabla 18. Resumen de las técnicas experimentales de la reacción de síntesis de la aspirina.

Técnica tradicional	Técnica alternativa
Tiempo de reacción: 15 min	Tiempo de reacción: 15 min
En un matraz bola de 10 mL colocar 2 g de ácido salicílico, 5 mL de anhídrido acético y 2 gotas de ácido sulfúrico concentrado.	En un vaso de precipitados de 50 mL coloque 0.56 g de ácido salicílico y 1.2 mL de anhídrido acético y mezclar bien.
Agitar manualmente con cuidado hasta que el ácido salicílico se disuelva.	Adicione 2.4 g de carbonato de sodio a la mezcla y agite nuevamente con la varilla de vidrio por 10 minutos.
Calentar a reflujo durante 15 minutos y al término del reflujo enfriar el matraz en baño de hielo hasta que se produzcan cristales.	Adicione lentamente 6 mL de agua destilada y posteriormente una disolución de ácido clorhídrico al 50% hasta que el pH de la disolución sea de 3.
Añadir 50 mL de agua fría y filtrar al vacío.	Enfriar la disolución en un baño de hielo y filtrar al vacío.

4.2.1. Técnica tradicional

A continuación se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica tradicional y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.

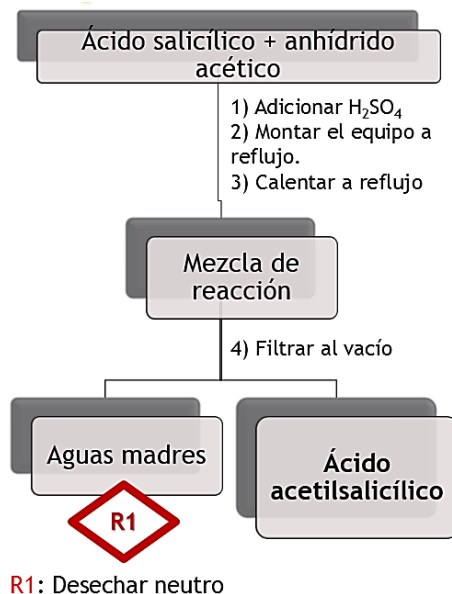


Tabla 19. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

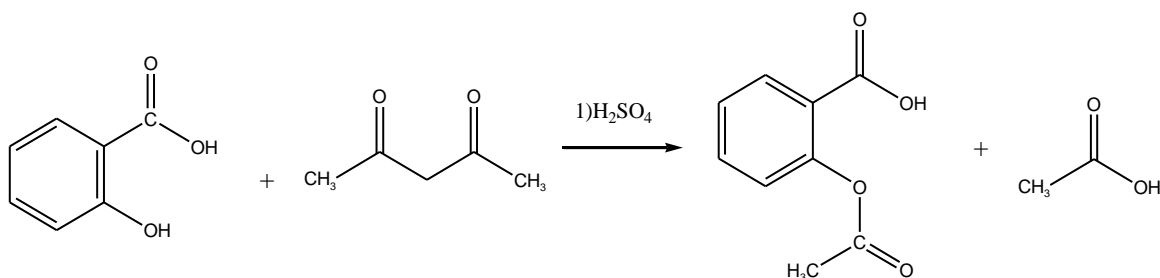
Reactivo	Cantidad
Ácido salicílico	2 g
Anhídrido acético	5 mL
Ácido sulfúrico concentrado	2 gotas

Tabla 20. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Ácido salicílico	0	1	0	A
Anhídrido acético	3	2	1	B
Ácido sulfúrico concentrado	3	0	2	B

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



Ácido salicílico

138.12 g/mol

Masa= 2g

anhídrido acético

102.09g/mol

Volumen=5 mL

ácido acetilsalicílico

180.16 g/mol

Masa=1.857 g

$$2 \text{ g de } \acute{\text{a}}\text{c salicílico} \times \left(\frac{1 \text{ mol de } \acute{\text{a}}\text{c salicílico}}{138.12 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de } \acute{\text{a}}\text{c acetilsalicílico}}{1 \text{ mol de } \acute{\text{a}}\text{c salicílico}} \right) \times \left(\frac{180.16 \text{ g}}{1 \text{ mol de } \acute{\text{a}}\text{c acetilsalicílico}} \right)$$

$$= 2.61 \text{ g de } \acute{\text{a}}\text{c acetilsalicílico}$$

$$5 \text{ mL de anhídrido acético} \times \left(\frac{1.08 \text{ g}}{\text{mL}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de anhídrido acético}}{102.09 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de } \acute{\text{a}}\text{c acetilsalicílico}}{1 \text{ mol de anhídrido acético}} \right)$$

$$\times \left(\frac{180.16 \text{ g}}{1 \text{ mol de } \acute{\text{a}}\text{c acetilsalicílico}} \right)$$

$$= 9.53 \text{ g de } \acute{\text{a}}\text{c acetilsalicílico}$$

∴ el ácido salicílico es el reactivo limitante

Rendimiento teórico = 2.61 g de ácido acetilsalicílico

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{1.857 \text{ g}}{2.61 \text{ g}} \times 100 = 71.15\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{180.16 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{138.12 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 102.09 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 75\%$$

$$\% \text{ EAe} = \frac{2.61 \text{ g}}{2 \text{ g} + 5.4 \text{ g}} \times 100 = 35.27\%$$

$$\% \text{ ETR} = 71.15\% \times 75\% = 53.36\%$$

$$E = \frac{2.584 \text{ g}}{1.857 \text{ g}} = 1.39$$

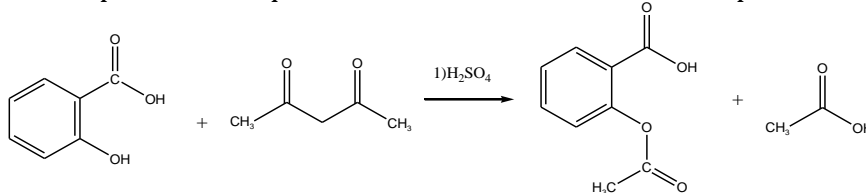
$$EM = \frac{1.857 \text{ g}}{7.4 \text{ g}} = 0.25$$

$$IM = \frac{0.0074 \text{ kg}}{0.00186 \text{ kg}} = 3.98$$

$$PM = \frac{0.00186 \text{ kg}}{0.0074 \text{ kg}} \times 100 = 25.13\%$$

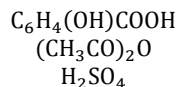
Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



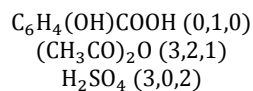
Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:



Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:



Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	H ₂ SO ₄ y (CH ₃ CO) ₂ O
Inflamabilidad	(CH ₃ CO) ₂ O
Reactividad	H ₂ SO ₄

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
(CH ₃ CO) ₂ O	5 mL
C ₆ H ₄ (OH)COOH	2 g
H ₂ SO ₄	2 gotas

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- a. Por volumen
(CH₃CO)₂O
- b. Por riesgo potencial
H₂SO₄

Gasto energético

Datos de la parrilla:

- 120 V, 3.2A, 50/60Hz

Tiempo de calentamiento:

- 15 minutos

La potencia (P) en watts (W) es igual al voltaje (V) en volts (V) por la corriente (I) en amperes (A).

$$P(W) = V(V) \times I(A)$$

$$P = 120 V \times 3.2 A$$

$$P = 384 W$$

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(J) = P(W) \times t(s)$$

$$E = 384 W \times 900s$$

$$E = 345600 J = 345.6 kJ$$

Costo

Tabla 21. Cálculo del costo de la técnica tradicional de la síntesis del ácido acetilsalicílico. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de aspirina (Tradicional)				
		Costo (\$)/unidad (1kg o 1L)	Cantidad	Costo real
Materia prima	Ácido salicílico	902	2 g	1.804
	Anhídrido acético	418	5 mL	2.090
Auxiliar	Ácido sulfúrico conc.	513	2 gotas	0.513
Residuos	Hidróxido de sodio al 50%	90	5 mL	0.450
Total				4.857

Manejo de residuos

Tabla 22. Evaluación del manejo de residuos de la técnica alternativa de la síntesis del ácido acetilsalicílico. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de aspirina (Tradicional)		
Residuo		Aguas madres acidas
Clasificación		corrosivo y reactivo
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	0
	Secar y evaporar	0
	Extracción	0
Tratamientos químicos	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
	Reducción	0
Destino final	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
	Confinamiento	0
TOTAL		5

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 23).

Tabla 23. Resultados de la síntesis de aspirina mediante la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		# de experimento			Promedio
		1	2	3	
Economía atómica teórica (%)		75.00	75.00	75.00	75.00
Economía atómica experimental (%)		35.27	35.27	35.27	35.27
Rendimiento experimental (%)		71.15	40.34	40.61	50.70
Eficiencia de masas		0.25	0.14	0.14	0.18
Factor de aceptabilidad ambiental		1.39	26.20	26.02	17.87
Intensidad de masa		3.98	7.03	6.98	6.00
Productividad de masa		25.09	14.23	14.32	17.88
Evaluación de riesgo	Por volumen	(CH ₃ CO) ₂ O			(CH₃CO)₂O
	Por riesgo	H ₂ SO ₄			H₂SO₄
Gasto energético		345.6 kJ			345.6 kJ
Costo (\$)		4.857			4.857
Manejo de residuos		5			5

4.2.3. Técnica alternativa

A continuación se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica alternativa y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.

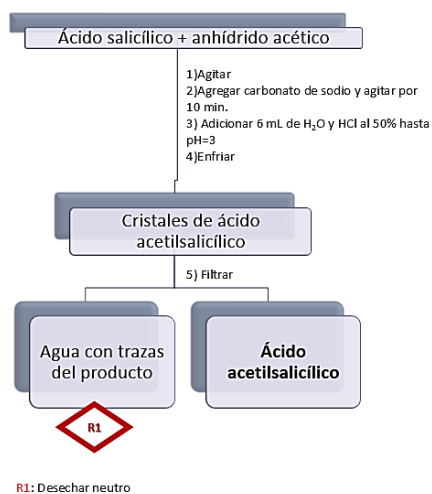


Tabla 24. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

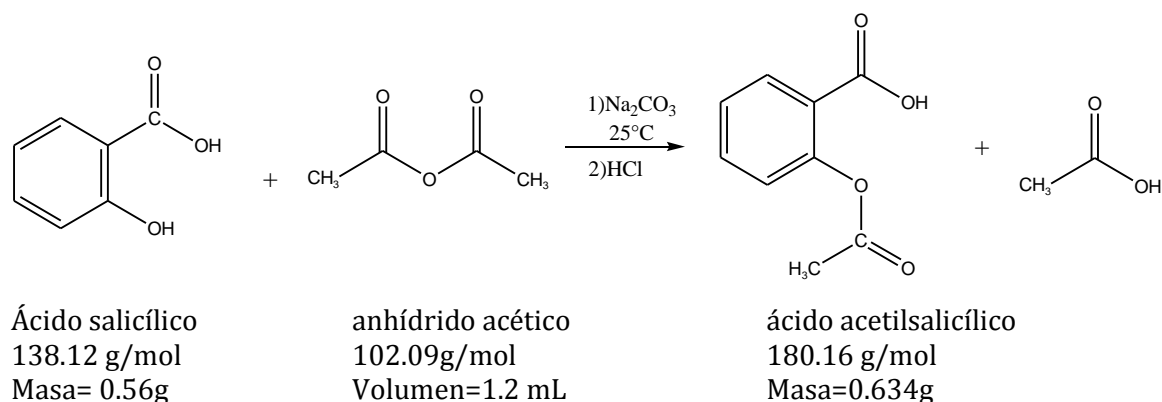
Reactivo	Cantidad
Ácido salicílico	0.56 g
Anhídrido acético	1.2 mL
Carbonato de sodio	2.4 g
Ácido clorhídrico (50%)	10 mL

Tabla 25. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Ácido salicílico	0	1	0	A
Anhídrido acético	3	2	1	B
Carbonato de sodio	2	0	0	B
Ácido clorhídrico	3	0	1	B

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



$$0.56 \text{ g de } \acute{\text{a}}\text{c salic\u00edlico} \times \left(\frac{1 \text{ mol de } \acute{\text{a}}\text{c salic\u00edlico}}{138.12 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de } \acute{\text{a}}\text{c acetilsalic\u00edlico}}{1 \text{ mol de } \acute{\text{a}}\text{c salic\u00edlico}} \right) \times \left(\frac{180.16 \text{ g}}{1 \text{ mol de } \acute{\text{a}}\text{c acetilsalic\u00edlico}} \right)$$

$$= 0.73 \text{ g de } \acute{\text{a}}\text{c acetilsalic\u00edlico}$$

$$1.2 \text{ mL de anh\u00eddrido ac\u00e9tico} \times \left(\frac{1.08 \text{ g}}{\text{mL}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de anh\u00eddrido ac\u00e9tico}}{102.09 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de } \acute{\text{a}}\text{c acetilsalic\u00edlico}}{1 \text{ mol de anh\u00eddrido ac\u00e9tico}} \right)$$

$$\times \left(\frac{180.16 \text{ g}}{1 \text{ mol de } \acute{\text{a}}\text{c acetilsalic\u00edlico}} \right)$$

2.29 g de \acute{a}c acetilsalic\u00edlico

\(\therefore\) el \acute{a}c salic\u00edlico es el reactivo limitante

Rendimiento te\u00f3rico = 0.73 g de \acute{a}c acetilsalic\u00edlico

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{0.634 \text{ g}}{0.73 \text{ g}} \times 100 = 86.85\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{180.16 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{138.12 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 102.09 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 75\%$$

$$\% \text{ EAe} = \frac{0.73 \text{ g}}{0.56 \text{ g} + 1.296 \text{ g}} \times 100 = 39.33\%$$

$$\% \text{ ETR} = 86.85\% \times 75\% = 65.14\%$$

$$E = \frac{13.406 \text{ g}}{0.634 \text{ g}} = 21.15$$

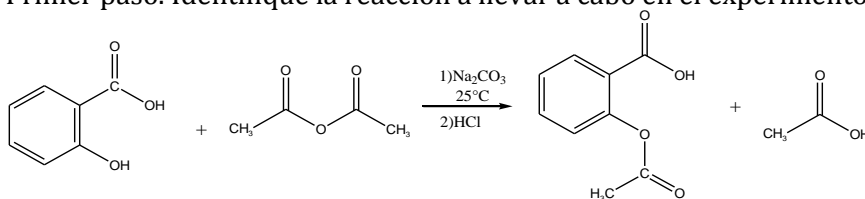
$$EM = \frac{0.634 \text{ g}}{1.856 \text{ g}} = 0.34$$

$$IM = \frac{0.00186 \text{ kg}}{0.000634 \text{ kg}} = 2.93$$

$$PM = \frac{0.000634 \text{ kg}}{0.00186 \text{ kg}} \times 100 = 34.16\%$$

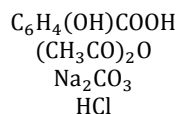
Evaluaci\u00f3n del riesgo

Primer paso. Identifique la reacci\u00f3n a llevar a cabo en el experimento



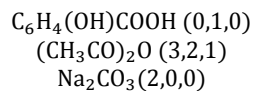
Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:



Tercer paso. Identifique los c\u00f3digos de riesgo de cada reactivo

C\u00f3digos de riesgo:



HCl (3,0,1)

Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	HCl y (CH ₃ CO) ₂ O
Inflamabilidad	(CH ₃ CO) ₂ O
Reactividad	HCl y (CH ₃ CO) ₂ O

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
HCl	10 mL
Na ₂ CO ₃	2.4 g
(CH ₃ CO) ₂ O	1.2 mL
C ₆ H ₄ (OH)COOH	0.56 g

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- Por volumen
HCl
- Por riesgo potencial
(CH₃CO)₂O

Gasto energético

En este caso no aplica porque la reacción se lleva a cabo a temperatura ambiente.

Costo

Tabla 26. Cálculo del costo de la técnica alternativa de la síntesis del ácido acetilsalicílico. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de aspirina (Alternativa)				
		Costo (\$)/unidad (1kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	Ácido salicílico	902	0.56 g	0.50
	Anhídrido acético	418	1.2 mL	0.50
Auxiliar	Carbonato de sodio	27	2.4 g	0.06
	Ácido clorhídrico	58	10 mL	0.58
Residuos	Hidróxido de sodio al 50%	90	5 mL	0.45
Total				2.09

Manejo de residuos

Tabla 27. Evaluación del manejo de residuos de la técnica alternativa de la síntesis del ácido acetilsalicílico. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de aspirina (Tradicional)		
Residuo		Aguas madres acidas
Clasificación		corrosivo y reactivo
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	0
	Secar y evaporar	0
Tratamientos químicos	Extracción	0
	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
Destino final	Reducción	0
	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
Confinamiento		0
TOTAL		5

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 28).

Tabla 28. Resultados de la síntesis de aspirina mediante la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		# de experimento		Promedio
		1	2	
Economía atómica teórica (%)		75.00	75.00	75.00
Economía atómica experimental (%)		39.33	39.33	39.33
Rendimiento experimental (%)		86.85	83.15	85.00
Eficiencia de masas		0.34	0.33	0.33
Factor de aceptabilidad ambiental		21.15	18.72	19.93
Intensidad de masa		2.93	3.06	2.99
Productividad de masa		34.16	32.70	33.43
Evaluación de riesgo	Por volumen	HCl		HCl
	Por riesgo	HCl		HCl
Gasto energético		NA		NA
Costo (\$)		2.09		2.09
Manejo de residuos		5		5

4.3. Síntesis de paracetamol

Esta reacción se lleva a cabo en los laboratorios de docencia de Química Orgánica II en el tema de síntesis de derivados de ácidos carboxílicos, el paracetamol es un medicamento con propiedades analgésicas, además, tiene efectos antipiréticos. El paracetamol mediante la técnica alternativa, se prepara mediante la reacción del anhídrido acético con *p*-aminofenol, en esta reacción se presenta la selectividad funcional para el grupo amino, por lo que solo se obtiene la amida.

Para poder comprender las diferencias entre las técnicas experimentales a continuación se presenta un resumen de ellas en la siguiente tabla (tabla 29)

Tabla 29. Resumen de las técnicas experimentales de la reacción de síntesis de paracetamol.

Técnica tradicional	Técnica alternativa
En un matraz bola de 250 mL colocar 10g de <i>p</i> -nitroacetanilida, 25 g de estaño granulado, y adicionar gota a gota 50 mL ácido clorhídrico.	En un matraz de bola de 10 mL colocar 0.4 g de <i>p</i> -aminofenol y disolver en 0.35 mL de anhídrido acético y 0.5 mL de agua.
Calentar en baño María por 20 minutos, al término, agregar lentamente 100 mL de una solución de hidróxido de sodio al 40% hasta obtener un pH alcalino.	Colocar el refrigerante en posición de reflujo y calentar a ebullición con agitación magnética durante 20 minutos. Los cristales de paracetamol se formarán en el seno de la reacción
Destilar por arrastre de vapor, después extraer con diclorometano, secar y evaporar el disolvente.	Al término del reflujo enfriar el matraz con agua y filtrar al vacío.
Adicionar 12.5 mL de ácido clorhídrico 2N y 12.5 mL de agua, posteriormente enfriar hasta 0°C. Agregar a la mezcla 2 g de nitrito de sodio en 25 mL de agua destilada fría.	Opcional: Recristalizar de agua, utilizar carbón activado de ser necesario.
Adicionar 25 mL de ácido clorhídrico 1N y calentar a baño maría durante 15 minutos, al término enfriar y secar al vacío.	Pesar y determinar el punto de fusión del producto y compararlo con el de la materia prima.

4.3.1. Técnica tradicional

A continuación se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica tradicional y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.

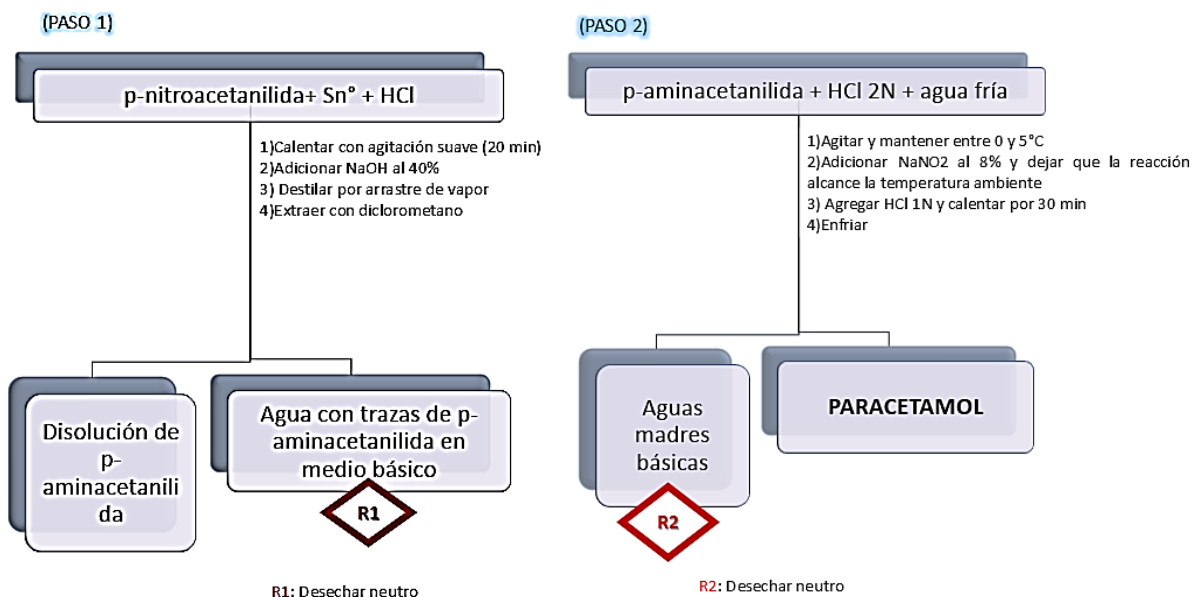


Tabla 30. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

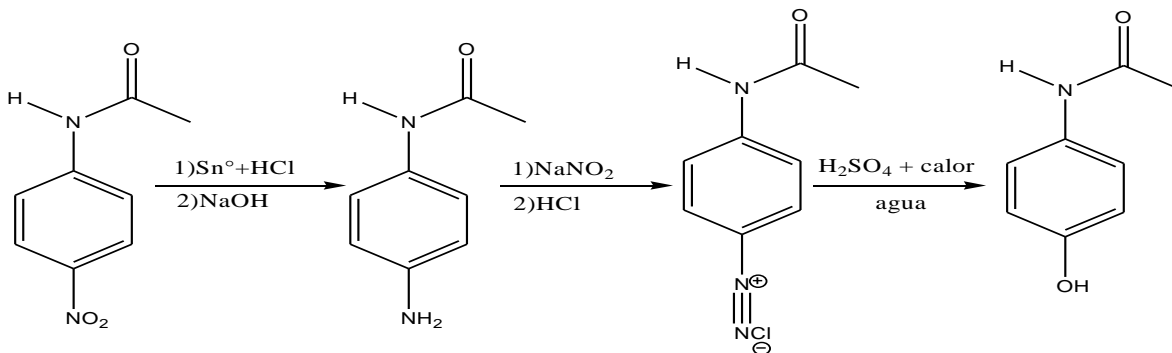
Reactivo	Cantidad
p-nitroacetanilida	2 g
Estaño	25 g
Cloruro de sodio	5 g
Cloruro de metileno	20 mL
Ácido clorhídrico concentrado	50 mL
Ácido clorhídrico 1 N	25 mL
Ácido clorhídrico 2 N	12.5 mL
Hidróxido de sodio al 40%	100 mL
Hidróxido de sodio en lentejas	5 g
p-aminoacetanilida	5g
Nitrito de sodio	2g
Agua destilada	150 mL

Tabla 31. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
p-nitroacetanilida	1	1	1	A
Estaño	1	1	1	A
Cloruro de sodio	1	0	0	A
Cloruro de metileno	2	1	0	B
Ácido clorhídrico	3	0	1	B
Hidróxido de sodio	3	0	1	B
p-aminoacetanilida	2	1	0	B
Nitrito de sodio	3	0	1	B

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



p-nitroacetanilida
180.16 g/mol
Masa= 10g

p-aminoacetanilida
150.18g/mol
Volumen=5 g

p-hidroxiacetanilida
151.16 g/mol
Masa=0.5 g

$$\begin{aligned}
 & 10\text{g de p - nitroacetanilida} \times \left(\frac{1 \text{ mol de p - nitroacetanilida}}{180.16 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de p - aminoacetanilida}}{1 \text{ mol de p - nitroacetanilida}} \right) \\
 & \quad \times \left(\frac{150.18 \text{ g}}{1 \text{ mol de p - aminoacetanilida}} \right) \\
 & \quad = 8.34 \text{ g de p - aminoacetanilida}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & 5\text{g de p - aminoacetanilida} \times \left(\frac{1 \text{ mol de p - aminoacetanilida}}{150.18 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de p - hidroxiacetanilida}}{1 \text{ mol de p - aminoacetanilida}} \right) \\
 & \quad \times \left(\frac{151.16 \text{ g}}{1 \text{ mol de p - hidroxiacetanilida}} \right) \\
 & \quad = 5.03 \text{ g de p - hidroxiacetanilida}
 \end{aligned}$$

Rendimiento teórico = 5.03 g de p - hidroxiacetanilida

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{0.5 \text{ g}}{5.03 \text{ g}} \times 100 = 9.94\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{151.16 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{180.16 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 36.46 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 69.77\%$$

$$\% \text{ EAe} = \frac{5.03 \text{ g}}{10 \text{ g} + 28\text{g}} \times 100 = 13.24\%$$

$$\% \text{ ETR} = 9.94\% \times 69.77\% = 6.93\%$$

$$E = \frac{200 \text{ g}}{0.5 \text{ g}} = 400$$

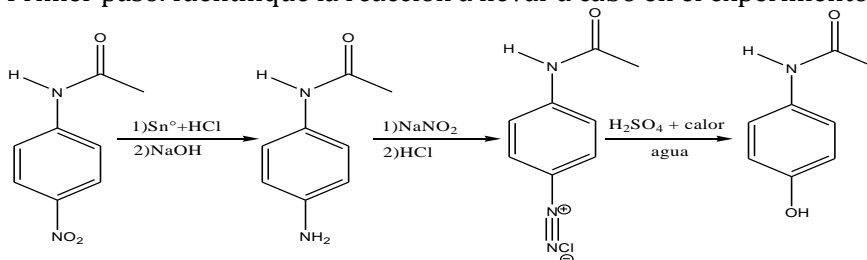
$$EM = \frac{0.5 \text{ g}}{56 \text{ g}} = 0.01$$

$$IM = \frac{0.0056\text{kg}}{0.0005\text{kg}} = 11.2$$

$$PM = \frac{0.0005\text{kg}}{0.0056\text{kg}} \times 100 = 8.93\%$$

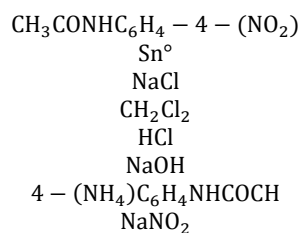
Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



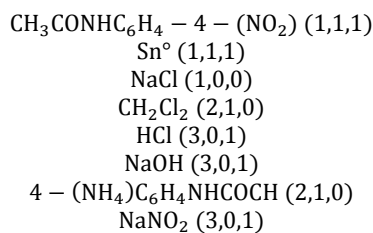
Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:



Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:



Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	HCl, NaOH y NaNO ₂
Inflamabilidad	CH ₃ CONHC ₆ H ₄ - 4 - (NO ₂), Sn [°] y 4 - (NH ₄)C ₆ H ₄ NHCOCH
Reactividad	CH ₃ CONHC ₆ H ₄ - 4 - (NO ₂), Sn [°] y NaNO ₂

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
NaOH	105 mL
HCl	88 mL
Sn [°]	25 g
CH ₂ Cl ₂	20 mL
4 - (NH ₄)C ₆ H ₄ NHCOCH	5 g
NaCl	5 g
NaNO ₂	2 g
CH ₃ CONHC ₆ H ₄ - 4 - (NO ₂)	2 g

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- a. Por volumen
NaOH
- b. Por riesgo potencial
 $\text{CH}_3\text{CONHC}_6\text{H}_4 - 4 - (\text{NO}_2)$ y NaNO_2

Gasto energético

Datos de la parrilla:

120 V, 3.2A, 50/60Hz

Tiempo de calentamiento:

- 20 minutos a baño María
- 30 minutos destilación por arrastre de vapor
- 10 minutos evaporar disolvente
- 30 minutos de a baño María

La potencia (P) en watts (W) es igual al voltaje (V) en volts (V) por la corriente (I) en amperes (A).

$$P(\text{W}) = V(\text{V}) \times I(\text{A})$$

$$P = 120 \text{ V} \times 3.2 \text{ A}$$

$$P = 384 \text{ W}$$

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(\text{J}) = P(\text{W}) \times t(\text{s})$$

$$E = 384 \text{ W} \times 5400\text{s}$$

$$E = 2073600 \text{ J} = \mathbf{2.07 \text{ MJ}}$$

Costo

Tabla 32. Cálculo del costo de la técnica tradicional de la síntesis del paracetamol. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de paracetamol (Tradicional)				
		Costo (\$)/unidad (1kg o 1L)	Cantidad	Costo real(\$)
Materia prima	p-nitroacetanilida	Se sintetiza en el laboratorio	10 g	0
	p-aminoacetanilida	Se sintetiza en el laboratorio	5 g	0
	Ácido clorhídrico	58	87.5 mL	5.75
Auxiliar	Estaño	6764.52	25 g	169.11
	Cloruro de sodio	25.5	5 g	12.75
	Cloruro de metileno	353.24	20 mL	7.06
	Hidróxido de sodio	90	105 mL	9.45
	Nitrito de sodio	783.84	2 g	1.57
Residuos	Ácido clorhídrico (100 mL al 50%)	60	5 mL	0.30
Total				245.58

Manejo de residuos

Tabla 33. Evaluación del manejo de residuos de la técnica alternativa de la síntesis del paracetamol. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis del paracetamol (Tradicional)		
Residuo		Aguas madres básicas
Clasificación		corrosivo y reactivo
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	0
	Secar y evaporar	0
Tratamientos químicos	Extracción	0
	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
Destino final	Reducción	0
	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
Confinamiento		0
TOTAL		5

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 34).

Tabla 34. Resultados de la síntesis de paracetamol mediante la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		# de experimento			Promedio
		1	2	3	
Economía atómica teórica (%)		69.77	69.77	69.77	69.77
Economía atómica experimental (%)		13.24	13.24	13.24	13.24
Rendimiento experimental (%)		9.94	9.94	9.94	9.94
Eficiencia de masas		0.01	0.01	0.01	0.01
Factor de aceptabilidad ambiental		400	400	400	400
Intensidad de masa		11.20	11.20	11.20	11.20
Productividad de masa		8.93	8.93	8.93	8.93
Evaluación de riesgo	Por volumen	NaOH			NaOH
	Por riesgo	CH ₃ CONHC ₆ H ₄ -4-(NO ₂) y NaNO ₂			CH₃ CONHC₆ H₄-4-(NO₂) y NaNO₂
Gasto energético		2.07 MJ			2.07 MJ
Costo (\$)		245.58			245.58
Manejo de residuos		5			5

4.3.2. Técnica alternativa

A continuación se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica alternativa y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.

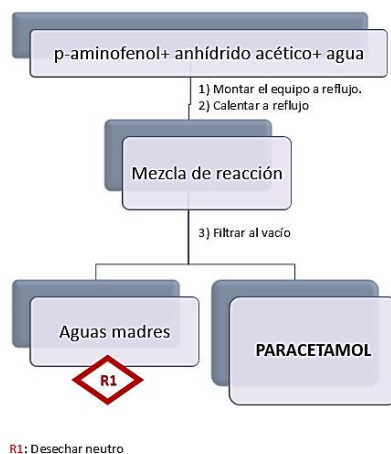


Tabla 35. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

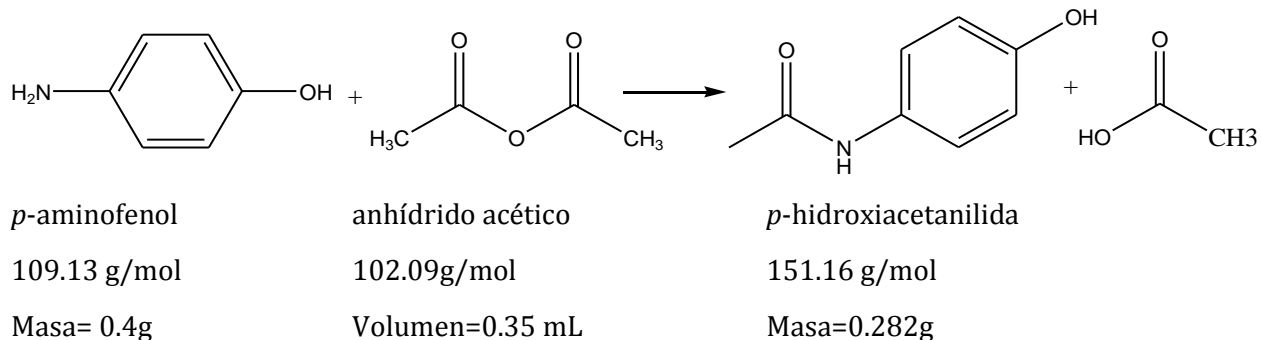
Reactivo	Cantidad
<i>p</i> -aminofenol	0.40 g
Anhídrido acético	0.35 mL
Agua destilada	0.50 mL

Tabla 36. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
<i>p</i> -aminofenol	0	1	0	A
Anhídrido acético	3	2	1	B

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



$$0.54 \text{ g de p-aminofenol} \times \left(\frac{1 \text{ mol de p-aminofenol}}{109.13 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de p-hidroxiacetanilida}}{1 \text{ mol de p-aminofenol}} \right) \\ \times \left(\frac{151.16 \text{ g}}{1 \text{ mol de p-hidroxiacetanilida}} \right)$$

$$= 0.55 \text{ g de p-hidroxiacetanilida}$$

$$0.35 \text{ mL de anhídrido acético} \times \left(\frac{1.08 \text{ g}}{\text{mL}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de anhídrido acético}}{102.09 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de p-hidroxiacetanilida}}{1 \text{ mol de anhídrido acético}} \right) \\ \times \left(\frac{151.16 \text{ g}}{1 \text{ mol de p-hidroxiacetanilida}} \right)$$

$$= 0.56 \text{ g de ác acetilsalicílico}$$

∴ el p-aminofenol es el reactivo limitante

Rendimiento teórico = 0.55 g de p-hidroxiacetanilida

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{0.282 \text{ g}}{0.55 \text{ g}} \times 100 = 51.27\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{151.16 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{109.13 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 102.09 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 71.59\%$$

$$\% \text{ EAe} = \frac{0.55 \text{ g}}{0.4 \text{ g} + 0.378 \text{ g}} \times 100 = 70.51\%$$

$$\% \text{ ETR} = 51.27\% \times 71.59\% = 36.70\%$$

$$E = \frac{0 \text{ g}}{0.282 \text{ g}} = 0$$

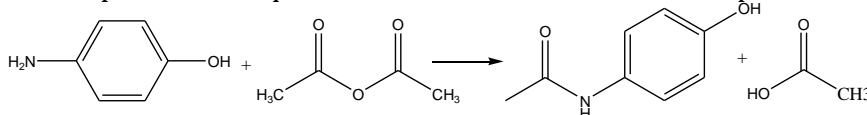
$$EM = \frac{0.282 \text{ g}}{0.78 \text{ g}} = 0.36$$

$$IM = \frac{0.00078 \text{ kg}}{0.000282 \text{ kg}} = 2.77$$

$$PM = \frac{0.000282 \text{ kg}}{0.00078 \text{ kg}} \times 100 = 36.15\%$$

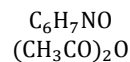
Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



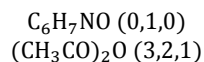
Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:



Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:



Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	$(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{O}$
Inflamabilidad	$(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{O}$
Reactividad	$(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{O}$

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
$\text{C}_6\text{H}_7\text{NO}$	0.4 g
$(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{O}$	0.35 mL

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- a. Por volumen
 $\text{C}_6\text{H}_7\text{NO}$
- b. Por riesgo potencial
 $(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{O}$

Gasto energético

Datos de la parrilla:

120 V, 3.2A, 50/60Hz

Tiempo de calentamiento:

- 30 minutos a reflujo

La potencia (P) en watts (W) es igual al voltaje (V) en volts (V) por la corriente (I) en amperes (A).

$$P(\text{W}) = V(\text{V}) \times I(\text{A})$$

$$P = 120 \text{ V} \times 3.2 \text{ A}$$

$$P = 384 \text{ W}$$

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(\text{J}) = P(\text{W}) \times t(\text{s})$$

$$E = 384 \text{ W} \times 1800\text{s}$$

$$E = 691200 \text{ J} = 691.2 \text{ kJ}$$

Costo

Tabla 37. Cálculo del costo de la técnica alternativa de la síntesis del paracetamol. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de paracetamol (Alternativa)				
		Costo (\$)/unidad (1kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	<i>p</i> -aminofenol	1683	0.40 g	0.67
	Anhídrido acético	418	0.35 mL	0.15
Auxiliar	Agua destilada	31	0.5 mL	0.01
Residuos	Ácido clorhídrico al 50%	58	10 mL	0.58
Total				1.41

Manejo de residuos

Tabla 38. Evaluación del manejo de residuos de la técnica alternativa de la síntesis del paracetamol. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de paracetamol (Tradicional)		
Residuo		Aguas madres acidas
Clasificación		corrosivo y reactivo
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	0
	Secar y evaporar	0
	Extracción	0
Tratamientos químicos	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
	Reducción	0
Destino final	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
	Confinamiento	0
TOTAL		5

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 39).

Tabla 39. Resultados de la síntesis de aspirina mediante la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		# de experimento			Promedio
		1	2	3	
Economía atómica teórica (%)		71.59	71.59	71.59	71.59
Economía atómica experimental (%)		70.51	70.51	70.51	70.51
Rendimiento experimental (%)		51.27	53.64	54.73	53.21
Eficiencia de masas		0.36	0.38	0.39	0.38
Factor de aceptabilidad ambiental		0.00	0.00	0.00	0.00
Intensidad de masa		2.77	2.64	2.59	2.67
Productividad de masa		36.15	37.82	38.59	37.52
Evaluación de riesgo	Por volumen	C ₆ H ₇ NO			C₆H₇NO
	Por riesgo	(CH ₃ CO) ₂ O			(CH₃CO)₂O
Gasto energético		691.2 kJ			691.2 kJ
Costo (\$)		1.41			1.41
Manejo de residuos		5			5

4.4. Síntesis de un éster

Esta reacción se lleva a cabo en los laboratorios de docencia de Química Orgánica II en el tema de síntesis de derivados de ácidos carboxílicos, la reacción de esterificación de Fischer, es una reacción de sustitución nucleofílica en el acilo que se efectuará en condiciones ácidas. Aun cuando los ácidos carboxílicos no son lo suficientemente reactivos para ser atacados por la mayoría de los nucleófilos, pueden hacerse mucho más reactivos en presencia de un ácido mineral fuerte como ácido sulfúrico. El ácido mineral actúa protonando el átomo de oxígeno del grupo carbonilo, con lo que imparte carga positiva al ácido carboxílico y hace a éste mucho más reactivo hacia el ataque nucleofílico por alcohol. La pérdida posterior de agua forma el éster como producto. El efecto neto de la esterificación de Fischer es la sustitución de un grupo $-OH$ por un $-OR$. Todos los pasos son reversibles, y la reacción puede desplazarse en cualquier sentido eligiendo las condiciones de reacción apropiadas.

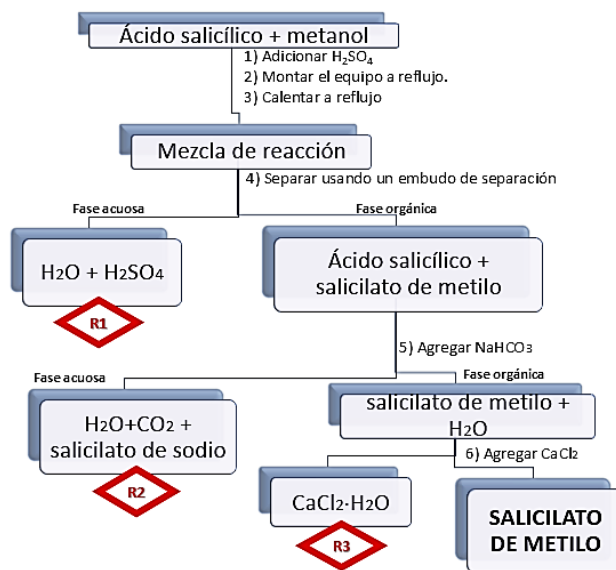
Las técnicas experimentales que se realizaron se presentan en la tabla 40. Donde la técnica alternativa se puede realizar con menos pasos intermedios, lo que disminuye el uso de materiales auxiliares.

Tabla 40. Resumen de las técnicas experimentales de la reacción de síntesis de un éster.
(Elaboración propia, 2016).

Técnica tradicional		Técnica alternativa
Tiempo de reacción: 40 minutos		Tiempo de reacción: 40 minutos
Salicilato de metilo	Acetato de isoamilo	Propionato de etilo
En un matraz bola de 10 mL colocar 1g de ácido salicílico, 3 mL de metanol y 1 mL de H_2SO_4 .	En un matraz bola de 10 mL colocar 1.8 mL de alcohol isoamílico, 2.4 mL de ácido acético glacial y 0.4 mL de H_2SO_4 .	Colocar 1.85 mL de ácido propiónico, 1.6 mL de etanol y 0.4 mL de H_2SO_4 dentro de un matraz bola de 25 mL
Montar un equipo de destilación y calentar 40 min a reflujo en baño de arena.	Montar un equipo de destilación y calentar 40 min a reflujo en baño de arena.	Montar un equipo de destilación y calentar 20 min a reflujo y otros 20 min más de destilación a 51-53°C
Vaciar la mezcla en un embudo de separación y conservar la fase orgánica. Neutralizar con una disolución de $NaHCO_3$ al 5%.	Vaciar la mezcla en un embudo de separación y conservar la fase orgánica. Neutralizar con una disolución de $NaHCO_3$ al 5%.	Al finalizar la destilación se puede detectar el olor del propionato de etilo, abanicando la boca del matraz Erlenmeyer de 10 mL donde se colectó el mismo
Secar con $CaCl_2$ anhidro y recuperar el éster cuando la solución se clarifique.	Secar con $MgSO_4$ anhidro y recuperar el éster cuando la solución se clarifique.	Medir el volumen del producto obtenido
		Obtener punto de ebullición del producto

4.4.1. Técnica tradicional (salicilato de metilo)

A continuación, se desglosará la información necesaria para la evaluación de las técnicas tradicionales y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.



R1, R2 y R3: Desechar neutro

Tabla 41. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional de obtención de salicilato de metilo. (Elaboración propia, 2016).

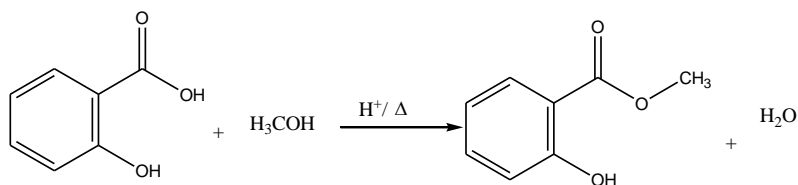
Reactivo	Cantidad
Ácido salicílico	1.0 g
Ácido sulfúrico concentrado	1 mL
Metanol	3 mL
Agua	2 mL
Bicarbonato de sodio al 5%	5 mL
Cloruro de calcio anhidro	0.1 g

Tabla 42. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Ácido salicílico	0	1	0	A
Ácido sulfúrico concentrado	3	0	2	B
Metanol	2	3	0	B
Bicarbonato de sodio	1	0	0	A
Cloruro de calcio anhidro	2	0	1	B

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



Ácido salicílico	Metanol	Salicilato de metilo
138.12 g/mol	32.04 g/mol	152.1 g/mol
Masa= 1g	Volumen= 3 mL	Masa= 0.1269 g

$$1 \text{ g de ácido salicílico} \times \left(\frac{1 \text{ mol de ácido salicílico}}{138.12 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de salicilato de metilo}}{1 \text{ mol de ácido salicílico}} \right) \times \left(\frac{152.1 \text{ g}}{1 \text{ mol de salicilato de metilo}} \right) = 1.10 \text{ g de salicilato de metilo}$$

$$3 \text{ mL de metanol} \times \left(\frac{0.7918 \text{ g}}{\text{mL}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de metanol}}{32.04 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de salicilato de metilo}}{1 \text{ mol de metanol}} \right) \times \left(\frac{152.1 \text{ g}}{1 \text{ mol de salicilato de metilo}} \right) = 11.27 \text{ g de salicilato de metilo}$$

∴ el ácido salicílico es el reactivo limitante

∴ Rendimiento teórico = 1.10 g de ácido salicílico

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{0.1269 \text{ g}}{1.10 \text{ g}} \times 100 = 11.54\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{152.1 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{138.12 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 32.04 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 89.39\%$$

$$\% \text{ E Ae} = \frac{1.10 \text{ g}}{1.0 \text{ g} + 2.3754} \times 100 = 31.65\%$$

$$\% \text{ ETR} = 11.54\% \times 89.39\% = 10.31\%$$

$$E = \frac{10.8677 \text{ g}}{0.1269 \text{ g}} = 85.64$$

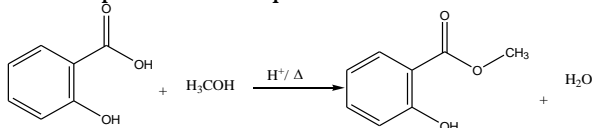
$$EM = \frac{0.1269 \text{ g}}{3.37} = 0.04$$

$$IM = \frac{0.00337567 \text{ kg}}{0.0001269 \text{ kg}} = 26.6$$

$$PM = \frac{0.0001269 \text{ kg}}{0.00337567 \text{ kg}} \times 100 = 3.76\%$$

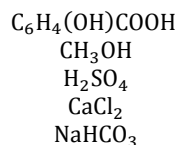
Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



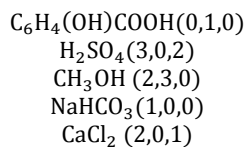
Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:



Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:



Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	H_2SO_4
Inflamabilidad	CH_3OH
Reactividad	H_2SO_4

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
$NaHCO_3$	5 mL
CH_3OH	3 mL
$C_6H_4(OH)COOH$	1 g
H_2SO_4	1 mL
$CaCl_2$	0.1 g

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- Por volumen
 $NaHCO_3$
- Por riesgo potencial
 H_2SO_4

Gasto energético

Datos de la parrilla:

120 V, 3.2A, 50/60Hz

Tiempo de calentamiento:

- 40 minutos a reflujo

La potencia (P) en watts (W) es igual al voltaje (V) en volts (V) por la corriente (I) en amperes (A).

$$P(W) = V(V) \times I(A)$$

$$P = 120 V \times 3.2 A$$

$$P = 384 W$$

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(J) = P(W) \times t(s)$$

$$E = 384 W \times 2400s$$

$$E = 921600 \text{ J} = 921.6 \text{ kJ}$$

Costo

Tabla 43. Cálculo del costo de la técnica tradicional de la síntesis del salicilato de metilo. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de ácido fumárico (Tradicional)				
		Costo(\$)/unidad (1Kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	Ácido salicílico	902	1 g	0.9020
	Metanol	308	3 mL	0.9240
Auxiliar	Ácido sulfúrico	513	1 mL	0.5130
	Bicarbonato de sodio al 5%	105	0.25 g	0.0262
	Cloruro de calcio anhidro	2255	0.1 g	0.2255
	Agua destilada	31	2 mL	0.0620
Residuos	Hidróxido de sodio al 50%	90	5 mL	0.4500
Total				2.5907

Manejo de residuos

Tabla 44. Evaluación del manejo de residuos de la técnica tradicional de la síntesis del salicilato de metilo (Elaboración propia, 2016).

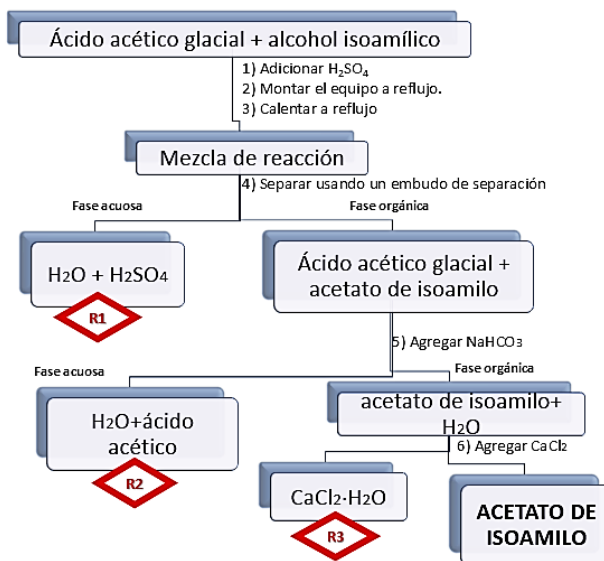
Síntesis de salicilato de metilo (Tradicional)		
Residuo	Aguas madres acidas	
Clasificación	corrosivo y reactivo	
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	0
	Secar y evaporar	0
Tratamientos químicos	Extracción	0
	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
Destino final	Reducción	0
	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
	Confinamiento	0
TOTAL		5

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 45).

Tabla 45. Resultados de la síntesis de salicilato de metilo mediante la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		# de experimento			Promedio
		1	2	3	
Economía atómica teórica (%)		89.39	89.39	89.39	89.39
Economía atómica experimental (%)		31.65	31.65	31.65	31.65
Rendimiento experimental (%)		11.54	18.61	12.58	11.54
Eficiencia de masas		0.04	0.06	0.04	0.04
Factor de aceptabilidad ambiental		85.64	48.85	72.25	85.64
Intensidad de masa		26.60	26.60	26.60	26.60
Productividad de masa		3.76	3.76	3.76	3.76
Evaluación de riesgo	Por volumen	NaHCO ₃			NaHCO₃
	Por riesgo	H ₂ SO ₄			H₂SO₄
Gasto energético		921.6 kJ			921.6 kJ
Costo (\$)		2.5907			2.5907
Manejo de residuos		5			5

4.4.2. Técnica tradicional (acetato de isoamilo)



R1, R2 y R3: Desechar neutro

Tabla 46. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional de obtención de acetato de isoamilo. (Elaboración propia, 2016).

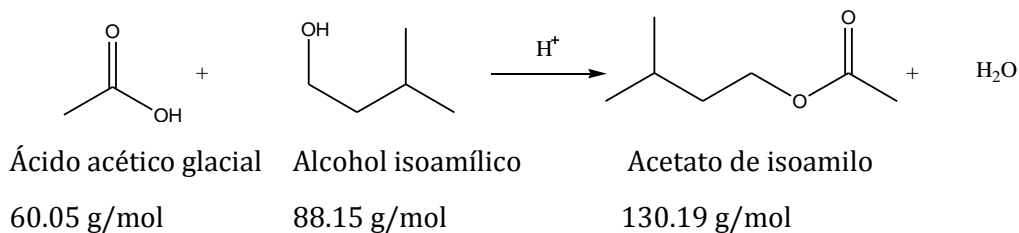
Reactivo	Cantidad
Ácido acético glacial	2.4 mL
Ácido sulfúrico concentrado	0.4 mL
Alcohol isoamílico	1.8 mL
Bicarbonato de sodio al 5%	9 mL
Solución saturada de cloruro de sodio	1 mL
Sulfato de magnesio anhidro	0.1 g
Agua	10 mL

Tabla 47. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Ácido acético glacial	3	2	0	B
Ácido sulfúrico concentrado	3	0	2	B
Alcohol isoamílico	1	2	0	B
Bicarbonato de sodio	1	0	0	A
Cloruro de sodio	1	0	0	A
Sulfato de magnesio anhidro	1	0	0	A

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



Masa= 2.4 mL Volumen= 1.8 mL Masa= 1.4841 g

$$2.4 \text{ mL de ácido acético glacial} \times \left(\frac{1.05 \text{ g}}{\text{mL}}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de ácido acético glacial}}{60.05 \text{ g}}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de acetato de isoamilo}}{1 \text{ mol de ácido acético glacial}}\right) \\ \times \left(\frac{130.19 \text{ g}}{1 \text{ mol de acetato de isoamilo}}\right) = 5.46 \text{ g de acetato de isoamilo}$$

$$1.8 \text{ mL de alcohol isoamílico} \times \left(\frac{0.812 \text{ g}}{\text{mL}}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de alcohol isoamílico}}{88.15 \text{ g}}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de acetato de isoamilo}}{1 \text{ mol de alcohol isoamílico}}\right) \\ \times \left(\frac{130.19 \text{ g}}{1 \text{ mol de acetato de isoamilo}}\right) = 2.16 \text{ g de acetato de isoamilo}$$

∴ el alcohol isoamílico es el reactivo limitante

∴ Rendimiento teórico = 2.16 g de acetato de isoamilo

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{1.4841 \text{ g}}{2.15 \text{ g}} \times 100 = 68.75\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{130.19 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{60.05 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \cdot 88.15 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 87.85\%$$

$$\% \text{ EAe} = \frac{2.16 \text{ g}}{1.4616 \text{ g} + 2.52 \text{ g}} \times 100 = 54.21\%$$

$$\% \text{ ETR} = 68.75\% \times 87.85\% = 60.39\%$$

$$E = \frac{19.3606 \text{ g}}{1.4841 \text{ g}} = 13.05$$

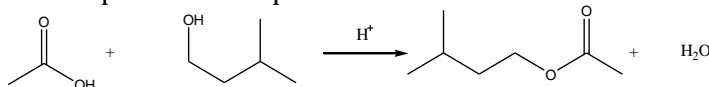
$$EM = \frac{1.4841 \text{ g}}{3.98} = 0.37$$

$$IM = \frac{0.00398 \text{ kg}}{0.0014841 \text{ kg}} = 2.68$$

$$PM = \frac{0.0014841 \text{ kg}}{0.00398 \text{ kg}} \times 100 = 36.29\%$$

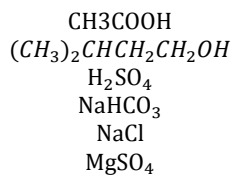
Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



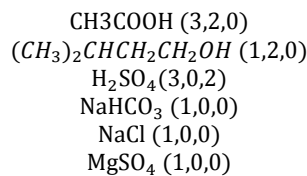
Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:



Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:



Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	CH ₃ COOH y H ₂ SO ₄
Inflamabilidad	CH ₃ COOH y (CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH ₂ OH
Reactividad	H ₂ SO ₄

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
NaHCO ₃	9 mL
CH ₃ COOH	2.4 mL
(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH ₂ OH	1.8 mL
NaCl	1 mL
H ₂ SO ₄	0.4 mL
MgSO ₄	0.1 g

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- Por volumen
NaHCO₃
- Por riesgo potencial
CH₃COOH y H₂SO₄

Gasto energético

Datos de la parrilla:

120 V, 3.2A, 50/60Hz

Tiempo de calentamiento:

- 40 minutos a reflujo

La potencia (P) en watts (W) es igual al voltaje (V) en volts (V) por la corriente (I) en amperes (A).

$$P(W) = V(V) \times I(A)$$

$$P = 120 V \times 3.2 A$$

$$P = 384 W$$

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(J) = P(W) \times t(s)$$

$$E = 384 W \times 2400s$$

$$E = 921600 J = 921.6kJ$$



Costo

Tabla 48. Cálculo del costo de la técnica tradicional de la síntesis del acetato de isoamilo.
(Elaboración propia, 2016).

Síntesis de acetato de isoamilo (Tradicional)				
		Costo(\$)/unidad (1Kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	Ácido acético glacial	514	2.4 mL	1.2336
	Alcohol isoamílico	675	1.8 mL	1.2150
Auxiliar	Ácido sulfúrico	513	0.4 mL	0.2052
	Bicarbonato de sodio	105	0.45 g	0.0472
	Cloruro de sodio	25.5	1 g	0.0255
	Sulfato de magnesio	3318	0.1 g	0.3318
	Agua destilada	31	10 mL	0.3100
Residuos	Hidróxido de sodio al 50%	90	20 mL	1.8000
Total				3.3683

Manejo de residuos

Tabla 49. Evaluación del manejo de residuos de la técnica tradicional de la síntesis del acetato de isoamilo. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de acetato de isoamilo (Tradicional)		
Residuo	Aguas madres acidas	
Clasificación	corrosivo y reactivo	
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	0
	Secar y evaporar	0
Tratamientos químicos	Extracción	0
	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
Destino final	Reducción	0
	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
	Confinamiento	0
TOTAL		5

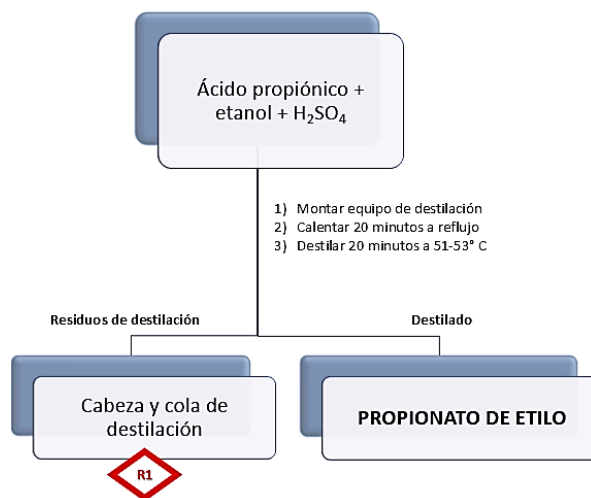
Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 50).

Tabla 50. Resultados de la síntesis de acetato de isoamilo mediante la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		# de experimento			Promedio
		1	2	3	
Economía atómica teórica (%)		87.85	87.85	87.85	87.85
Economía atómica experimental (%)		54.21	54.21	54.21	54.21
Rendimiento experimental (%)		68.75	82.65	75.51	75.64
Eficiencia de masas		0.37	0.45	0.41	0.41
Factor de aceptabilidad ambiental		13.05	9.18	10.05	10.76
Intensidad de masa		2.68	2.23	2.44	2.45
Productividad de masa		37.29	44.82	40.95	41.02
Evaluación de riesgo	Por volumen	NaHCO ₃			NaHCO₃
	Por riesgo	CH ₃ COOH y H ₂ SO ₄			CH₃COOH y H₂SO₄
Gasto energético		921.6 kJ			921.6 kJ
Costo (\$)		3.3683			3.3683
Manejo de residuos		5			5

4.4.3. Técnica alternativa (propionato de etilo)

A continuación se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica alternativa y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.



R1: Verificar si el porcentaje de etanol es menor al 25%, si es menor desechar neutra la solución y si es mayor recuperar el disolvente por destilación.

Tabla 51. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

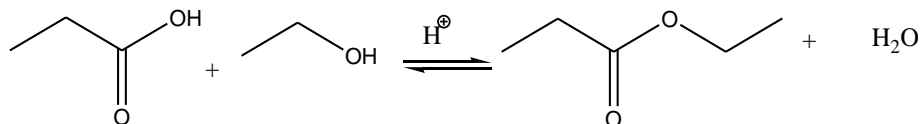
Reactivo	Cantidad
Ácido propiónico	1.8 mL
Etanol	1.2 mL
Ácido sulfúrico concentrado	0.4 mL

Tabla 52. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Ácido propiónico	3	2	1	B
Etanol	2	3	1	B
Ácido sulfúrico concentrado	3	0	2	B

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



Ácido propiónico	Etanol	Propionato de etilo
74.08 g/mol	46.07 g/mol	120.15 g/mol
Volumen= 1.8 mL	Volumen= 1.2 mL	Volumen= 1.27 mL

$$1.8 \text{ mL de ácido propiónico} \times \left(\frac{0.993 \text{ g}}{\text{mL}}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de ácido propiónico}}{74.08 \text{ g}}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de propionato de etilo}}{1 \text{ mol de ácido propiónico}}\right) \times \left(\frac{120.15 \text{ g}}{1 \text{ mol de propionato de etilo}}\right) = 2.89 \text{ g de propionato de etilo}$$

$$1.2 \text{ mL de etanol} \times \left(\frac{0.7893 \text{ g}}{\text{mL}}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de etanol}}{46.07 \text{ g}}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de propionato de etilo}}{1 \text{ mol de etanol}}\right) \times \left(\frac{120.15 \text{ g}}{1 \text{ mol de propionato de etilo}}\right) = 2.47 \text{ g de propionato de etilo}$$

∴ el etanol es el reactivo limitante

∴ Rendimiento teórico = 2.5 g de propionato de etilo

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{1.315 \text{ g}}{2.5 \text{ g}} \times 100 = 52.6\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{120.15 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{74.08 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 46.07 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 100\%$$

$$\% \text{ EAe} = \frac{2.5 \text{ g}}{1.79 \text{ g} + 0.95 \text{ g}} \times 100 = 91.24\%$$

$$\% \text{ ETR} = 52.6\% \times 100\% = 52.6\%$$

$$E = \frac{1 \text{ g}}{1.315 \text{ g}} = 0.8$$

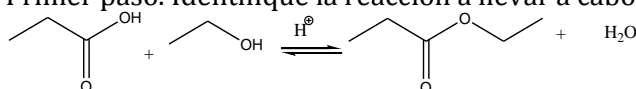
$$EM = \frac{1.315 \text{ g}}{2.74 \text{ g}} = 0.48$$

$$IM = \frac{0.00274 \text{ kg}}{0.001315 \text{ kg}} = 2.08$$

$$PM = \frac{0.001315 \text{ kg}}{0.00274 \text{ kg}} \times 100 = 47.99\%$$

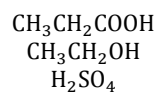
Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



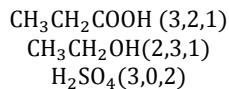
Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:



Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:



Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	CH ₃ CH ₂ COOH, H ₂ SO ₄
Inflamabilidad	CH ₃ CH ₂ OH
Reactividad	H ₂ SO ₄

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
CH ₃ CH ₂ COOH	1.8 mL
CH ₃ CH ₂ OH	1.2 mL
H ₂ SO ₄	0.4 mL

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- a. Por volumen
CH₃CH₂COOH
- b. Por riesgo potencial
H₂SO₄

Gasto energético

Datos de la parrilla:

120 V, 3.2A, 50/60Hz

Tiempo de calentamiento:

- 20 minutos a reflujo y 20 minutos de destilación simple

La potencia (P) en watts (W) es igual al voltaje (V) en volts (V) por la corriente (I) en amperes (A).

$$P(W) = V(V) \times I(A)$$

$$P = 120 V \times 3.2 A$$

$$P = 384 W$$

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(J) = P(W) \times t(s)$$

$$E = 384 W \times 2400s$$

$$E = 921600 J = 921.6kJ$$

Costo

Tabla 53. Cálculo del costo de la técnica alternativa de la síntesis del propionato de etilo. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de propionato de etilo (Alternativa)				
		Costo(\$)/unidad (1Kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	Ácido propiónico	500	1.8 mL	0.9000
	Etanol	208	1.2 mL	0.2496
Auxiliar	Ácido sulfúrico	513	0.4 mL	0.2052
Residuos	Hidróxido de sodio al 50%	90	5 mL	0.4500
Total				1.8000

Manejo de residuos

Tabla 54. Evaluación del manejo de residuos de la técnica alternativa de la síntesis del propionato de etilo. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de propionato de etilo (Alternativa)		
Residuo		Aguas madres acidas
Clasificación		corrosivo y reactivo
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	0
	Secar y evaporar	0
Tratamientos químicos	Extracción	0
	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
Destino final	Reducción	0
	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
Confinamiento		0
TOTAL		5

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 55).

Tabla 55. Resultados de la síntesis de propionato de etilo mediante la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		# de experimento			Promedio
		1	2	3	
Economía atómica teórica (%)		100.00	100.00	100.00	100.00
Economía atómica experimental (%)		85.00	85.00	85.00	85.00
Rendimiento experimental (%)		52.60	35.10	38.60	42.10
Eficiencia de masas		0.38	0.53	0.48	0.46
Factor de aceptabilidad ambiental		0.8	0.4	0.6	0.59
Intensidad de masa		2.62	3.92	3.56	3.37
Productividad de masa		38.23	25.51	28.05	30.60
Evaluación de riesgo	Por volumen	CH ₃ CH ₂ COOH			CH₃CH₂COOH
	Por riesgo	H ₂ SO ₄			H₂SO₄
Gasto energético		921.6 kJ			921.6 kJ
Costo (\$)		1.8			1.8

4.5. Deshidratación de ciclohexanol

Esta reacción se lleva a cabo en los laboratorios de docencia de Química Orgánica I en el tema de síntesis de alquenos, uno de los métodos más frecuentes para la preparación de un alqueno es la deshidratación del correspondiente alcohol. La deshidratación es reversible y en la mayoría de los casos la constante de equilibrio no es grande por lo que los rendimientos en el laboratorio, sin las condiciones necesarias para desplazar la reacción hacia los reactivos, son bajos.

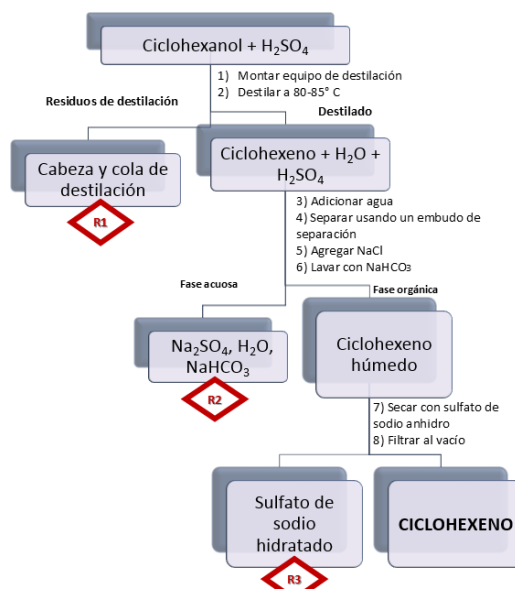
Para poder comprender las diferencias entre las técnicas experimentales a continuación se presenta un resumen de ellas en la siguiente tabla (tabla 56)

Tabla 56. Resumen de las técnicas experimentales de la reacción de síntesis de ciclohexeno.

Técnica tradicional	Técnica alternativa
En un matraz bola de 50 mL colocar 3 mL de ciclohexanol y gota a gota 0.5 mL de ácido sulfúrico.	En un matraz de bola de 50 mL colocar 4.8 mL de ciclohexanol y 0.2 g de Tonsil.
Destilar en un rango de 80-85°C.	Agregar cuerpos de ebullición y adaptar un equipo a reflujo directo durante 60 minutos.
Verter en un embudo de separación y agregar agua destilada. Separar las fases y conservar la fase orgánica.	Destilar en un rango de 80-85°C y coleccionar el destilado en una probeta de 10 mL.
Adicionar 1 g de cloruro de sodio al embudo de separación y desechar la solución saturada (inferior). Lavar 3 veces la fase orgánica con bicarbonato de sodio al 5%.	
Secar con sulfato de sodio anhidro y transferir el producto a una probeta para medir su volumen.	

4.5.1. Técnica tradicional

A continuación se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica tradicional y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.



R1: Separar las fases, mandar a incineración la fase orgánica y neutralizar la fase acuosa.
 R2: Neutralizar y desechar.
 R3: Secar para su uso posterior

Tabla 57. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

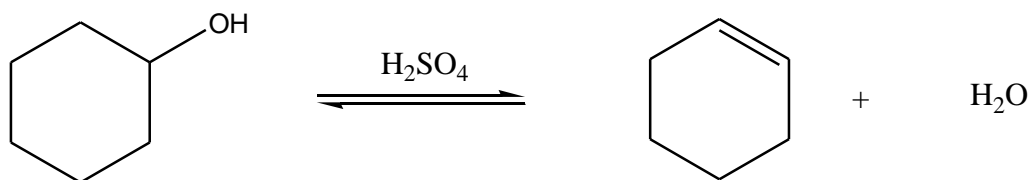
Reactivo	Cantidad
ciclohexanol	3 mL
Ácido sulfúrico concentrado	0.5 mL
Cloruro de sodio	1 g
Bicarbonato de sodio al 5%	15 mL
Sulfato de sodio anhidro	0.5 g

Tabla 58. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Ciclohexanol	1	2	0	B
Ácido sulfúrico concentrado	3	0	2	B
Cloruro de sodio	1	0	0	A
Bicarbonato de sodio	1	0	0	A
Sulfato de sodio anhidro	1	0	0	A

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



Ciclohexanol

100 g/mol

Volumen= 3 mL

ciclohexeno

82.14 g/mol

Volumen=1.3 mL

$$3 \text{ mL de ciclohexanol} \times \left(\frac{0.94 \text{ g}}{1 \text{ mL}}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de ciclohexanol}}{100.16 \text{ g}}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de ciclohexeno}}{1 \text{ mol de ciclohexanol}}\right) \times \left(\frac{82.14 \text{ g}}{1 \text{ mol de ciclohexeno}}\right)$$

$$= 2.31 \text{ g de ciclohexeno} = 1.875 \text{ mL de ciclohexeno}$$

Rendimiento teórico = 2.31 g de ciclohexeno

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{1.1 \text{ g}}{2.31 \text{ g}} \times 100 = 46.64\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{82.14 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{100.16 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 82.01\%$$

$$\% \text{ EAe} = \frac{2.31 \text{ g}}{2.82 \text{ g}} \times 100 = 81.91\%$$

$$\% \text{ ETR} = 46.64\% \times 82.01\% = 38.25\%$$

$$E = \frac{3.14 \text{ g}}{1.1 \text{ g}} = 2.9$$

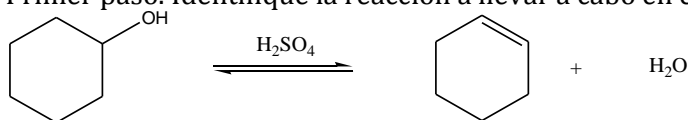
$$EM = \frac{1.1\text{g}}{2.82\text{g}} = 0.38$$

$$IM = \frac{0.00282\text{kg}}{0.0011\text{kg}} = 2.62$$

$$PM = \frac{0.0011\text{kg}}{0.00282\text{kg}} \times 100 = 38.20\%$$

Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:

C₆H₁₁OH
NaCl
H₂SO₄
NaHCO₃
Na₂SO₄

Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:

C₆H₁₁OH (1,2,0)
NaCl (1,0,0)
H₂SO₄ (3,0,2)
NaHCO₃ (1,0,0)
Na₂SO₄ (1,0,0)

Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	H ₂ SO ₄
Inflamabilidad	C ₆ H ₁₁ OH
Reactividad	H ₂ SO ₄

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
NaHCO ₃	15 mL
C ₆ H ₁₁ OH	3 mL
NaCl	1 g
Na ₂ SO ₄	0.5 g
H ₂ SO ₄	0.5 g

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- Por volumen
NaHCO₃
- Por riesgo potencial
H₂SO₄

Gasto energético

Datos de la parrilla:

120 V, 3.2A, 50/60Hz

Tiempo de calentamiento:

- 20 minutos destilación simple

La potencia (P) en watts (W) es igual al voltaje (V) en volts (V) por la corriente (I) en amperes (A).

$$P(W) = V(V) \times I(A)$$

$$P = 120 V \times 3.2 A$$

$$P = 384 W$$

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(J) = P(W) \times t(s)$$

$$E = 384 W \times 1200s$$

$$E = 460,800 J = 460.8 kJ$$

Costo

Tabla 59. Cálculo del costo de la técnica tradicional de la síntesis del ciclohexeno. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de ciclohexeno (Tradicional)				
		Costo (\$)/unidad (1kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	Ciclohexanol	707	3 mL	2.1210
Auxiliar	Ácido sulfúrico concentrado	513	0.5 mL	0.2565
	Cloruro de sodio	25.5	1 g	0.0255
	Bicarbonato de sodio al 5%	105	0.75 g	0.0787
	Sulfato de sodio anhidro	532	0.5 g	0.2660
Residuos	Hidróxido de sodio al 50 %	90	5 mL	0.4500
Total				3.1977

Manejo de residuos

Tabla 60. Evaluación del manejo de residuos de la técnica alternativa de la síntesis del ciclohexeno. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis del ciclohexeno (Tradicional)		
Residuo		Fase acuosa ácida, fase orgánica para incineración y sólidos para secar.
Clasificación		corrosivo y reactivo
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	1
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	0
	Secar y evaporar	1
	Extracción	0
Tratamientos químicos	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
	Reducción	0
Destino final	Drenaje/basura	1
	Incineración	2
	Confinamiento	0
TOTAL		9

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 61).

Tabla 61. Resultados de la síntesis de ciclohexeno mediante la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		# de experimento				Promedio
		1	2	3	4	
Economía atómica teórica (%)		82.01	82.01	82.01	82.01	82.01
Economía atómica experimental (%)		81.91	81.91	81.91	81.91	81.91
Rendimiento experimental (%)		46.64	42.13	42.13	42.13	43.26
Eficiencia de masas		0.38	0.35	0.35	0.40	0.37
Factor de aceptabilidad ambiental		2.9	4.2	4.0	3.1	3.57
Intensidad de masa		2.62	2.90	2.90	2.48	2.72
Productividad de masa		38.20	34.51	34.51	40.26	36.87
Evaluación de riesgo	Por volumen	NaHCO ₃				NaHCO₃
	Por riesgo	H ₂ SO ₄				H₂SO₄
Gasto energético		460.8 kJ				460.8 kJ
Costo (\$)		3.1977				3.1977
Manejo de residuos		9				9

4.5.2. Técnica alternativa

A continuación, se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica alternativa y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.

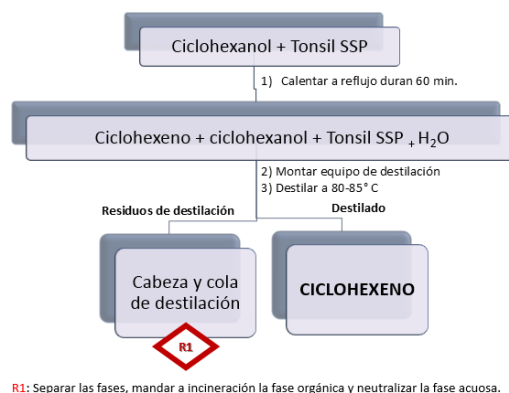


Tabla 62. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

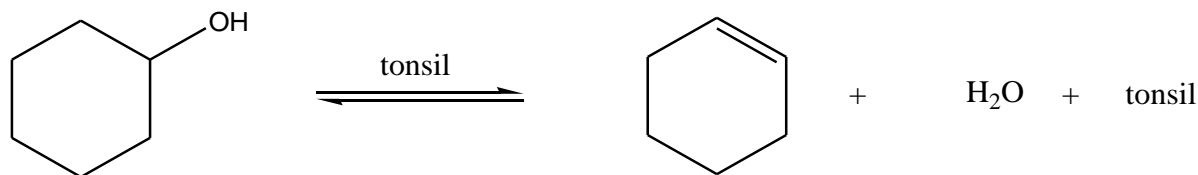
Reactivo	Cantidad
Ciclohexanol	4.8 mL
Tonsil SSP	0.2 g

Tabla 63. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Ciclohexanol	1	2	0	B
Tonsil SSP	NA	NA	NA	NA

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



Ciclohexanol

100 g/mol

Volumen= 3 mL

ciclohexeno

82.14 g/mol

Volumen=1 mL

$$3 \text{ mL de ciclohexanol} \times \left(\frac{0.94 \text{ g}}{1 \text{ mL}}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de ciclohexanol}}{100.16 \text{ g}}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de ciclohexeno}}{1 \text{ mol de ciclohexanol}}\right) \times \left(\frac{82.14 \text{ g}}{1 \text{ mol de ciclohexeno}}\right)$$

$$= 2.31 \text{ g de ciclohexeno} = 1.875 \text{ mL de ciclohexeno}$$

$$\text{Rendimiento teórico} = 2.31 \text{ g de ciclohexeno}$$

$$\% \text{Rendimiento} = \frac{0.811 \text{ g}}{2.31 \text{ g}} \times 100 = 35.11\%$$

$$\% \text{EAt} = \frac{82.14 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{100.16 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 82.01\%$$

$$\% \text{EAe} = \frac{2.32 \text{ g}}{2.82 \text{ g}} \times 100 = 81.91\%$$

$$\% \text{ETR} = 35.11\% \times 82.01\% = 28.79\%$$

$$E = \frac{1.44 \text{ g}}{0.811 \text{ g}} = 1.8$$

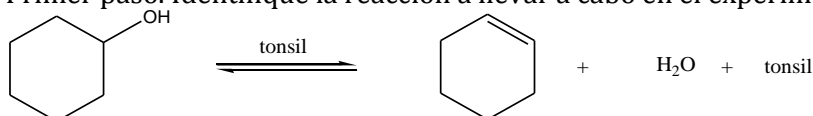
$$EM = \frac{0.811 \text{ g}}{2.82 \text{ g}} = 0.29$$

$$IM = \frac{0.00282 \text{ kg}}{0.000811 \text{ kg}} = 3.48$$

$$PM = \frac{0.000811 \text{ kg}}{0.00282 \text{ kg}} \times 100 = 28.76\%$$

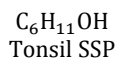
Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



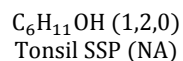
Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:



Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:



Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	$\text{C}_6\text{H}_{11}\text{OH}$
Inflamabilidad	$\text{C}_6\text{H}_{11}\text{OH}$
Reactividad	$\text{C}_6\text{H}_{11}\text{OH}$

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
$\text{C}_6\text{H}_{11}\text{OH}$	4.8 mL
Tonsil SSP	0.2 g

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- Por volumen

- $C_6H_{11}OH$
- b. Por riesgo potencial
 $C_6H_{11}OH$

Gasto energético

Datos de la parrilla:

120 V, 3.2A, 50/60Hz

Tiempo de calentamiento:

- 60 minutos a reflujo
- 20 minutos destilación simple

La potencia (P) en watts (W) es igual al voltaje (V) en volts (V) por la corriente (I) en amperes (A).

$$P(W) = V(V) \times I(A)$$

$$P = 120 V \times 3.2 A$$

$$P = 384 W$$

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(J) = P(W) \times t(s)$$

$$E = 384 W \times 4800s$$

$$E = 1\,843\,200 J = 1.843 MJ$$

Costo

Tabla 64. Cálculo del costo de la técnica alternativa de la síntesis del ciclohexanol. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de ciclohexanol (Alternativa)				
		Costo (\$)/unidad (1kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	Ciclohexanol	707	4.8 mL	3.3936
	Tonsil SSP	23.12	0.2 g	0.0046
Residuos	NaOH al 50%	90	5 mL	0.4500
Total				3.8482

Manejo de residuos

Tabla 65. Evaluación del manejo de residuos de la técnica alternativa de la síntesis del ciclohexanol. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de ciclohexanol (Alternativa)		
Residuo		Fase orgánica para incineración y fase acuosa ácida
Clasificación		corrosivo y reactivo
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	1
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	0
	Secar y evaporar	0
	Extracción	0
Tratamientos químicos	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
	Reducción	0
Destino final	Drenaje/basura	1
	Incineración	2
	Confinamiento	0
TOTAL		8

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 66).

Tabla 66. Resultados de la síntesis de ciclohexanol mediante la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación	# de experimento			Promedio
	1	2	3	
Economía atómica teórica (%)	82.01	82.01	82.01	82.01
Economía atómica experimental (%)	81.91	81.91	81.91	81.91
Rendimiento experimental (%)	35.11	45.64	42.13	40.37
Eficiencia de masas	0.29	0.37	0.35	0.33
Factor de aceptabilidad ambiental	1.8	0.9	1.0	1.36
Intensidad de masa	3.48	2.67	2.90	3.08
Productividad de masa	28.76	37.39	34.51	33.07
Evaluación de riesgo	Por volumen	C ₆ H ₁₁ OH		C₆H₁₁OH
	Por riesgo	C ₆ H ₁₁ OH		C₆H₁₁OH
Gasto energético	1.843 MJ			1.843 MJ
Costo (\$)	3.3936			3.3936
Manejo de residuos	8			8

4.6. Síntesis de un azocompuesto

Esta reacción se lleva a cabo en los laboratorios de docencia de Química Orgánica II en el tema de síntesis de azocompuestos, generados a partir de la copulación de sales de diazonio con fenoles o aminas aromáticas. Estos compuestos son de gran importancia para la industria de los colorantes. Cada tipo de amina genera un producto diferente al reaccionar con el ácido nitroso, HNO_2 . Este reactivo inestable se forma en presencia de la amina por acción de un ácido mineral sobre nitrito de sodio. Cuando una amina aromática primaria, disuelta o suspendida en un ácido mineral acuoso frío se trata con nitrito de sodio, se forma una sal de diazonio. Puesto que éstas se descomponen lentamente, aún a la temperatura de un baño de hielo, por lo que se deben emplear las soluciones una vez preparadas.

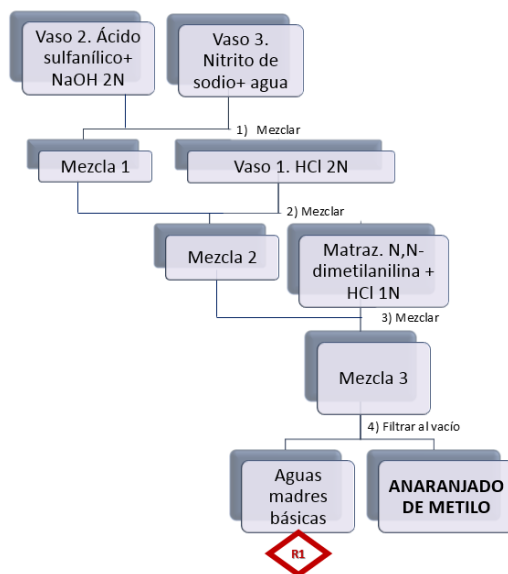
Para poder comprender las diferencias entre las técnicas experimentales a continuación se presenta un resumen de ellas en la siguiente tabla (tabla 67)

Tabla 67. Resumen de las técnicas experimentales de la reacción de síntesis de anaranjado de metilo.

Técnica tradicional	Técnica alternativa
Preparar: <ul style="list-style-type: none"> Vaso 1. Colocar 2.5 mL de HCl 2 N y poner el vaso en baño de hielo. Vaso 2. Pesar 1 g de ácido sulfanílico y agregar 2.5 mL de NaOH 2N. Vaso 3. Pesar 0.4 g de NaNO_2 y disolver en 5 mL de agua destilada. 	Colocar en un vaso de precipitados de 50 mL 0.1 g de ácido sulfanílico, 3 gotas de dimetilnilina, 3 gotas de ácido clorhídrico concentrado y 1 mL de agua.
Verter la mezcla del vaso 2 en el vaso 3 agitando suavemente, posteriormente verter la nueva mezcla al vaso 1.	Enfriar la mezcla hasta una temperatura de 0-5°C. Agregar una solución de nitrito de sodio y agitar hasta temperatura ambiente.
En un matraz Erlenmeyer de 125 mL colocar 0.6 mL de N, N- Dimetilnilina y 5 mL de HCl 1 N, y entonces, agregar el producto resultante del vaso 1.	Agregar gota a gota NaOH al 10% hasta llegar a un pH=10
Neutralizar la mezcla con NaOH 1 N.	Calentar, agitando, hasta el inicio de la ebullición.
Dejar en reposo durante 20 minutos y filtrar al vacío.	Enfriar y filtrar al vacío.

4.6.1. Técnica tradicional

A continuación se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica tradicional y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.



R1: Neutralizar y desechar.

Tabla 68. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

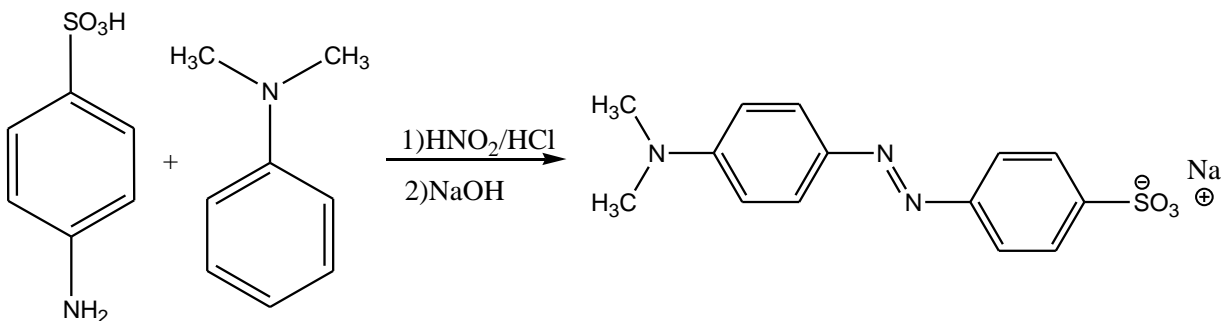
Reactivo	Cantidad
Ácido sulfanílico	1 g
N, N- dimetilanilina	0.6 mL
Nitrito de sodio	0.4 g
Ácido clorhídrico 1 N	5 mL
Ácido clorhídrico 2 N	2.5 mL
Hidróxido de sodio 1N	5 mL
Hidróxido de sodio 2 N	2.5 mL

Tabla 69. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Ácido sulfanílico	3	1	0	B
N,N-dimetilanilina	3	2	0	B
Nitrito de sodio	3	0	1	B
Ácido clorhídrico	3	0	1	B
Hidróxido de sodio	3	0	1	B

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



Ácido sulfanílico N,N- dimetilanilina
 173.19 g/mol 121.18 g/mol
 Masa= 1 g Volumen=0.6 mL

Anaranjado de metilo
 327.34 g/mol
 Masa= 1.37 g

$$1 \text{ g de ácido sulfanílico} \times \left(\frac{1 \text{ mol de ácido sulfanílico}}{173.19 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de anaranjado de metilo}}{1 \text{ mol de ácido sulfanílico}} \right) \times \left(\frac{327.34 \text{ g}}{1 \text{ mol de anaranjado de metilo}} \right) = 1.89 \text{ g de anaranjado de metilo}$$

$$0.6 \text{ mL de N,N - dimetilanilina} \times \left(\frac{0.96 \text{ g}}{1 \text{ mL}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de N,N - dimetilanilina}}{121.18 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de anaranjado de metilo}}{1 \text{ mol de N,N - dimetilanilina}} \right) \times \left(\frac{327.34 \text{ g}}{1 \text{ mol de anaranjado de metilo}} \right) = 1.56 \text{ g de anaranjado de metilo}$$

∴ la N,N - dimetilanilina es el reactivo limitante

Rendimiento teórico = 1.56 g de anaranjado de metilo

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{1.37 \text{ g}}{1.56 \text{ g}} \times 100 = 87.82\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{327.34 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{173.19 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 121.18 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 68.9953 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 90.09\%$$

$$\% \text{ EAe} = \frac{1.56 \text{ g}}{1 \text{ g} + 0.4 \text{ g} + 0.6 \text{ g}} \times 100 = 78.00\%$$

$$\% \text{ ETR} = 87.82\% \times 90.09\% = 79.11\%$$

$$E = \frac{7.17 \text{ g}}{1.37 \text{ g}} = 5.2$$

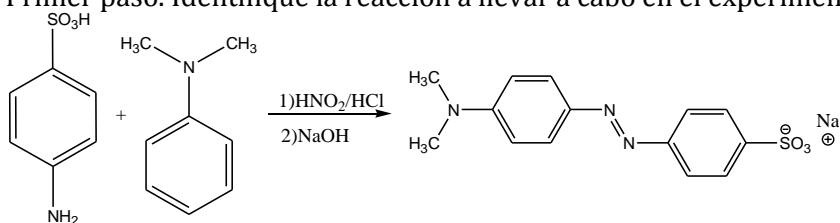
$$EM = \frac{1.37 \text{ g}}{1 \text{ g} + 0.4 \text{ g} + 0.6 \text{ g}} = 0.69$$

$$IM = \frac{0.002 \text{ kg}}{0.00137 \text{ kg}} = 1.46$$

$$PM = \frac{0.00137 \text{ kg}}{0.002 \text{ kg}} \times 100 = 68.50\%$$

Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:

$C_6H_7NO_3S$
 $C_8H_{11}N$
 $NaNO_3$
 HCl
 $NaOH$

Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:

$C_6H_7NO_3S$ (3,1,0)
 $C_8H_{11}N$ (3,2,0)
 $NaNO_3$ (3,0,1)
 HCl (3,0,1)
 $NaOH$ (3,0,1)

Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	TODOS
Inflamabilidad	$C_8H_{11}N$
Reactividad	$NaNO_3$, HCl , $NaOH$

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
HCl	5 mL
$NaOH$	5 mL
$C_6H_7NO_3S$	1 g
$C_8H_{11}N$	0.6 mL
$NaNO_3$	0.4 g

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- c. Por volumen
 HCl , $NaOH$
- d. Por riesgo potencial
 $C_8H_{11}N$, $NaNO_3$, HCl , $NaOH$

Gasto energético

En este caso no aplica porque la reacción se lleva a cabo a temperatura ambiente.

Costo

Tabla 70. Cálculo del costo de la técnica tradicional de la síntesis del anaranjado de metilo. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de anaranjado de metilo (Tradicional)				
		Costo (\$)/unidad (1kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	Ácido sulfanílico	1128	1 g	1.1280
	N,N-dimetilanilina	558	0.6 mL	0.3348
	Nitrito de sodio	1492	0.4 g	0.5968
Auxiliar	Ácido clorhídrico	60	0.4 mL	0.0240
	Hidróxido de sodio	680	0.4 g	0.2720
Residuos	Ácido clorhídrico (5 mL al 50%)	60	0.25 mL	0.0150
Total				2.3706

Manejo de residuos

Tabla 71. Evaluación del manejo de residuos de la técnica alternativa de la síntesis del anaranjado de metilo. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis del anaranjado de metilo (Tradicional)		
Residuo		Aguas madres básicas.
Clasificación		corrosivo y reactivo
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	0
	Secar y evaporar	0
	Extracción	0
Tratamientos químicos	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
	Reducción	0
Destino final	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
	Confinamiento	0
TOTAL		5

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 72).

Tabla 72. Resultados de la síntesis de ciclohexeno mediante la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		# de experimento			Promedio
		1	2	3	
Economía atómica teórica (%)		90.09	90.09	90.09	90.09
Economía atómica experimental (%)		78.00	78.00	78.00	78.00
Rendimiento experimental (%)		87.82	80.13	98.08	88.68
Eficiencia de masas		0.69	0.63	0.77	0.69
Factor de aceptabilidad ambiental		5.2	5.7	4.7	5.22
Intensidad de masa		1.46	1.60	1.31	1.46
Productividad de masa		68.50	62.50	76.50	69.17
Evaluación de riesgo	Por volumen	HCl, NaOH			HCl, NaOH
	Por riesgo	C ₈ H ₁₁ N, NaNO ₃ , HCl, NaOH			C₈H₁₁N, NaNO₃, HCl, NaOH
Gasto energético		NA			NA
Costo (\$)		2.3706			2.3706
Manejo de residuos		5			5

4.6.2. Técnica alternativa

A continuación, se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica alternativa y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.

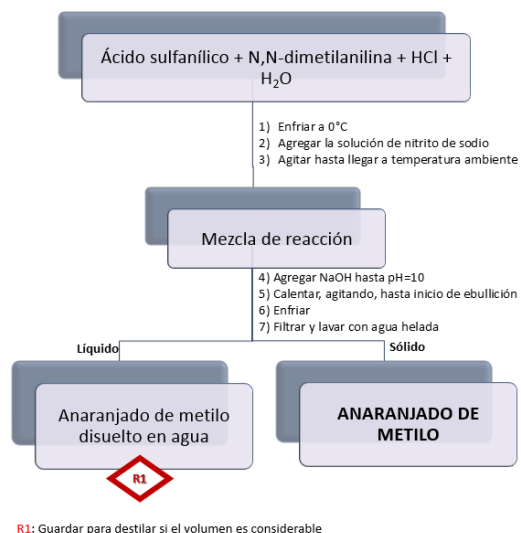


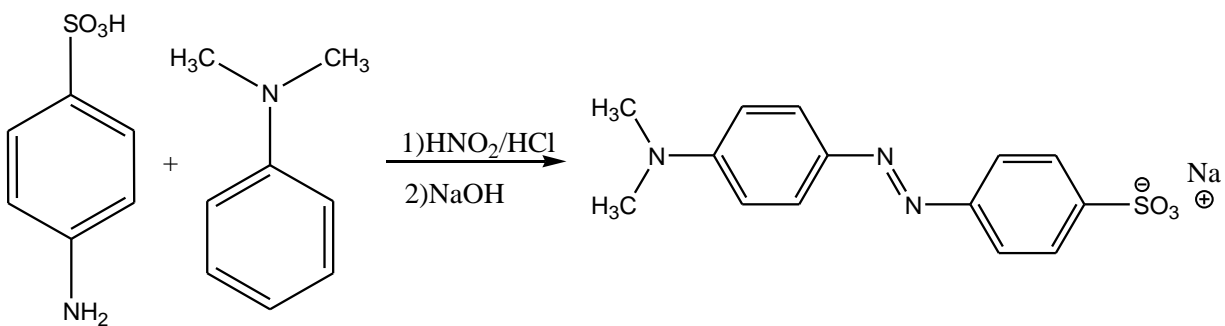
Tabla 73. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Ácido sulfanílico	0.1 g
N, N- dimetilanilina	3 gotas
Nitrito de sodio	0.15 g
Ácido clorhídrico conc.	3 gotas
Hidróxido de sodio al 10%	5 mL

Tabla 74. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Ácido sulfanílico	3	1	0	B
N,N-dimetilanilina	3	2	0	B
Nitrito de sodio	3	0	1	B
Ácido clorhídrico	3	0	1	B
Hidróxido de sodio	3	0	1	B

Evaluación de la sustentabilidad



Ácido sulfanílico	N,N- dimetilanilina	Anaranjado de metilo
173.19 g/mol	121.18 g/mol	327.34 g/mol
Masa= 0.1 g	Volumen=0.1 mL	Masa= 0.1229 g

$$0.1 \text{ g de } \text{ác sulfanílico} \times \left(\frac{1 \text{ mol de } \text{ác sulfanílico}}{173.19 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de anaranjado de metilo}}{1 \text{ mol de } \text{ác sulfanílico}} \right) \times \left(\frac{327.34 \text{ g}}{1 \text{ mol de anaranjado de metilo}} \right) = 0.189 \text{ g de anaranjado de metilo}$$

$$0.1 \text{ mL de N,N - dimetilanilina} \times \left(\frac{0.96 \text{ g}}{1 \text{ mL}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de N,N - dimetilanilina}}{121.18 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de anaranjado de metilo}}{1 \text{ mol de N,N - dimetilanilina}} \right) \times \left(\frac{327.34 \text{ g}}{1 \text{ mol de anaranjado de metilo}} \right) = 0.26 \text{ g de anaranjado de metilo}$$

∴ el ácido sulfanílico es el reactivo limitante

Rendimiento teórico = 0.189 g de anaranjado de metilo

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{0.189 \text{ g}}{0.1229 \text{ g}} \times 100 = 65.03\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{327.34 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{173.19 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 121.18 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 68.9953 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 90.09\%$$

$$\% \text{ EAe} = \frac{0.189 \text{ g}}{0.1 \text{ g} + 0.96 \text{ g} + 0.03 \text{ g}} \times 100 = 83.63\%$$

$$\% \text{ ETR} = 65.03\% \times 90.09\% = 58.58\%$$

$$E = \frac{22.077}{0.1229 \text{ g}} = 179.6$$

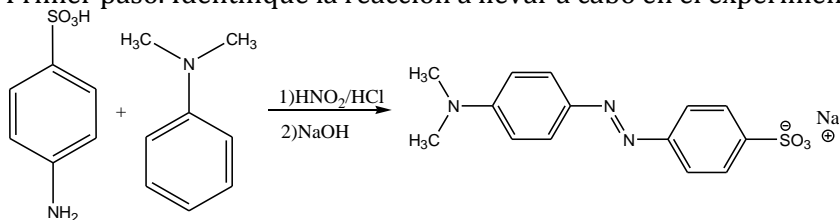
$$EM = \frac{0.1229 \text{ g}}{0.1 \text{ g} + 0.96 \text{ g} + 0.03 \text{ g}} = 0.41$$

$$IM = \frac{0.000301 \text{ kg}}{0.0001229 \text{ kg}} = 2.45$$

$$PM = \frac{0.0001229 \text{ kg}}{0.000301 \text{ kg}} \times 100 = 40.83\%$$

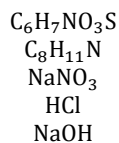
Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



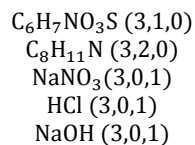
Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:



Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:



Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	TODOS
Inflamabilidad	$C_8H_{11}N$
Reactividad	$NaNO_3$, HCl , $NaOH$

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
$NaOH$	5 mL
HCl	0.1 mL
$C_6H_7NO_3S$	0.1 g
$C_8H_{11}N$	0.1 mL
$NaNO_3$	0.03 g

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- Por volumen
 $NaOH$
- Por riesgo potencial
 $C_8H_{11}N$, $NaNO_3$, HCl , $NaOH$

Gasto energético

Datos de la parrilla:

120 V, 3.2A, 50/60Hz

Tiempo de calentamiento:

- 5 minutos hasta ebullición

La potencia (P) en watts (W) es igual al voltaje (V) en volts (V) por la corriente (I) en amperes (A).

$$P(W) = V(V) \times I(A)$$

$$P = 120 V \times 3.2 A$$

$$P = 384 W$$

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(J) = P(W) \times t(s)$$

$$E = 384 W \times 300s$$

$$E = 115\,200 J = 115.2 kJ$$

Costo

Tabla 75. Cálculo del costo de la técnica alternativa de la síntesis del anaranjado de metilo. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de anaranjado de metilo (Alternativa)				
		Costo (\$)/unidad (1kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	Ácido sulfanílico	1128	0.1 g	0.1128
	N,N-dimetilanilina	558	0.1 mL	0.0558
	Nitrito de sodio	1492	0.03 g	0.0447
Auxiliar	Ácido clorhídrico	60	0.1 mL	0.0060
	Hidróxido de sodio	680	0.5 g	0.3400
Residuos	Ácido clorhídrico (5 mL al 50%)	60	0.25 mL	0.0150
Total				0.5743

Manejo de residuos

Tabla 76. Evaluación del manejo de residuos de la técnica alternativa de la síntesis del anaranjado de metilo. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de anaranjado de metilo (Alternativa)		
Residuo		Aguas madres básicas
Clasificación		corrosivo y reactivo
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	1
	Secar y evaporar	0
Tratamientos químicos	Extracción	0
	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
Destino final	Reducción	0
	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
Confinamiento		0
TOTAL		6

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 77).

Tabla 77. Resultados de la síntesis de anaranjado de metilo mediante la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		# de experimento				Promedio
		1	2	3	4	
Economía atómica teórica (%)		90.09	90.09	90.09	90.09	90.09
Economía atómica experimental (%)		83.63	83.63	83.63	83.63	83.63
Rendimiento experimental (%)		65.03	89.37	70.32	67.94	73.16
Eficiencia de masas		0.41	0.56	0.44	0.41	0.45
Factor de aceptabilidad ambiental		179.6	116.7	104.9	272.1	168.33
Intensidad de masa		2.45	1.78	2.26	2.34	2.21
Productividad de masa		40.83	56.11	44.15	42.66	45.94
Evaluación de riesgo	Por volumen	NaOH				NaOH
	Por riesgo	C ₈ H ₁₁ N, NaNO ₃ , HCl, NaOH				C₈H₁₁N, NaNO₃, HCl, NaOH
Gasto energético		115.2 kJ				115.2 kJ
Costo (\$)		0.5743				0.5743
Manejo de residuos		6				6

4.7. Síntesis de borneol

Esta reacción se lleva a cabo en los laboratorios de docencia de Química Orgánica II en el tema de reacciones de las cetonas, el alcanfor es una cetona natural que se obtiene de hervir la madera de los árboles *Cinnamomun canphora*. Actualmente gran parte de la producción natural de alcanfor ha sido reemplazada por la síntesis química, basándose en compuestos contenidos en la trementina. El alcanfor es un compuesto volátil, blanco y cristalino que tiene un olor característico. Es un fuerte cardioestimulante y antiespasmódico digestivo.

4.7.1. Técnica tradicional

A continuación se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica tradicional y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.

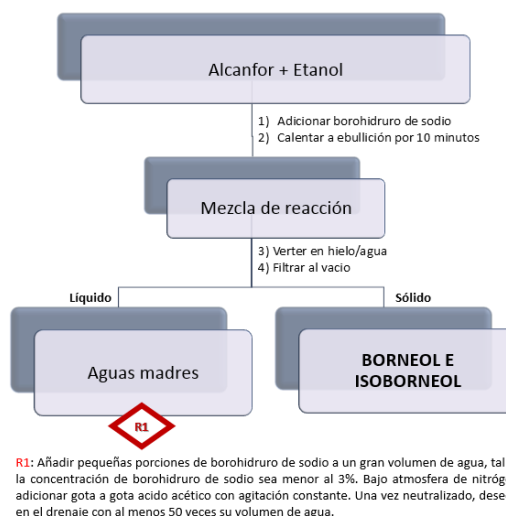


Tabla 78. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

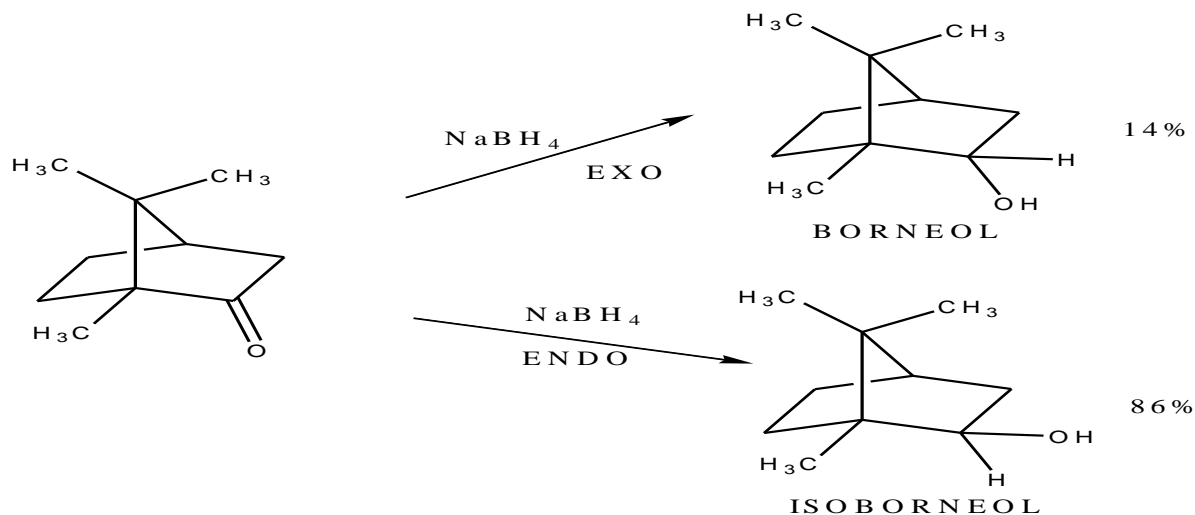
Reactivo	Cantidad
1,7,7-trimetilbicyclo[2.2.1]heptan-2-ona (comercial)	3 g
Etanol	10 mL
Borohidruro de sodio	1.5 g

Tabla 79. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Alcanfor	2	2	0	B
Etanol	0	3	0	B
Borohidruro de sodio	3	4	2	B

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



1,7,7-trimetilbiciclo[2.2.1]heptan-2-ona
 152.23 g/mol
 Masa= 3 g

Borneol
 154.25 g/mol
 Masa: 0.298 g

$$3 \text{ g de alcanfor} \times \left(\frac{1 \text{ mol de alcanfor}}{152.23 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de borneol}}{1 \text{ mol de alcanfor}} \right) \times \left(\frac{154.25 \text{ g}}{1 \text{ mol de borneol}} \right) \times \left(\frac{14}{100} \right) = 0.42 \text{ g de borneol}$$

Rendimiento teórico = 0.42 g de borneol

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{0.298 \text{ g}}{0.42 \text{ g}} \times 100 = 70.92\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{154.25 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{152.23 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 37.84 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 81.15\%$$

$$\% \text{ EAe} = \frac{0.42 \text{ g}}{3 \text{ g} + 1.5 \text{ g}} \times 100 = 9.33\%$$

$$\% \text{ ETR} = 70.92\% \times 81.15\% = 57.55\%$$

$$E = \frac{85.34 \text{ g}}{0.298 \text{ g}} = 286.5$$

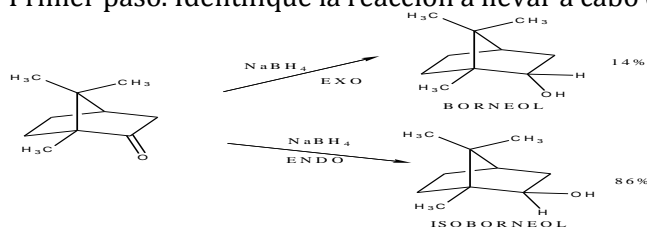
$$EM = \frac{0.298 \text{ g}}{3 \text{ g} + 1.5 \text{ g}} = 0.07$$

$$IM = \frac{0.0045 \text{ kg}}{0.000298 \text{ kg}} = 15.11$$

$$PM = \frac{0.000298}{0.0045 \text{ kg}} \times 100 = 6.62\%$$

Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



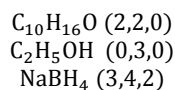
Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:



Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:



Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	NaBH ₄
Inflamabilidad	NaBH ₄
Reactividad	NaBH ₄

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
C ₂ H ₅ OH	10 mL
C ₁₀ H ₁₆ O	3 g
NaBH ₄	1.5 g

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- Por volumen
C₂H₅OH
- Por riesgo potencial
NaBH₄

Gasto energético

Datos de la parrilla:

120 V, 3.2A, 50/60Hz

Tiempo de calentamiento:

- 10 minutos hasta ebullición

La potencia (P) en watts (W) es igual al voltaje (V) en volts (V) por la corriente (I) en amperes (A).

$$P(W) = V(V) \times I(A)$$

$$P = 120 V \times 3.2 A$$

$$P = 384 W$$

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(J) = P(W) \times t(s)$$

$$E = 384 W \times 600s$$

$$E = 230\ 400 J = 230.4 kJ$$

Costo

Tabla 80. Cálculo del costo de la técnica tradicional de la síntesis del borneol. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de borneol (Tradicional)				
		Costo (\$)/unidad (1kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	1,7,7-trimetilbicyclo[2.2.1]heptan-2-ona	1166.66	3 g	3.500
	Etanol	208	10 mL	2.080
	Borohidruro de sodio	9636	1.5 g	14.450
Auxiliar	Agua destilada	31	25 mL	0.775
Residuos	Ácido acético	514	20 mL	10.280
Total				31.085

Manejo de residuos

Tabla 81. Evaluación del manejo de residuos de la técnica alternativa de la síntesis del borneol.
(Elaboración propia, 2016).

Síntesis del borneol (Tradicional)		
Residuo	Aguas madres	
Clasificación	corrosivo y reactivo	
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	0
	Secar y evaporar	0
Tratamientos químicos	Extracción	0
	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
Destino final	Reducción	0
	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
	Confinamiento	0
TOTAL		5

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 82).

Tabla 82. Resultados de la síntesis de borneol mediante la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

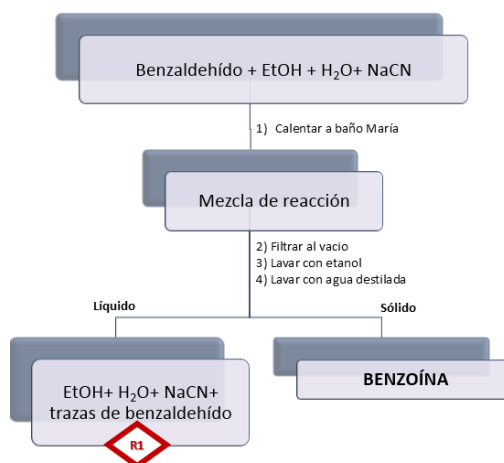
Parámetros de evaluación		# de experimento			Promedio
		1	2	3	
Economía atómica teórica (%)		81.15	81.15	81.15	81.15
Economía atómica experimental (%)		9.33	9.33	9.33	9.33
Rendimiento experimental (%)		70.92	73.69	97.67	80.76
Eficiencia de masas		0.07	0.07	0.09	0.08
Factor de aceptabilidad ambiental		286.5	265.8	105.2	219.16
Intensidad de masa		15.11	14.54	10.71	13.45
Productividad de masa		6.62	6.88	9.33	7.61
Evaluación de riesgo	Por volumen	C ₂ H ₅ OH			C₂H₅OH
	Por riesgo	NaBH ₄			NaBH₄
Gasto energético		230.4 kJ			230.4 kJ
Costo (\$)		31.085			31.085
Manejo de residuos		5			5

4.8. Síntesis de benzoína

La benzoína se obtiene por dimerización de benzaldehído en presencia de cantidades catalíticas de cianuro. El proceso empieza con el ataque de un cianuro al carbono del carbonilo del aldehído, el producto, está en equilibrio con la forma tautomérica protonado sobre el oxígeno ya que el carbanión está estabilizado por resonancia. La forma carbaniónica ataca al carbonilo de otra unidad de aldehído y la benzoína se forma liberando de nuevo el ion de cianuro. Esta reacción es conocida como condensación de benzoína y se puede extender a más aldehídos aromáticos. Pasa por la inversión del carácter electrónico de un centro carbonílico.

4.8.1. Técnica alternativa

A continuación se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica alternativa y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.



R1: Realizar prueba de cianuros y recuperar el etanol por destilación. Si la prueba resulta positiva tratar con solución de hipoclorito de sodio y neutralizar.

Tabla 83. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

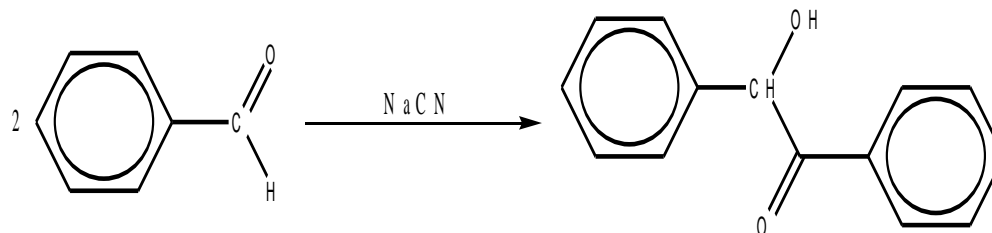
Reactivo	Cantidad
Benzaldehído	2 mL
Etanol	4 mL
Cianuro de sodio	0.25 g

Tabla 84. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Benzaldehído	2	2	0	B
Etanol	0	3	0	B
Cianuro de sodio	3	0	0	B

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



Benzaldehído

106.13 g/mol

Volumen= 2 mL

Benzoína

212.2 g/mol

Masa: 1.63 g

$$2 \text{ mL de benzaldehído} \times \left(\frac{1.0415 \text{ g}}{1 \text{ mL}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de benzaldehído}}{106.13 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de benzoína}}{2 \text{ mol de benzaldehído}} \right) \times \left(\frac{212.2 \text{ g}}{1 \text{ mol de benzoína}} \right)$$

$$= 2.08 \text{ g de benzoína}$$

Rendimiento teórico = 2.08 g de benzoína

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{1.63 \text{ g}}{2.08 \text{ g}} \times 100 = 78.37\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{212.2 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{\left(106.13 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \right) * 2} \times 100 = 99.97\%$$

$$\% \text{ EAe} = \frac{2.08 \text{ g}}{2.083 \text{ g}} \times 100 = 99.86\%$$

$$\% \text{ ETR} = 78.37\% \times 99.97\% = 78.35\%$$

$$E = \frac{2.511 \text{ g}}{1.63 \text{ g}} = 1.5$$

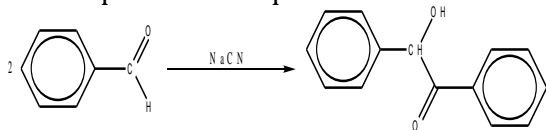
$$EM = \frac{1.63 \text{ g}}{2.083 \text{ g}} = 0.78$$

$$IM = \frac{0.005493 \text{ g}}{0.00163 \text{ kg}} = 3.37$$

$$PM = \frac{0.00163}{0.005493 \text{ kg}} \times 100 = 29.67\%$$

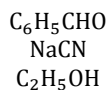
Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



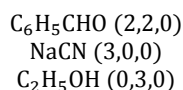
Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:



Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:



Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	NaCN
Inflamabilidad	C ₂ H ₅ OH
Reactividad	

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
C ₂ H ₅ OH	4 mL
C ₆ H ₅ CHO	2 mL
NaCN	0.25 g

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- Por volumen
C₂H₅OH
- Por riesgo potencial
C₂H₅OH y NaCN

Gasto energético

Datos de la parrilla:

120 V, 3.2A, 50/60Hz

Tiempo de calentamiento:

- 20 minutos a baño María

La potencia (P) en watts (W) es igual al voltaje (V) en volts (V) por la corriente (I) en amperes (A).

$$P(W) = V(V) \times I(A)$$

$$P = 120 V \times 3.2 A$$



$$P = 384 \text{ W}$$

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(J) = P(W) \times t(s)$$

$$E = 384 \text{ W} \times 1200s$$

$$E = 460\,800 \text{ J} = 460.8 \text{ kJ}$$

Costo

Tabla 85. Cálculo del costo de la técnica alternativa de la síntesis del benzoína. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de benzoína (Alternativa)				
		Costo (\$)/unidad (1kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	Benzaldehído	400	2 mL	0.8000
	Etanol	208	4 mL	0.8320
	Cianuro de sodio	1178	0.25 g	0.2945
Auxiliar	Agua destilada	31	10 mL	0.3100
Residuos	Hipoclorito de sodio	17.5	20 mL	0.3500
Total				2.5865

Manejo de residuos

Tabla 86. Evaluación del manejo de residuos de la técnica alternativa de la síntesis del benzoína. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis del benzoína (Alternativa)		
Residuo		Aguas madres con posible presencia de cianuros y etanol.
Clasificación		Nocivo e inflamable
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	1
	Secar y evaporar	0
Tratamientos químicos	Extracción	0
	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	1
Destino final	Reducción	0
	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
Confinamiento		0
TOTAL		7

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 87).

Tabla 87. Resultados de la síntesis de benzoína mediante la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		# de experimento			Promedio
		1	2	3	
Economía atómica teórica (%)		99.97	99.97	99.97	99.97
Economía atómica experimental (%)		99.86	99.86	99.86	99.86
Rendimiento experimental (%)		77.04	78.37	83.27	79.56
Eficiencia de masas		0.77	0.78	0.83	0.79
Factor de aceptabilidad ambiental		1.4	1.5	1.4	1.45
Intensidad de masa		3.43	3.37	3.17	3.32
Productividad de masa		29.17	29.67	31.53	30.13
Evaluación de riesgo	Por volumen	C ₂ H ₅ OH			C₂H₅OH
	Por riesgo	C ₂ H ₅ OH y NaCN			C₂H₅OH y NaCN
Gasto energético		460.8 kJ			460.8 kJ
Costo (\$)		2.5865			2.5865
Manejo de residuos		7			7

4.9. Síntesis de furfural

Esta reacción se lleva a cabo en los laboratorios de docencia de Química Orgánica II en el tema de síntesis de heterociclos. El furfural es un compuesto químico que tiene alguna importancia industrial, es un producto semisintético obtenido a partir de materias primas ricas en pentosanos, los cuales son polisacáridos de pentosas (azúcares de 5 carbonos).

Los pentosanos abundan tanto como la celulosa en la naturaleza. El pentosano más abundante es el xilano, uno de los componentes de la madera, el cual es un polisacárido de la D-xilosa con enlaces β -1,4- (similares a los enlaces de la glucosa en la celulosa). El xilano representa del 25% al 30% de los cereales y granos (del 32% al 36% en el salvado); del 15% al 25% de la madera de árbol y del 5% al 15% de la madera de coníferas.

Sólo unos pocos de los residuos fibrosos que contienen pentosanos se han utilizado en la manufactura del furfural.

El furfural tiene propiedades excepcionales como disolvente, con una viscosidad baja en un rango amplio de temperatura. Es miscible en los solventes orgánicos más comunes y un poco soluble en compuestos con hidrocarburos saturados. Eso lo convierte en un solvente selectivo muy útil para algunos usos industriales.

4.9.1. Técnica alternativa

A continuación se desglosará la información necesaria para la evaluación de la técnica alternativa y posteriormente se desarrollará la evaluación para esta técnica experimental.

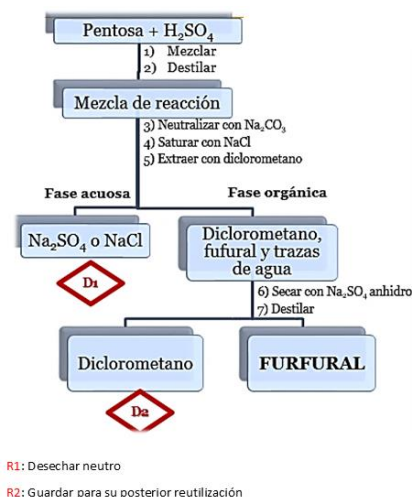


Tabla 88. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Ácido sulfúrico al 20 %	50 mL
Diclorometano	15 mL
Papa	7.5 g
Cloruro de sodio	El necesario

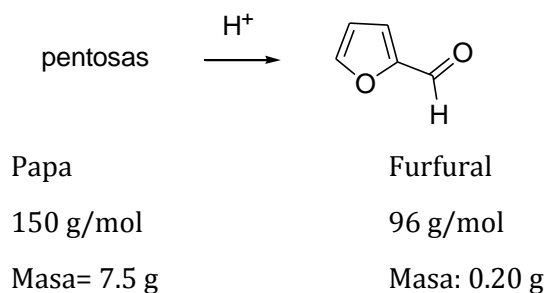
Sulfato de sodio anhidro	El necesario
--------------------------	--------------

Tabla 89. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
Ácido sulfúrico	3	0	2	B
Diclorometano	2	0	0	B
Cloruro de sodio	1	0	0	A
Sulfato de sodio anhidro	1	1	2	B

Evaluación de la sustentabilidad

A continuación se realizó el cálculo de los parámetros basado en uno de los productos obtenidos



$$7.5 \text{ g de pentosa} \times \left(\frac{1 \text{ mol de pentosa}}{150 \text{ g}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ mol de furfural}}{1 \text{ mol de pentosa}} \right) \times \left(\frac{96 \text{ g}}{1 \text{ mol de furfural}} \right)$$

$$= 4.8 \text{ g de furfural}$$

$$\text{Rendimiento teórico} = 4.8 \text{ g de furfural}$$

$$\% \text{ Rendimiento} = \frac{0.2 \text{ g}}{4.8 \text{ g}} \times 100 = 4.16\%$$

$$\% \text{ EAt} = \frac{96 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{150 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \times 100 = 64\%$$

$$\% \text{ EAe} = \frac{4.8 \text{ g}}{7.5 \text{ g}} \times 100 = 64\%$$

$$\% \text{ ETR} = 4.16\% \times 64\% = 2.66\%$$

$$E = \frac{52 \text{ g}}{0.2 \text{ g}} = 260$$

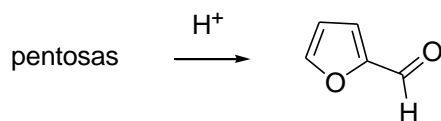
$$EM = \frac{0.2 \text{ g}}{52.3 \text{ g}} = 0.004$$

$$IM = \frac{0.0523 \text{ kg}}{0.0002 \text{ kg}} = 261.5$$

$$PM = \frac{0.0002 \text{ kg}}{0.0523 \text{ kg}} \times 100 = 4.2\%$$

Evaluación del riesgo

Primer paso. Identifique la reacción a llevar a cabo en el experimento



Segundo paso. Haga una lista de los reactivos involucrados en el experimento.

Reactivos:

H₂SO₄
CH₂Cl₂
NaCl
Na₂SO₄

Tercer paso. Identifique los códigos de riesgo de cada reactivo

Códigos de riesgo:

H₂SO₄ (3,0,2)
CH₂Cl₂ (2,0,0)
NaCl (1,0,0)
Na₂SO₄ (1,1,2)

Cuarto paso. De acuerdo con los códigos, identifique qué reactivo presenta mayor riesgo potencial, para la salud, inflamabilidad y reactividad:

Riesgo	Reactivo
Salud	H ₂ SO ₄
Inflamabilidad	Na ₂ SO ₄
Reactividad	H ₂ SO ₄ y Na ₂ SO ₄

Quinto paso. Verificar el volumen o cantidad a usar y ordénelos de mayor a menor:

Reactivo	Cantidad (mL; g)
H ₂ SO ₄	50 mL
CH ₂ Cl ₂	15 mL
NaCl	---
Na ₂ SO ₄	---

Sexto paso. Seleccionar el o los compuestos más riesgosos del experimento:

- c. Por volumen
H₂SO₄
- d. Por riesgo potencial
H₂SO₄ y Na₂SO₄

Gasto energético

Datos de la parrilla:

120 V, 3.2A, 50/60Hz

Tiempo de calentamiento:

- 40 minutos a reflujo

La potencia (P) en watts (W) es igual al voltaje (V) en volts (V) por la corriente (I) en amperes (A).

$$P(W) = V(V) \times I(A)$$

$$P = 120 V \times 3.2 A$$



$$P = 384 \text{ W}$$

La energía (E) en joules (J) es igual a la potencia en watts (W), por el periodo de tiempo (t) en segundos (s):

$$E(J) = P(W) \times t(s)$$

$$E = 384 \text{ W} \times 1200s$$

$$E = 460\,800 \text{ J} = 460.8 \text{ kJ}$$

Costo

Tabla 90. Calculo del costo de la técnica alternativa de la síntesis del furfural. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis de furfural (Alternativa)				
		Costo (\$)/unidad (1kg o 1L)	Cantidad	Costo real (\$)
Materia prima	Cascara de papa residual	---	7.5 g	---
Auxiliar	Ácido sulfúrico	513	50 mL	25.6500
	Diclorometano	616	15 mL	9.2400
	Cloruro de sodio	25.5	5 g	0.1275
	Sulfato de sodio anhidro	532	5 g	2.6600
Residuos	Hidróxido de sodio al 50%	90	20 mL	1.8000
Total				39.4775

Manejo de residuos

Tabla 91. Evaluación del manejo de residuos de la técnica alternativa de la síntesis del furfural. (Elaboración propia, 2016).

Síntesis del furfural (Alternativa)		
Residuo		Aguas madres ácidas y diclorometano.
Clasificación		Corrosivo e inflamable
Equipo de protección	Bata	1
	Lentes	1
	Guantes	1
	Mascarilla	0
Tratamientos físicos	Separación de fases	0
	Sedimentación	0
	Filtración	0
	Adsorción con carbón activado	0
	Destilación	1
	Secar y evaporar	0
	Extracción	0

Tratamientos químicos	Neutralización	1
	Precipitación química	0
	Floculación química	0
	Oxidación	0
	Reducción	0
Destino final	Drenaje/basura	1
	Incineración	0
	Confinamiento	0
TOTAL		6

Después de realizar los cálculos para cada uno de los productos sintetizados, se presenta la siguiente tabla con los resultados (Tabla 92).

Tabla 92. Resultados de la síntesis de furfural mediante la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación	# de experimento			Promedio
	1	2	3	
Economía atómica teórica (%)	64.00	64.00	64.00	64.00
Economía atómica experimental (%)	64.00	64.00	64.00	64.00
Rendimiento experimental (%)	4.20	4.20	4.20	4.20
Eficiencia de masas	0.004	0.004	0.004	0.00
Factor de aceptabilidad ambiental	260.0	260.0	260.0	260.00
Intensidad de masa	261.50	261.50	261.50	261.50
Productividad de masa	4.02	4.02	4.02	4.02
Evaluación de riesgo	Por volumen	H ₂ SO ₄		H₂SO₄
	Por riesgo	H ₂ SO ₄ y Na ₂ SO ₄		H₂SO₄ y Na₂SO₄
Gasto energético	460.8 kJ			460.8 kJ
Costo (\$)	39.4775			39.4775
Manejo de residuos	6			6

4.10 Implementación de la estrategia

Se probaron 3 técnicas experimentales arriba descritas, síntesis de ácido acetilsalicílico (anexo 1), síntesis de *p*-hidroxiacetanilida (anexo 2) y síntesis de ácido fumárico (anexo 3), las dos primeras se probaron en 2 diferentes grupos de laboratorio de química orgánica II, mientras que la última se probó en 3 grupos de laboratorio de química orgánica I. A continuación se presentan los valores finales (promedios de los grupos de prueba) para cada reacción.

Tabla 93. Resultados de la evaluación de aceptabilidad ambiental en los grupos de prueba.
(Elaboración propia, 2016)

Materia	Orgánica I	Orgánica II		Resultados de la evaluación de la aceptabilidad ambiental		
Grupos de prueba	3	2				
Práctica	Ácido fumárico	Aspirina	Paracetamol	Ácido fumárico	Aspirina	Paracetamol
Parámetros						
EAt (%)	100	75	72	100	75	72
E Ae (%)	42	39	77	42	39	77
%R	22	85	78	93	86	53
EM	0.22	0.31	0.64	0.40	0.33	0.38
E	13	71	81	0.78	19.93	0.00

4.10.1. Percepción de los alumnos

Se realizaron encuestas de respuesta cerrada (ver metodología) para conocer la percepción de los alumnos, en donde se probaron las técnicas anteriormente analizadas, en total se encuestaron a 51 alumnos de Ingeniería Bioquímica Industrial y 38 de Ingeniería de los Alimentos. Los resultados se encuentran en la tabla 94, donde se muestra el número de alumnos que seleccionaron cada opción y se presentan por tonalidades para distinguir las cifras mayores de las menores.

Tabla 94. Resultados de la encuesta realizada a los alumnos

Pregunta	IBI			IA		
	Sí	No	Nose	Sí	No	Nose
¿Es importante conocer los parámetros de economía atómica teórica y experimental, factor de aceptabilidad, eficiencia de masas para la realización de una práctica?	45	2	4	30	1	7
¿Consideras que el formato del protocolo está más completo que los que has utilizado?	45	2	4	24	9	5
¿Es la primera vez que escuchas el concepto de aceptabilidad ambiental?	40	11	0	32	6	1
¿Los codigos de riesgo que vienen en el protocolo te permiten tomar medidas adicionales a la hora de realizar el experimento?	50	1	0	38	0	0
Si tuvieras 2 alternativas para la síntesis de un mismo producto, una usando mechero pero con menos rendimiento y menor consumo energético, y con microondas con mayor rendimiento y mayor gasto energético. ¿Será suficiente esta información para que tú selecciones una de las rutas?	35	7	9	16	12	10

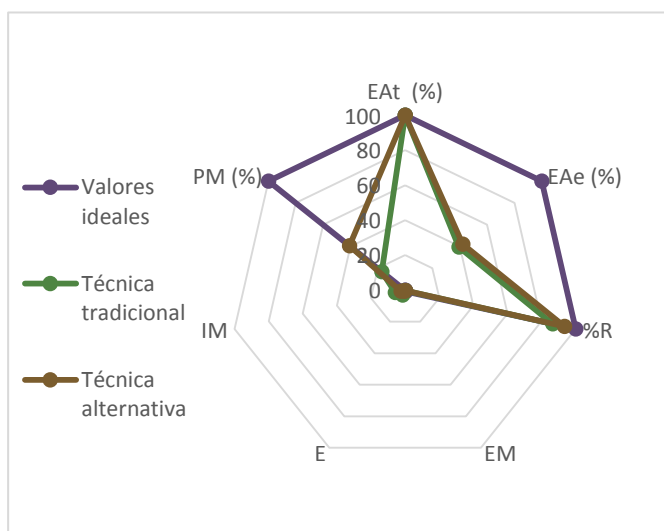
Discusión

5.1 Ácido fumárico

A continuación, se presentará los resultados de la evaluación de la aceptabilidad de ambas técnicas.

Tabla 95. Resultados de la evaluación de aceptabilidad ambiental, (Elaboración propia, 2016)

Parámetros de evaluación		Técnica tradicional	Técnica alternativa
Economía atómica teórica (%)		100	100.00
Economía atómica experimental (%)		39.36	42.00
Rendimiento experimental (%)		86.55	93.40
Eficiencia de masas		0.20	0.40
Factor de aceptabilidad ambiental		3.20	0.78
Intensidad de masa		5.88	2.50
Productividad de masa (%)		17.02	40.06
Evaluación de riesgo	Por volumen	HCl	CH₃COOH
	Por riesgo	C₄H₂O₃	Br₂
Gasto energético		615.6 kJ	6.192J
Costo económico (\$)		2.27	9.75
Manejo de residuos		5	6



Al observar los resultados de las evaluaciones, podemos percatarnos que la técnica alternativa es mejor en 7 de 10 valores cuantitativos, además los 6.192 J que se usan en la misma provienen de una energía renovable (energía solar) y este gasto energético es mucho menor que en el caso de la técnica tradicional que es de 615.6 kJ. Los únicos dos valores en los que la técnica tradicional obtuvo un mejor valor es en el costo económico que es aproximadamente un cuarto del costo que implica que un equipo lleve a cabo la técnica alternativa. El segundo es en la

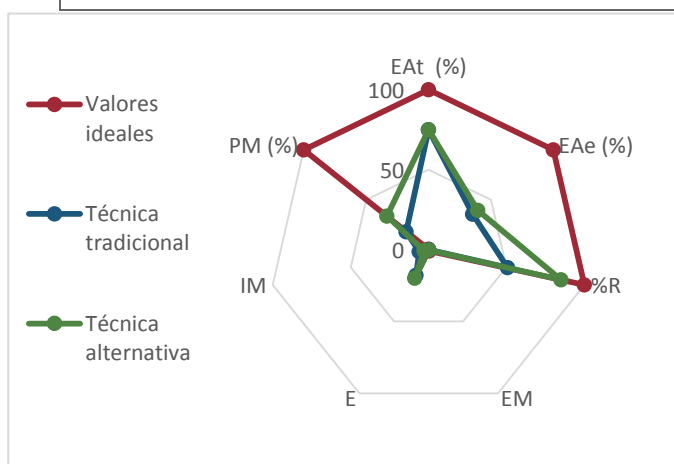
ponderación de manejo de residuos, esto se debe a que los residuos de la técnica alternativa pueden contener bromo elemental por lo que se reducen a bromuro para poder desecharse.

5.2 Ácido acetilsalicílico

A continuación, se presentarán los resultados de la evaluación de la aceptabilidad de ambas técnicas.

Tabla 96. Resultados de la evaluación de aceptabilidad ambiental, (Elaboración propia, 2016)

Parámetros de evaluación		Técnica tradicional	Técnica alternativa
Economía atómica teórica (%)		75.00	75.00
Economía atómica experimental (%)		35.27	39.33
Rendimiento experimental (%)		50.70	85.00
Eficiencia de masas		0.18	0.33
Factor de aceptabilidad ambiental		17.87	19.93
Intensidad de masa		6.00	2.99
Productividad de masa (%)		17.88	33.43
Evaluación de riesgo	Por volumen	(CH₃CCO)₂O	HCl
	Por riesgo	H₂SO₄	HCl
Gasto energético		345.6 kJ	NA
Costo económico (\$)		4.857	2.09
Manejo de residuos		5	5



Al analizar la tabla anterior, tenemos que, en 7 de 10 de los valores cuantitativamente comparables se obtuvo un resultado favorable en el caso de la técnica alternativa. En otros 2 de estos valores se obtuvo el mismo resultado para ambas técnicas.

Otra ventaja de la alternativa es que no hay un consumo energético externo pues la reacción se puede llevar a cabo con unos minutos de agitación manual.

5.3 Paracetamol

A continuación, se presentará los resultados de la evaluación de la aceptabilidad de ambas técnicas

Tabla 97. Resultados de la evaluación de aceptabilidad ambiental, (Elaboración propia, 2016)

Parámetros de evaluación		Técnica tradicional	Técnica alternativa
Economía atómica teórica (%)		69.77	71.59
Economía atómica experimental (%)		13.24	70.51
Rendimiento experimental (%)		9.94	53.21
Eficiencia de masas		0.01	0.38
Factor de aceptabilidad ambiental		400	0.00
Intensidad de masa		11.20	2.67
Productividad de masa (%)		8.93	37.52
Evaluación de riesgo	Por volumen	NaOH	C₆H₇NO
	Por riesgo	CH₃ CONHC₆ H₄-4-(NO₂) y NaNO₂	(CH₃CO)₂O
Gasto energético		2 070 kJ	691.2 kJ
Costo económico (\$)		245.58	1.41
Manejo de residuos		5	5



De la tabla anterior podemos concluir que, se obtuvieron de manera contundente los mejores resultados para la segunda técnica.

Algo que debe destacarse es que el gasto energético en la primera es mucho mayor (2.07 MJ) que en el caso de la segunda que solo necesita 691.1 kJ para llevarla a cabo.

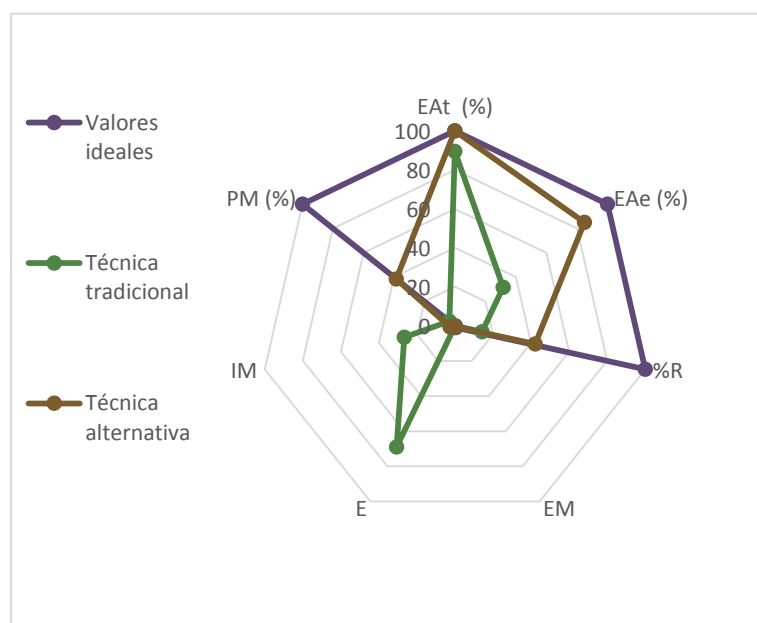
Otro dato notable es el valor de factor de aceptabilidad ambiental para la técnica tradicional, el cual es de 400, y se sale totalmente de la gráfica.

5.4 Éster

A continuación, se presentará los resultados de la evaluación de la aceptabilidad de las tres técnicas experimentales.

Tabla 98. Resultados de la evaluación de aceptabilidad ambiental, (Elaboración propia, 2016)

Parámetro de evaluación		Técnica tradicional		Técnica alternativa
		Salicilato de metilo	Acetato de isoamilo	Propionato de etilo
Economía atómica teórica (%)		89.39	87.85	100.00
Economía atómica experimental (%)		31.65	54.21	85.00
Rendimiento experimental (%)		11.54	75.64	42.10
Eficiencia de masas		0.04	0.41	0.46
Factor de aceptabilidad ambiental		85.64	10.76	0.59
Intensidad de masa		26.60	2.45	3.37
Productividad de masa (%)		3.76	41.02	30.60
Evaluación de riesgo	Por volumen	NaHCO₃	NaHCO₃	CH₃CH₂COOH
	Por riesgo	H₂SO₄	CH₃COOH y H₂SO₄	H₂SO₄
Gasto energético		921.6 kJ	921.6 kJ	921.6 kJ
Costo económico (\$)		2.5907	3.3683	1.8
Manejo de residuos		5	5	5



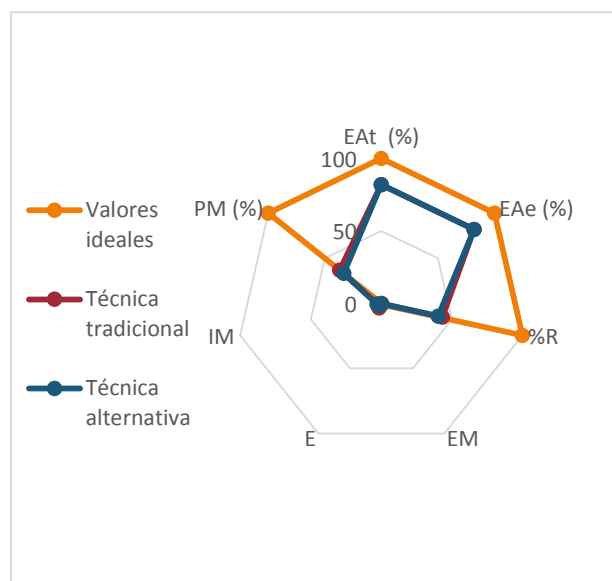
Al observar los resultados de las evaluaciones, podemos darnos cuenta de que la cuarta columna, que es la que contiene los resultados de la técnica alternativa es la que posee la mayoría de valores resaltados, en 5 de ellos resultado mejor, en 2 mas las 3 tecnicas obtuvieron el mismo resultado. En 3 los valores de la segunda tecnica (acetato de isoamilo) resutaron ser mejores, incluyendo el promedio de rendimientos lo cual es importante destacar ya que estas 3 tecnicas son esterificaciones de Fischer que se caracterizan por ser reversibles.

5.5 Deshidratación del ciclohexanol

A continuación, se presentará los resultados de la evaluación de la aceptabilidad de ambas técnicas.

Tabla 99. Resultados de la evaluación de aceptabilidad ambiental. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		Técnica tradicional	Técnica alternativa
Economía atómica teórica (%)		82.01	71.59
Economía atómica experimental (%)		81.91	70.51
Rendimiento experimental (%)		43.26	53.21
Eficiencia de masas		0.37	0.38
Factor de aceptabilidad ambiental		3.57	0.00
Intensidad de masa		2.72	2.67
Productividad de masa (%)		36.87	37.52
Evaluación de riesgo	Por volumen	NaHCO₃	C₆H₁₁OH
	Por riesgo	H₂SO₄	C₆H₁₁OH
Gasto energético		460.8 kJ	460.8 kJ
Costo económico (\$)		3.1977	3.8482
Manejo de residuos		9	8



Al analizar la tabla anterior, tenemos que, en 5 de 10 de los valores la técnica propuesta obtuvo los mejores resultados, no así en EAt, EAe y EM en la que la técnica que se encuentra en los manuales de la UAM-I obtuvo los valores de 82.01, 81.91% y 0.37 respectivamente, los cuales son mejores. Ambas técnicas tuvieron el mismo gasto energético (460.8 kJ).

Algo importante de mencionar es que de todas las evaluaciones, realizadas en la presente tesis, en ningún otro caso se obtuvo el valor ideal de factor de aceptabilidad ambiental el cual es cero.

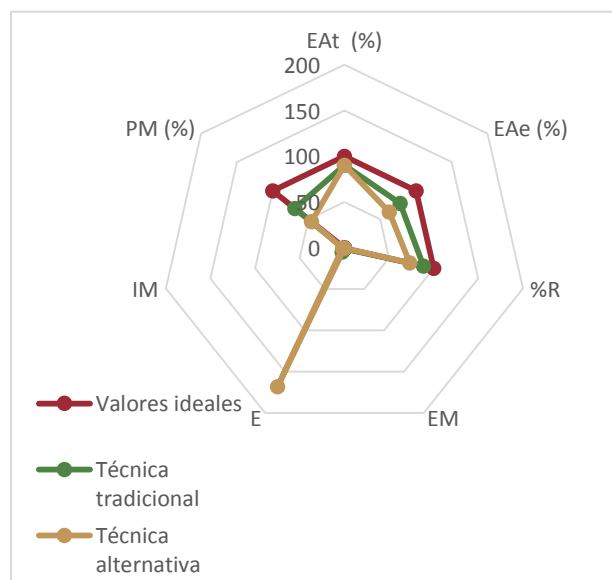
Por último, al observar la gráfica podemos observar que realmente las diferencias entre ambas no son significativas.

5.6 Síntesis de un azocompuesto

A continuación, se presentará los resultados de la evaluación de la aceptabilidad de ambas técnicas.

Tabla 100. Resultados de la evaluación de aceptabilidad ambiental. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		Técnica tradicional	Técnica alternativa
Economía atómica teórica (%)		90.09	90.09
Economía atómica experimental (%)		78.00	83.63
Rendimiento experimental (%)		88.68	73.16
Eficiencia de masas		0.69	0.45
Factor de aceptabilidad ambiental		5.22	168.33
Intensidad de masa		1.46	2.21
Productividad de masa (%)		69.17	45.94
Evaluación de riesgo	Por volumen	HCl, NaOH	NaOH
	Por riesgo	C₈H₁₁N, NaNO₃, HCl, NaOH	C₈H₁₁N, NaNO₃, HCl, NaOH
Gasto energético		NA	115.2 kJ
Costo económico (\$)		2.3706	0.5743
Manejo de residuos		5	6



Al analizar la tabla anterior, tenemos que, en 7 de 10 de los valores la técnica tradicional obtuvo los valores más cercanos a los ideales. Además de que no hay gasto energético debido a que la técnica se realiza a temperatura ambiente.

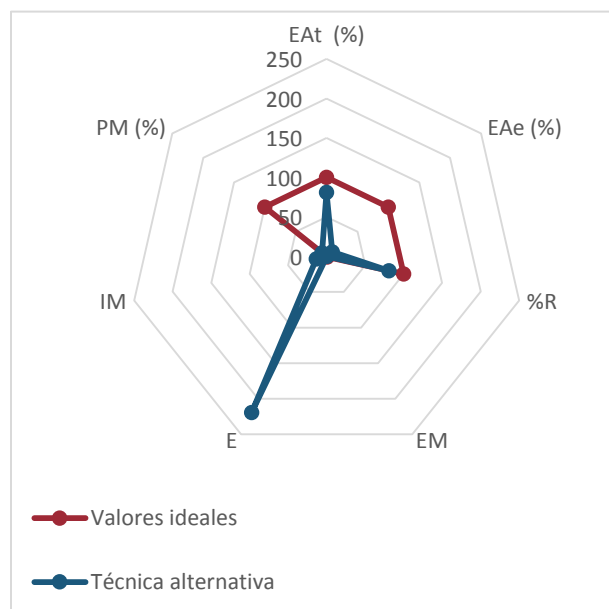
Los únicos dos valores en los que la técnica alternativa superó a la tradicional fueron la economía atómica experimental (83.63 %) y el costo económico de los reactivos, materiales auxiliares y reactivos para el tratamiento de sus residuos, que es, de menos de un peso (0.5743).

5.7 Síntesis de borneol

A continuación, se presentará los resultados de la evaluación de la aceptabilidad de la técnica tradicional.

Tabla 101. Resultados de la evaluación de aceptabilidad ambiental. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		Valores ideales	Técnica tradicional
Economía atómica teórica (%)		100	81.15
Economía atómica experimental (%)		100	9.33
Rendimiento experimental (%)		100	80.76
Eficiencia de masas		1	0.08
Factor de aceptabilidad ambiental		0	219.16
Intensidad de masa		0	13.45
Productividad de masa (%)		100	7.61
Evaluación de riesgo	Por volumen	-----	C ₂ H ₅ OH
	Por riesgo	-----	NaBH ₄
Gasto energético		0	230.4 kJ
Costo económico (\$)		0	31.085
Manejo de residuos		0	5



En la tabla anterior se comparan los valores ideales con los obtenidos para la técnica relajada en la UAM-I, que es, síntesis de borneol en el cual se obtiene un subproducto en mayor proporción que el producto deseado y por lo cual se obtiene un valor bajo en EAe.

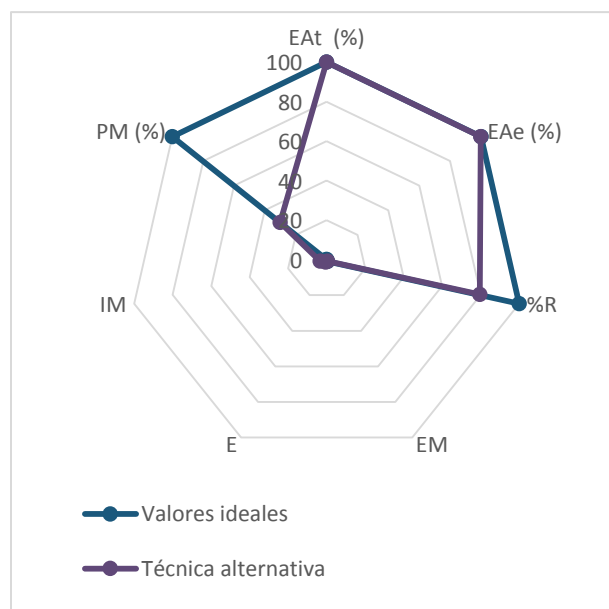
Los valores de eficiencia de masas, factor de aceptabilidad ambiental, intensidad de masa y productividad de masa se alejan mucho de los esperados, y el costo de la técnica experimental es elevado (\$31.085).

5.8 Síntesis de benzoína

A continuación, se presentará los resultados de la evaluación de la aceptabilidad de la técnica alternativa.

Tabla 102. Resultados de la evaluación de aceptabilidad ambiental. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		Valores ideales	Técnica alternativa
Economía atómica teórica (%)		100	99.97
Economía atómica experimental (%)		100	99.86
Rendimiento experimental (%)		100	79.56
Eficiencia de masas		1	0.79
Factor de aceptabilidad ambiental		0	1.45
Intensidad de masa		0	3.32
Productividad de masa (%)		100	30.13
Evaluación de riesgo	Por volumen	-----	C ₂ H ₅ OH
	Por riesgo	-----	C ₂ H ₅ OH y NaCN
Gasto energético		0	460.8 kJ
Costo económico (\$)		0	2.5865
Manejo de residuos		0	7



Si hablamos de los primeros 7 valores, los resultados de la técnica son bastante parecidos a los ideales, aunque un poco menos en el caso del rendimiento y la productividad de masa (PM) como se observa en la gráfica.

En este caso, algo que debería tomarse a seria consideración es que el catalizador es el cianuro de sodio y el tratamiento de residuos de la misma.

5.9 Síntesis de furfural

A continuación, se presentará los resultados de la evaluación de la aceptabilidad de la técnica alternativa.

Tabla 103. Resultados de la evaluación de aceptabilidad ambiental. (Elaboración propia, 2016).

Parámetros de evaluación		Valores ideales	Técnica alternativa
Economía atómica teórica (%)		100	64.00
Economía atómica experimental (%)		100	64.00
Rendimiento experimental (%)		100	4.20
Eficiencia de masas		1	0.00
Factor de aceptabilidad ambiental		0	260.00
Intensidad de masa		0	261.50
Productividad de masa (%)		100	4.02
Evaluación de riesgo	Por volumen	-----	H ₂ SO ₄
	Por riesgo	-----	H ₂ SO ₄ y Na ₂ SO ₄
Gasto energético		0	460.8 kJ
Costo económico (\$)		0	39.4775
Manejo de residuos		0	6



A pesar de que es una técnica en la que se ocupa material residual de papa, su evaluación es deficiente y se obtiene muy poco producto a penas el necesario para poder realizar las pruebas de identificación al producto.

En la gráfica observamos que los valores están bastante alejados de los ideales.

5.10 Implementación de la estrategia

En la tabla 93 se presentan los resultados promedio de los alumnos con los que se probó cada una de las técnicas y también se presentan los resultados que se obtuvieron de la evaluación previamente descrita en este documento, y se presentan de esta manera con el fin de comparar ambos casos y de esta manera concluir si los resultados de la evaluación previa son repetibles por los alumnos o no. En la misma tabla, se puede observar que los resultados para EAt y EAe son los mismos en ambos casos, esto se debe a que son cálculos teóricos por lo que si los alumnos entienden la fórmula y la sustituyen de manera correcta obtendrán el mismo resultado, los tres valores siguientes se calculan con datos experimentales por lo que se espera que varíen entre uno y otro por la diferencia de experiencia en el laboratorio. Sin embargo, se presenta que en cada uno de los casos el factor de aceptabilidad ambiental (E) es más alto el valor obtenido por los alumnos, esto se debe a que por la falta de experiencia los alumnos generan mayor cantidad de residuos.

Por último, las prácticas propuestas no poseen limitantes de infraestructura o técnicos ya que se adaptaron a los laboratorios de la UAM-I. Sin embargo una limitante para la práctica extendida de estas, es que así como la mayoría de los alumnos, los profesores interactuaron por primera vez con este tipo de conceptos. Esta limitante se eliminaría con una capacitación en el área.

5.10.1. Percepción de los alumnos

En la tabla 94 se observa una tendencia a favor en los resultados, que es más notable en el caso de los alumnos de Ingeniería Bioquímica Industrial, ya que en los 5 casos la mayoría de los alumnos entiende y percibe como importante a la estrategia implementada, sin embargo aún hay limitaciones en la misma ya que hay alumnos que contestaron que No o que no saben. Las justificaciones de la última pregunta, la cual es una pregunta de análisis, nos indican que entienden el enfoque, pues los que contestaron que no o que no sabían nos comentan que les hacen falta otros elementos para poder decidir y aquellos que contestaron que sí se inclinaron por la opción con menor consumo energético.

Conclusiones

Fue posible diseñar e implementar en forma piloto la estrategia de evaluación del factor de aceptabilidad ambiental para la enseñanza experimental.

Evaluación

- En 4 de 6 reacciones, en las que se compararon los parámetros presentados al día de hoy, las técnicas alternativas son más aceptables ambientalmente hablando.
- Para el caso de la síntesis de ciclohexeno, ambas técnicas tienen la misma tendencia y la diferencia entre sus valores es mínima aunque la técnica tradicional resultó mejor.
- Para el caso de la síntesis de anaranjado de metilo, la diferencia entre las técnicas es notable y la técnica tradicional obtuvo una mejor evaluación tal como se esperaba pues es una reacción a temperatura ambiente.

Implementación

- Los resultados de la evaluación son reproducibles por los alumnos, tal que, los alumnos pueden juzgar la idoneidad de cada técnica.
- Este tipo de protocolos se puede implementar de forma generalizada capacitando a los profesores en esta área.

Percepción

- En su conjunto, las respuestas parecen sugerir que, en la mayoría de los casos, los alumnos de ambas licenciaturas parecen haber comprendido, al menos parcialmente, la importancia de los parámetros contenidos en los guiones experimentales y su uso para determinar la aceptabilidad ambiental en los experimentos realizados. Sin embargo, es necesario ampliar este estudio para tener elementos suficientes para concluir de forma cuantitativa este tema.

Referencias

- Anastas, P.; Warner, J., (1998) Green Chemistry: Theory and Practice, Oxford University Press, 29-32.
- Anastas P., and Kirchhoff M. (2002). Origins, Current Status, and Future Challenges of Green Chemistry. *Acc. Chem. Res.*, Vol.35, pp. 686-694.
- Andraos, J. (2005). Unification of Reaction Metrics for Green Chemistry: Applications to Reaction. *Organic Process Research & Development*, Vol. **9**, 149–163
- Bernal, J., (2007), Pautas para el diseño de una asignatura desde la perspectiva de los ECTS. Universidad de Zaragoza. En línea: <http://didac.unizar.es/jlbernal/inicial.html>. Consultada el 15 marzo del 2016.
- Castro, E., (2006) La oxidación catalítica verde de alcoholes en solvente acuoso, *Industria y Química*, 353 3-4.
- Centi G. and Perathonerm S. (2003). Catalysis and sustainable (green) chemistry. *Catal. Today*, vol.77, pp. 287-297.
- Constable, D., Jiménez-González, C., (2012). Evaluating the Greenness of Synthesis. En *Handbook of Green Chemistry, Green Processes, Green Synthesis (35-67)*. Weinheim, Alemania: Wiley-VCH.
- Curzons, A., Constable, D., Cunningham, V., Clean Products Processes, *Clean Technol. Environ. Policy.*, 1, 82-90, 1999.
- Dicks, A., Green organic chemistry in lecture and laboratory, CRC Press. 2012
- Doria, M. (2009) .Química verde: un nuevo enfoque para el cuidado del medio ambiente *Educación Química*. Aniversario “Química Verde”
- Eissen, M.; Metzger J. (2002) “Environmental performance metrics for daily use in synthetic chemistry”. *Chem. Eur. J.*, 8(16):3580-3585.
- Fuhrhop, J.; Li, G. (2003) *Organic Synthesis*, 3rd ed., pp. 458-459, Weinheim, Federal Republic of Germany, John Wiley & Sons - VCH Verlag GMBH & Co.
- García, L. (2009). Biotecnología para una química verde, respetuosa con el medio ambiente, *Revista de Prensa Tribuna Libre*, En línea: <http://www.almendron.com/tribuna/24515/biotecnologia-para-una-quimica-verde/>, Consultada el 15 marzo del 2016.
- Gavilán, I., Ávila, G., Birrichaga, N., Cano, G. (2015) Evaluación del factor de aceptabilidad ambiental como criterio de idoneidad en las prácticas de Química Orgánica. *Educ. quím* 26 (1) México.
- Gonzalez, E., Arias, M. (2009) La educación ambiental institucionalizada: actos fallidos y horizontes de posibilidad

- Kirchoff M. (2005). Promoting sustainability through green chemistry. *Resour. Conserv. Recy.*, Vol.44, pp. 237-243.
- León, F., Juaristi, E. (2009) Aplicaciones de las Microondas en Química y en Biología, El Colegio Nacional, México, Cap. 1 pp. 1-38.
- Lopez, J., Luján, J., (2000) Ciencia y política del riesgo. Alianza, Madrid.
- Manley J., Anastas P., and Cue B. (2008). Frontiers in Green Chemistry: meeting the grand challenges for sustainability in R&D and manufacturing. *J. Cleaner Prod.*, Vol.16, pp. 743-750.
- ONU (2002) Informe de la Cumbre Mundial sobre el Desarrollo Sostenible. Johannesburgo, Sudáfrica, Cap. 1, resolución 2, anexo.
- Oulton, C. y Col. (2004) Reconceptualizing the teaching of controversial issues, *International Journal of Science Education*, **26**(4), 411-425.
- Pájaro, N.; Olivero, J. (2011) Química verde: un nuevo reto, *Ciencia e ingeniería neogranadina*. 21(2): 169-182.
- Sheldon, R., (1992) Organic synthesis; past, present a future, *Chem Ind.*, 903-906.
- Sheldon, R. (Junio 2008). "E factors, green chemistry and catalysis: an odyssey". *Chem. Commun.* p. 3352-3365
- Trost, B. (1991) Atom Economy: A Search for Synthetic Efficiency. *Science*, 254 (5037), 1471-1477.
- UNESCO. (1987) International Congress on Environmental Education and Training. Moscú/París.
- Vargas, E., Ruiz, L. (2007) Química verde en el siglo XXI; química verde, una química limpia. *Revista cubana de química*. Versión digital, pp. 29-32.
- Vilches A., y Pérez D. (2011). Papel de la Química y su enseñanza en la construcción de un futuro sostenible. *Educ. quím.* Versión digital, pp. 1-14.

Anexos

Anexo 1

Nombre del experimento:

Ácido acetilsalicílico (Alternativa a temperatura ambiente)

Reacción:

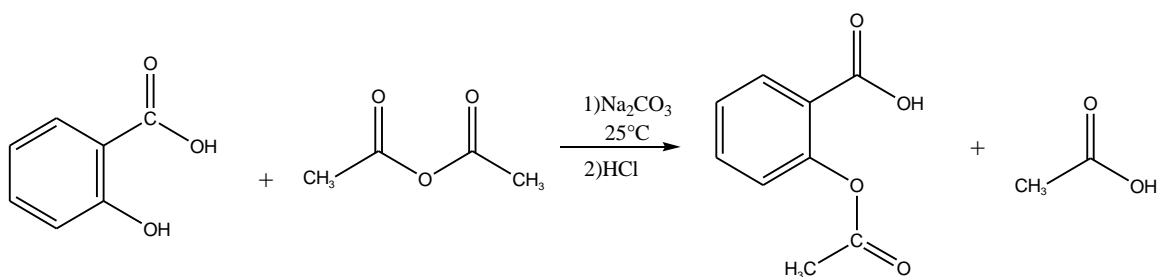


Figura 1

Mecanismo:

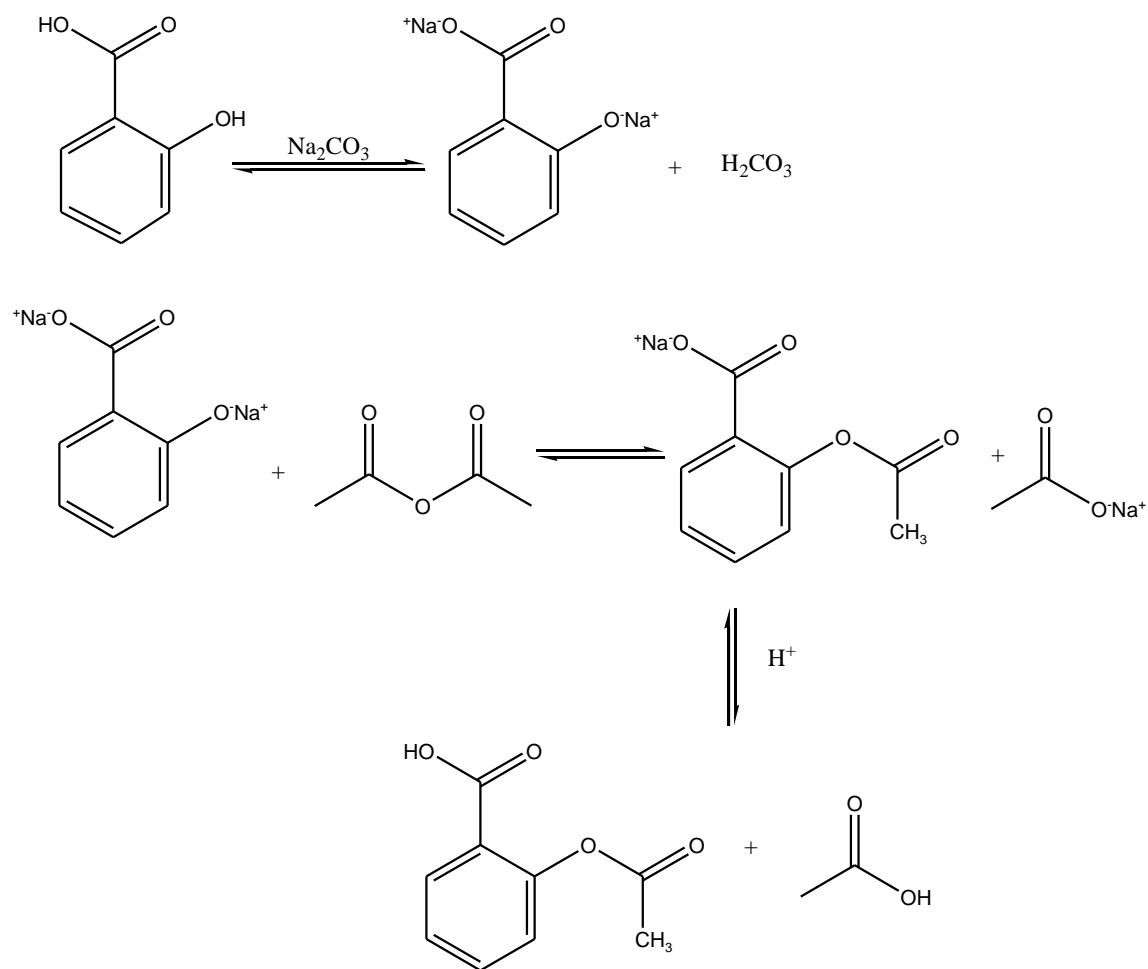


Figura 2.

Tipo de reacción:

Esterificación de ácidos carboxílicos

Técnicas experimentales aplicables:

Filtración y recristalización por par de disolventes.

Reactivos:

a) Cantidad (masa molecular):

Reactivo	Cantidad
Ácido salicílico	0.56 g
Anhídrido acético	1.2 mL
Ácido clorhídrico (50%)	10 mL
Acetato de etilo	5 mL
Carbonato de sodio	2.4 g

Hexano	5 mL
--------	------

b) Código de riesgo

Número	Salud/azul	Inflamabilidad/rojo (en base al punto de inflamabilidad)	Reactividad/amarillo
0	Sin riesgo	No inflamable	Estable
1	Ligeramente peligroso	Más de 93°C	Inestable si se calienta
2	Peligroso	Menos del 93°C	Cambio químico violento
3	Peligro extremo	Menos de 38°C	Detona con calor y/o golpe
4	Mortal	Menos de 23°C	Detona

Equipo de protección personal

A	Lentes de seguridad y bata
B	Lentes de seguridad, bata y guantes
C	Lentes de seguridad, bata, mascarilla y guantes

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Ácido salicílico	0	1	0	A		Puede causar irritación del tracto respiratorio, tracto gastrointestinal y ojos, quemaduras en la piel, dolor de cabeza, náuseas y vómitos, disminución de la visión, zumbidos en los oídos y sordera, confusión, sudores, disturbios metabólicos y daño al riñón.
Anhídrido acético	3	2	1	B		Puede causar quemaduras cutáneas, gastrointestinales y oculares, dolor abdominal, de garganta, piel, y ojos, dificultad respiratoria y shock.
Carbonato de sodio	2	0	0	B		Por exposición causa enrojecimiento de piel y ojos, dolor abdominal, ocular y de garganta, tos, visión borrosa y sensación de quemazón.
Ácido clorhídrico	3	0	1	B	 	Corrosivo, provoca quemaduras. Irritante, Irrita vías respiratorias.

a) Reactividad

Sustancia	Incompatibilidad
Ácido salicílico	Incompatibilidad química con ácidos minerales, bases fuertes, sales de hierro, éter, acetato de plomo, yodo y oxidantes fuertes. La descomposición durante la ignición puede generar vapores irritantes, compuestos aromáticos (especialmente fenol) y óxidos de carbono.
Anhídrido acético	La sustancia se descompone al arder, produciendo gases y humos tóxicos, incluyendo vapores de ácido acético. Reacciona violentamente con alcoholes, aminas, oxidantes, bases fuertes y agua. Ataca a muchos metales en presencia de agua o en seco.
Ácido clorhídrico	Los productos de descomposición de este compuesto son el cloruro de hidrógeno. Reacciona con la mayoría de metales desprendiendo hidrógeno, con agentes oxidantes genera cloro, el cual es muy peligroso. Se ha informado de reacciones violentas entre este ácido y los siguientes compuestos: permanganato de potasio o sodio y en contacto con tetranitruro de tetraselenio, 1,1difluoroetileno, aleaciones de aluminio-titanio y ácido sulfúrico.
Acetato de etilo	Productos de descomposición: monóxido y dióxido de carbono. En general es incompatible con agentes oxidantes, bases, ácidos y humedad. Reacciona vigorosamente con ácido clorosulfónico, dihidroaluminato de litio y clorometil furano y oleum. Se ha informado de reacciones muy violentas con tetraaluminato de litio, hidruro de litio y aluminio y terbutóxido de potasio.
Carbonato de sodio	Es higroscópico. Reacciona con ácidos fuertes, bajo ciertas condiciones, puede reaccionar con Al, P ₂ O ₅ , F ₂ , Li y 2,4,6-trinitrotolueno, en presencia de polvo de cal y humedad puede formar sosa cáustica, la cual puede causar quemaduras. Se descompone como CO ₂ al someterse a altas temperaturas o al mezclarlo con ácidos.
Hexano	Productos de descomposición: monóxido y dióxido de carbono. Reacciona vigorosamente con materiales oxidantes como cloro, flúor o perclorato de magnesio.

b) Toxicidad

IDLH: Immediately Dangerous to Life and Health. Concentración máxima a la cual puede escaparse de un lugar en los 30 minutos siguientes sin que se presenten síntomas irreversibles a la salud. Se usa para determinar el tipo de respirador. No se consideran efectos cancerígenos.

LCLo: Lowest published lethal concentration. Concentración letal mínima publicada.

LC₅₀: Lethal concentration 50. Concentración con la cual se provoca la muerte del 50 % de una población de animales sometidos a experimentación.

LDLo: Lowest published lethal doses. Dosis letal mínima publicada.

LD₅₀: Lethal doses 50. Dosis con la cual se provoca la muerte del 50 % de una población de animales sometidos a experimentación.

RQ: Reportable Quantity. Cantidad de sustancia que excede la medida de EPA.

Sustancia	Toxicidad
Ácido salicílico	Rata, oral, LD ₅₀ : 891 mg/kg Conejo, piel, LD ₅₀ : >10000 mg/kg Conejo, piel, irritación: 500 mg/kg, irritación moderada.

	Conejo, ojos, irritación: 100 mg/ Kg, irritación severa.
Anhídrido acético	Rata, oral, LD ₅₀ :1780 mg/kg Conejo, piel, LD ₅₀ :4000 mg/kg Rata, inhalación, LC ₅₀ : 1000 ppm/4 horas
Ácido clorhídrico	IDLH: 100ppm RQ: 5000 LCLo (inhalación en humanos): 1300 ppm/30 min; 3000/5 min. LC ₅₀ (inhalación en ratas): 3124 ppm/1h. LD ₅₀ (oral en conejos): 900 mg/Kg.
Acetato de etilo	LD ₅₀ (oral en ratas): 11.3 ml/Kg, 5620 mg/Kg LC ₅₀ (inhalado en ratas): 1600 ppm/8 h Niveles de irritación a ojos en humanos: 400 ppm RQ: 5000 IDLH : 10000 ppm
Carbonato de sodio	Inhalación: LC ₅₀ , 2 horas, rata, 2,3 mg/l. Oral: LD ₅₀ , rata, > 2.000 mg/kg. Dérmica: LD ₅₀ , conejo, > 2.000 mg/kg. Irritación: Conejo, no irritante (piel). Conejo, irritante (ojos).
Hexano	RQ: 1 IDLH: 5000 ppm

Productos:

a) Cantidad (masa molecular)

Producto	Cantidad
Ácido acetilsalicílico	0.73 g

b) Código de riesgo

Ácido acetilsalicílico.- La sustancia es levemente irritante de la piel y mucosas. El uso prolongado puede causar anemia, hemorragia interna, disminución de la habilidad de coagular la sangre.



Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
1	0	0	A

c) Reactividad

Sustancia	Incompatibilidad
Ácido acetilsalicílico	Evitar contacto con oxidantes fuertes y ácidos

d) Toxicidad

Sustancia	Toxicidad
Ácido acetilsalicílico	DL ₅₀ oral mus : 480 mg/kg DL ₅₀ oral rat : 891 mg/kg DL ₅₀ ipr mus : 300 mg/kg

I. Material y equipo requerido:

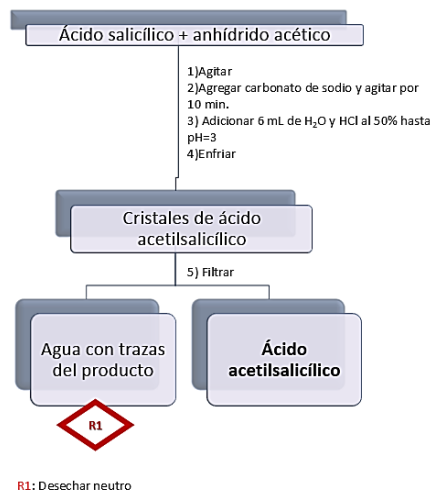
Material	Cantidad	Material	Cantidad
Vaso de precipitados de 50 mL	2	Probeta graduada de 10 mL	1
Agitador de vidrio	1	Espátula	1
Embudo Büchner con alargadera	1	Cristalizador chico	1
Embudo de vidrio	1	Vidrio de reloj	1
Matraz kitasato con manguera	1	Soporte universal	1
Pinzas de tres dedos con nuez	2		

II. Procedimiento y diagrama del proceso:

1. En un vaso de precipitados de 50 mL colocar 0.56g de ácido salicílico y disolver en 1.2 mL de anhídrido acético, y mezclar con la varilla de vidrio.
2. Una vez que se obtenga una mezcla homogénea, adicionar 2.4g de carbonato de sodio y agitar nuevamente la mezcla con la varilla de vidrio durante 10 minutos.
3. Adicionar lentamente 6 mL de agua destilada y posteriormente una disolución de ácido clorhídrico al 50% hasta que el pH sea de 3.
4. Enfriar la reacción en un baño de hielo.
5. Filtrar al vacío y lavar con agua fría.
6. Recristalizar con acetato de etilo y hexano
7. Pesar el producto obtenido.
8. Determinar punto de fusión del ácido acetilsalicílico y compararlo con el de la materia prima.

NOTAS:

- ☒ El ácido acetilsalicílico es ligeramente soluble en agua por lo que es necesario que se utilice agua fría.



III. Evaluación ambiental:

Masa del producto deseado

Masa=

Suma de las masas de entrada

Suma de las masas de entrada =

a) Economía atómica teórica

Es la medición intrínseca de cantidad de átomos pertenecientes a las materias primas que terminan formando parte del producto deseado en una transformación química. El valor deseable en este parámetro es de 100.

$$\% \text{ EAt} = \frac{\text{PM del producto deseado}}{\text{Suma de los PM de todos los reactivos}} \times 100$$

b) Economía atómica experimental

La economía experimental está, por lo tanto, basada en la cantidad real de reactivos usados en una síntesis experimental. El valor deseable en este parámetro es de 100.

$$\% \text{ EAe} = \frac{\text{masa teorica del producto deseado}}{\text{suma de masas de entrada}} \times 100$$

c) Rendimiento

$$\% \text{ R} = \left(\frac{\text{masa real del producto}}{\text{masa teorica del producto}} \right) \times 100$$

d) Eficiencia de masas

Es la relación de la masa del producto deseado respecto a la masa total de entrada. El valor deseable para este parámetro es 1.

$$\text{Eficiencia de masas} = \frac{\text{masa exp. del producto deseado}}{\text{suma de masas de entrada}}$$

e) Factor de aceptabilidad ambiental

Se enfoca en el problema de generación de residuos en las técnicas experimentales, lo cual impulsa el desarrollo de procesos más limpios y menos dañinos. Es la medida de la masa de residuos por kilogramo de producto deseado en una reacción, por lo que el valor deseable para este parámetro es 0.

$$\text{factor de aceptabilidad ambiental (E)} = \frac{\text{masa del residuo}}{\text{masa del producto deseado}}$$

X. Identificación del producto:

IV. Obtener punto de fusión.

Anexo 2

I. Nombre del experimento:

Paracetamol (Alternativa con reducción de pasos intermedios)

II. Reacción

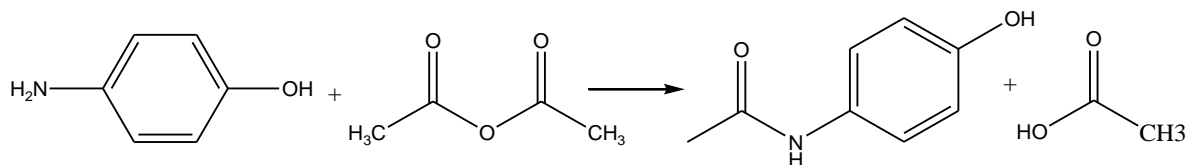


Figura 1

III. Tipo de reacción:

Obtención de aminas

IV. Técnicas experimentales aplicables:

Filtración

V. Reactivos:

a) Cantidad (masa molecular):



Reactivo	Cantidad
p-aminofenol	0.40 g
Anhídrido acético	0.35 mL
Agua destilada	0.50 mL
Carbón activado	1-2% del peso del sólido a recristalizar

b) Código de riesgo

Número	Salud/azul	Inflamabilidad/rojo (en base al punto de inflamabilidad)	Reactividad/amarillo
0	Sin riesgo	No inflamable	Estable
1	Ligeramente peligroso	Más de 93°C	Inestable si se calienta
2	Peligroso	Menos del 93°C	Cambio químico violento
3	Peligro extremo	Menos de 38°C	Detona con calor y/o golpe
4	Mortal	Menos de 23°C	Detona

Equipo de protección personal

A	Lentes de seguridad y bata
B	Lentes de seguridad, bata y guantes
C	Lentes de seguridad, bata, mascarilla y guantes

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
p-aminofenol	0	1	0	A		Nocivo por inhalación e ingestión, puede provocar irritación del tracto respiratorio.
Anhídrido acético	3	2	1	B		Puede causar quemaduras cutáneas, gastrointestinales y oculares, dolor abdominal, de garganta, piel, y ojos, dificultad respiratoria y shock.

a) Reactividad

Sustancia	Incompatibilidad
p-aminofenol	Ácido nitroso, nitritos.
Anhídrido acético	La sustancia se descompone al arder, produciendo gases y humos tóxicos, incluyendo vapores de ácido acético. Reacciona violentamente con alcoholes, aminas, oxidantes, bases fuertes y agua. Ataca a muchos metales en presencia de agua o en seco.
Carbón activado	Agentes oxidantes fuertes, cloro, permanganatos, oxígeno líquido, ozono y altas temperaturas. Se descompone en monóxido de carbono y dióxido de carbono.

b) Toxicidad

- c) **IDLH:** Immediately Dangerous to Life and Health. Concentración máxima a la cual puede escaparse de un lugar en los 30 minutos siguientes sin que se presenten síntomas irreversibles a la salud. Se usa para determinar el tipo de respirador. No se consideran efectos cancerígenos.
- d) **LCLo:** Lowest published lethal concentration. Concentración letal mínima publicada.
- e) **LC50:** Lethal concentration 50. Concentración con la cual se provoca la muerte del 50 % de una población de animales sometidos a experimentación.
- f) **LDLo:** Lowest published lethal doses. Dosis letal mínima publicada.
- g) **LD50:** Lethal doses 50. Dosis con la cual se provoca la muerte del 50 % de una población de animales sometidos a experimentación.
- h) **RQ:** Reportable Quantity. Cantidad de sustancia que excede la medida de EPA.

Sustancia	Toxicidad
p-aminofenol	Oral LD ₅₀ 375 mg/kg (rata) Dermal LD ₅₀ >10000 mg/kg (conejo) Inhalatorio LC ₅₀ /1h >5 mg/l (rata)
Anhídrido acético	Rata, oral, LD ₅₀ :1780 mg/kg Conejo, piel, LD ₅₀ :4000 mg/kg Rata, inhalación, LC ₅₀ : 1000 ppm/4 horas
Carbón activado	DL ₅₀ (oral - rata): > 10 g/kg.

I. Productos:

a) Cantidad (masa molecular)

Producto	Cantidad
p-acetaminofenol	0.55g

b) Código de riesgo

Acetaminofen.- La sustancia puede causar tos y enrojecimiento ocular.



Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
1	1	0	A

c) Reactividad

Sustancia	Incompatibilidad
p-acetaminofenol	Evitar las llamas.

d) Toxicidad

Sustancia	Toxicidad
p-acetaminofenol	No hay información disponible

I. Material y equipo requerido:

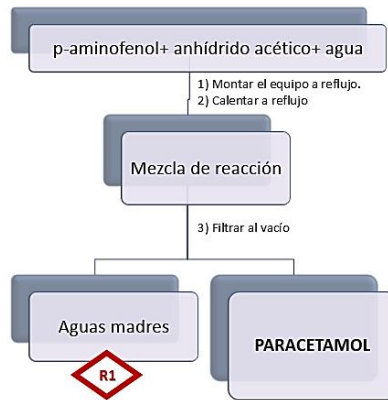
Material	Cantidad
Equipo de micrométodos	1
Pipeta de 1 mL	1
Vidrio de reloj	1
Pinzas de tres dedos con nuez	1
Soporte universal	1
Parrilla de calentamiento	1

II. Procedimiento y diagrama del proceso:

1. En un matraz redondo de 10 mL colocar 0.35mL de anhídrido acético, 0.4 g de p-aminofenol y 0.5 mL de agua.
2. Adaptar el refrigerante de agua en posición de reflujo y calentar hasta la temperatura de reflujo y mantenerlo por 30 minutos
3. Enfriar la reacción en un baño de hielo.
4. Filtrar al vacío y lavar con agua fría.
5. Pesarse el producto obtenido
6. Determinar punto de fusión del p-acetaminofenol y compararlo con el de la materia prima.

Opcional

Recristalizar de agua y usar carbón activado si es necesario



R1: Desechar neutro

VI. Evaluación ambiental:

Masa del producto deseado

Masa=

Suma de las masas de entrada

Suma de las masas de entrada =

a) Economía atómica teórica

Es la medición intrínseca de cantidad de átomos pertenecientes a las materias primas que terminan formando parte del producto deseado en una transformación química. El valor deseable en este parámetro es de 100.

$$\% \text{ EAt} = \frac{\text{PM del producto deseado}}{\text{Suma de los PM de todos los reactivos}} \times 100$$

b) Economía atómica experimental

La economía experimental está, por lo tanto, basada en la cantidad real de reactivos usados en una síntesis experimental. El valor deseable en este parámetro es de 100.

$$\% \text{ EAe} = \frac{\text{masa teorica del producto deseado}}{\text{suma de masas de entrada}} \times 100$$

c) Rendimiento

$$\% \text{ R} = \left(\frac{\text{masa real del producto}}{\text{masa teorica del producto}} \right) \times 100$$

d) Eficiencia de masas

Es la relación de la masa del producto deseado respecto a la masa total de entrada. El valor deseable para este parámetro es 1.

$$\text{Eficiencia de masas} = \frac{\text{masa exp. del producto deseado}}{\text{suma de masas de entrada}}$$

e) Factor de aceptabilidad ambiental

Se enfoca en el problema de generación de residuos en las técnicas experimentales, lo cual impulsa el desarrollo de procesos más limpios y menos dañinos. Es la medida de la masa de residuos por kilogramo de producto deseado en una reacción, por lo que el valor deseable para este parámetro es 0.

$$\text{factor de aceptabilidad ambiental (E)} = \frac{\text{masa del residuo}}{\text{masa del producto deseado}}$$

X. Identificación del producto:

Obtener punto de fusión.

Anexo 3

VII. Nombre del experimento:

Isomería Geométrica (Alternativa)

VIII. Reacción

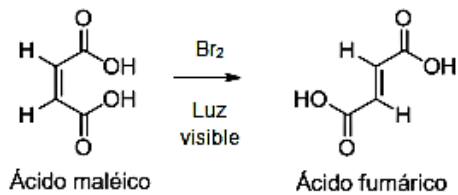


Figura 1

Mecanismo:

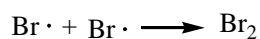
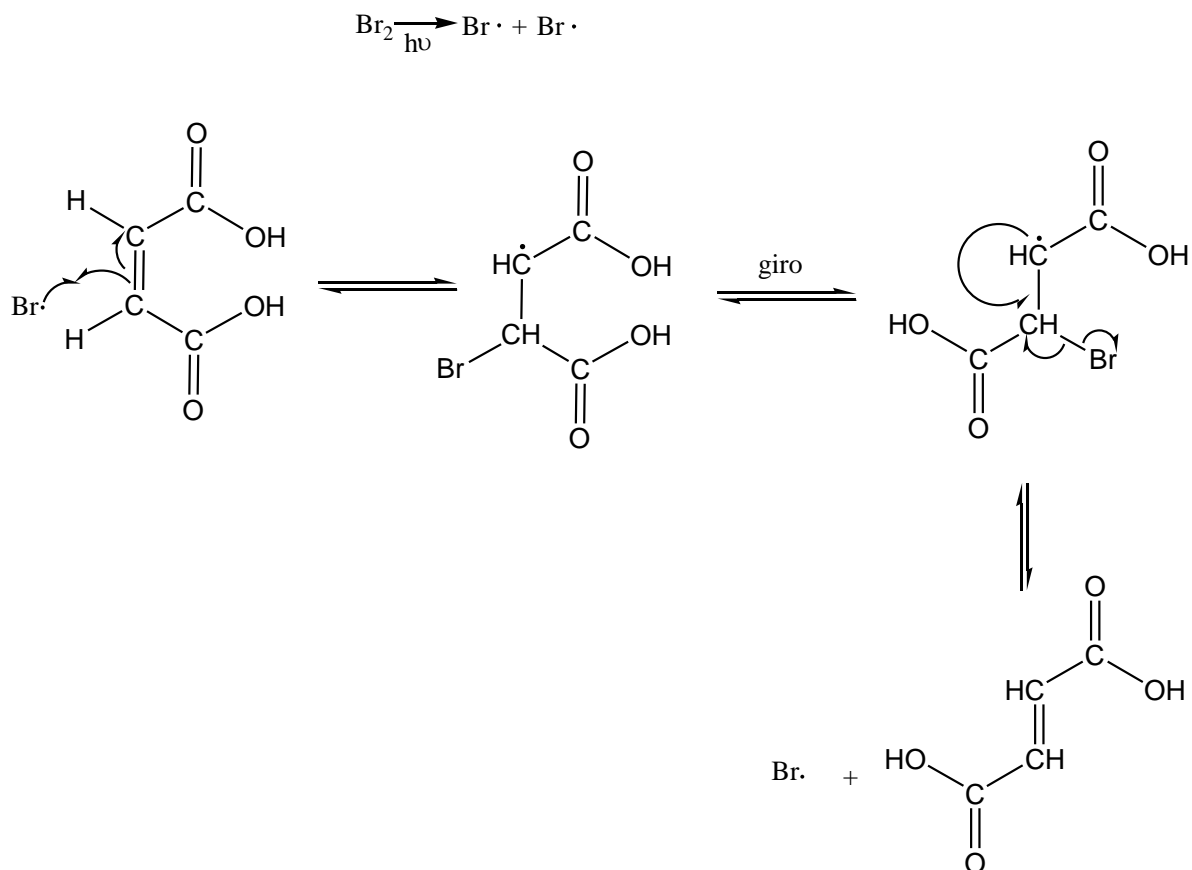


Figura 2

IX. Tipo de reacción:

Isomerización

X. Técnicas experimentales aplicables:

Filtración.

XI. Reactivos:

b) Cantidad (masa molecular):



Reactivo	Cantidad
Ácido maléico	3.75 g
Agua destilada	5 mL
Bromo	3 gotas

c) Código de riesgo

Número	Salud/azul	Inflamabilidad/rojo (en base al punto de inflamabilidad)	Reactividad/amarillo
0	Sin riesgo	No inflamable	Estable
1	Ligeramente peligroso	Más de 93°C	Inestable si se calienta
2	Peligroso	Menos del 93°C	Cambio químico violento
3	Peligro extremo	Menos de 38°C	Detona con calor y/o golpe
4	Mortal	Menos de 23°C	Detona

Equipo de protección personal

A	Lentes de seguridad y bata
B	Lentes de seguridad, bata y guantes
C	Lentes de seguridad, bata, mascarilla y guantes

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Ácido maléico	2	1	0	A		Corrosivo. Provoca grave irritación ocular y posibles quemaduras. Causa irritación a la piel y a las vías respiratorias. Puede ser nocivo si se ingiere o absorbe a través de la piel.
Bromo	3	0	3	B		Sustancia altamente tóxica por inhalación, ingestión o por contacto directo con la piel.

d) Reactividad

Sustancia	Incompatibilidad
Ácido maléico	Agentes oxidantes fuertes, agentes reductores fuertes, bases fuertes, la humedad. También es incompatible con aminas y metales alcalinos.
Bromo	Puede reaccionar con vapor de agua para producir humos tóxicos y corrosivos de ácido hipobromoso y bromuro de hidrógeno. Ataca la mayoría de los metales, reacciona violentamente con aluminio, titanio, mercurio, y potasio. Incompatible con agentes reductores, combustibles, y muchos productos químicos orgánicos.

e) Toxicidad

Sustancia	Toxicidad
Ácido maléico	LD ₅₀ (oral, rata): 708 mg/kg LD ₅₀ (piel, conejo): 1560 mg/kg

	Test irritación (ojos, conejo): 100 mg/72 h/ muy irritante Test de sensibilización (piel, conejos): 500 mg/24 h/ leve
Bromo	Oral rat LD ₅₀ : 2600 mg/kg; Inhalación rat LC ₅₀ : 2700 mg/m ³

XII. Productos:

e) Cantidad (masa molecular)

Producto	Cantidad
Ácido fumárico	3.75 g

f) Código de riesgo

Ácido fumárico.- Sustancia nociva que causa necrosis visibles en la piel o corroe el acero o el aluminio



Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección
1	1	0	A

g) Reactividad

Sustancia	Incompatibilidad
Ácido fumárico	Oxidantes fuertes, bases fuertes, metales alcalinos, aminos, y carbonatos

h) Toxicidad

Sustancia	Toxicidad
Ácido fumárico	LD ₅₀ Rata-Oral = 9300 mg / kg LD ₅₀ Ratón, IPR: = 100 mg / kg Piel: Conejo, 500 mg / 24 h Ojo: Conejo, 100 mg / kg / 24 h

XIII. Equipo requerido:

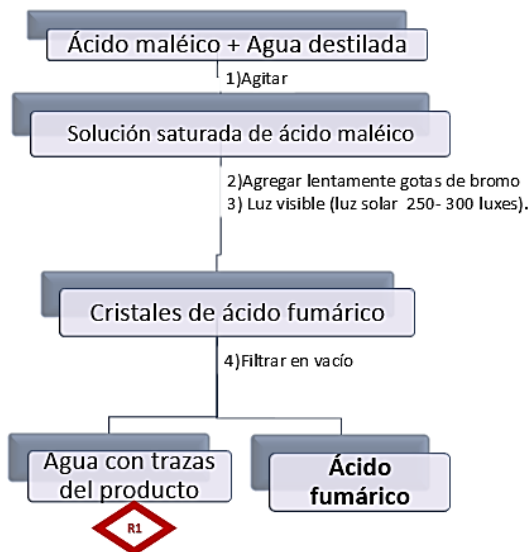
Material	Cantidad
Equipo de micrométodos	1

Pipeta graduada de 5 mL	1
Pro pipeta	1
Tapón	1
Pedazo de papel aluminio de 12x12	1

XIV. Procedimiento y diagrama del proceso:

1. Preparar solución saturada de ácido maléico.
 - 1.1 Pesar 3.75 g de ácido maléico.
 - 1.2 Agregar lentamente 5 mL de agua destilada, hasta disolver totalmente el ácido.
2. En un matraz Erlenmeyer de 25 mL colocar 5 mL de la solución saturada de ácido maléico.
3. Agregar lentamente 3 gotas de bromo.
4. Exponer el matraz a la luz hasta la aparición de cristales.
5. Detener la reacción cuando no se observe más la formación de cristales.
6. Filtrar al vacío.
7. Determinar punto de fusión del ácido fumárico y comparar con el de la materia prima.
8. Pesar el producto obtenido.

Diagrama ecológico



R1: Agregar bisulfito de sodio, neutralizar y desechar.

XV. Evaluación ambiental:

Masa del producto deseado

Masa=

Suma de las masas de entrada

Suma de las masas de entrada =

Economía atómica teórica

Es la medición intrínseca de cantidad de átomos pertenecientes a las materias primas que terminan formando parte del producto deseado en una transformación química. El valor deseable en este parámetro es de 100.

$$\% \text{ EAt} = \frac{\text{PM del producto deseado}}{\text{Suma de los PM de todos los reactivos}} \times 100$$

b) Economía atómica experimental

La economía experimental está, por lo tanto, basada en la cantidad real de reactivos usados en una síntesis experimental. El valor deseable en este parámetro es de 100.

$$\% \text{ EAe} = \frac{\text{masa teorica del producto deseado}}{\text{suma de masas de entrada}} \times 100$$

c) Rendimiento

$$\% \text{ R} = \left(\frac{\text{masa real del producto}}{\text{masa teorica del producto}} \right) \times 100$$

Eficiencia de masas

Es la relación de la masa del producto deseado respecto a la masa total de entrada. El valor deseable para este parámetro es 1.

$$\text{Eficiencia de masas} = \frac{\text{masa exp. del producto deseado}}{\text{suma de masas de entrada}}$$

e) Factor de aceptabilidad ambiental

Se enfoca en el problema de generación de residuos en las técnicas experimentales, lo cual impulsa el desarrollo de procesos más limpios y menos dañinos. Es la medida de la masa de residuos por kilogramo de producto deseado en una reacción, por lo que el valor deseable para este parámetro es 0.

$$\text{factor de aceptabilidad ambiental (E)} = \frac{\text{masa del residuo}}{\text{masa del producto deseado}}$$

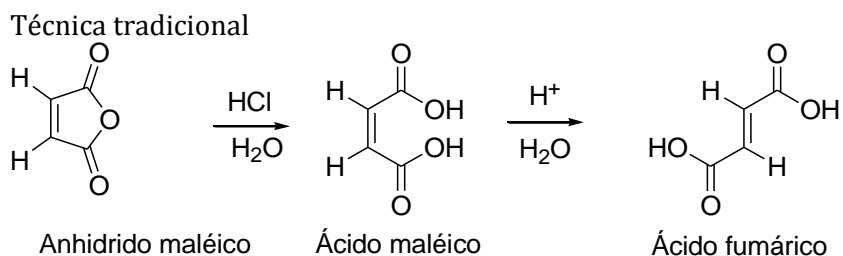
X. Identificación del producto:

Obtener punto de fusión.

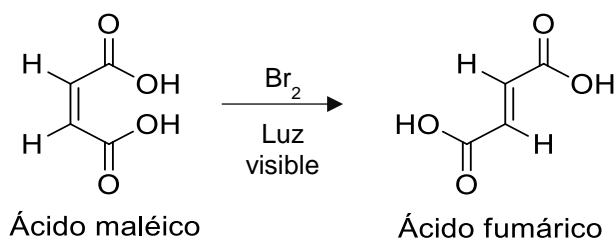
Anexo 4

4.1 Síntesis de ácido fumárico

Las reacciones de estudio son:



Técnica alternativa



Técnica tradicional

Tabla 1. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Anhidrido maléico	1.0 g
Ácido clorhídrico concentrado	2.5 mL
Agua	2 mL

Tabla 2. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Anhidrido maléico	3	1	1	B		Sustancia que causa necrosis visibles en la piel o corroe el acero o el aluminio
Ácido clorhídrico concentrado	3	0	1	B		Corrosivo, provoca quemaduras. Irritante, Irrita vías respiratorias.

Tabla 3. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

<i>Material</i>	<i>Cantidad</i>	<i>Material</i>	<i>Cantidad</i>
Matraz bola de una boca de 50 mL	1	Probeta de 10 mL	1
Refrigerante para agua con mangueras	1	Espátula	1
Vaso de precipitados de 150 mL	1	Recipiente de peltre	1
Matraz Erlenmeyer de 125 mL	1	Agitador magnético	1
Pinzas de tres dedos con nuez	1	Agitador de vidrio	1
Embudo Büchner con alargadera	1	Matraz Kitasato	1
Probeta de 25 mL	1	Canastilla	1
Embudo de filtración rápida	1	Reóstato	1

Procedimiento y diagrama del proceso

- En un matraz de bola de una boca de 50 mL colocar un gramo de anhídrido maléico y disolver en 2 mL de agua caliente.
- Agregar poco a poco 2.5 mL de ácido clorhídrico concentrado.
- Colocar el refrigerante en posición de reflujo y calentar a ebullición con agitación magnética durante 1 hora.
- Los cristales de ácido fumárico se forman en el seno de la reacción.
- Terminando el reflujo, enfriar el matraz con agua.
- Filtrar al vacío.
- Determinar punto de fusión del ácido fumárico y compararlo con el de la materia prima.
- Pese el producto obtenido.

Opcional (purificación)

- Recristalizar de una solución de ácido clorhídrico al 10%.

NOTAS:

- ★ Cuando aparezcan los cristales, vigile frecuentemente el sistema de reflujo para evitar proyecciones.
- ★ Determine el punto de fusión en el aparato de Fisher-Johns, caliente hasta 250°C y observe si funde o no el producto obtenido.

Técnica alternativa

Tabla 4. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Ácido maléico	3.75 g
Agua destilada	5 mL
Bromo	3 gotas

Tabla 5. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Ácido maléico	2	1	0	A	 	Corrosivo. Provoca grave irritación ocular y posibles quemaduras. Causa irritación a la piel y a las vías respiratorias. Puede ser nocivo si se ingiere o absorbe a través de la piel.
Bromo	3	0	3	B		Sustancia altamente tóxica por inhalación, ingestión o por contacto directo con la piel.

Tabla 6. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

<i>Material</i>	<i>Cantidad</i>
Equipo de micrométodos	1
Pipeta graduada de 5 mL	1
Pro pipeta	1
Tapón	1
Pedazo de papel aluminio de 12x12	1

Procedimiento y diagrama del proceso

1. Preparar solución saturada de ácido maléico.
 - a. Pesar 3.75 g de ácido maléico.
 - b. Agregar lentamente 5 mL de agua destilada, hasta disolver totalmente el ácido.
2. En un matraz Erlenmeyer de 25 mL colocar 5 mL de la solución saturada de ácido maléico.
3. Agregar lentamente 3 gotas de bromo.
4. Exponer el matraz a la luz solar durante 15-20 minutos.
5. Detener la reacción cuando no se observe más la formación de cristales.
6. Filtrar al vacío.
7. Determinar punto de fusión del ácido fumárico y comparar con el de la materia prima.
8. Pesar el producto obtenido.

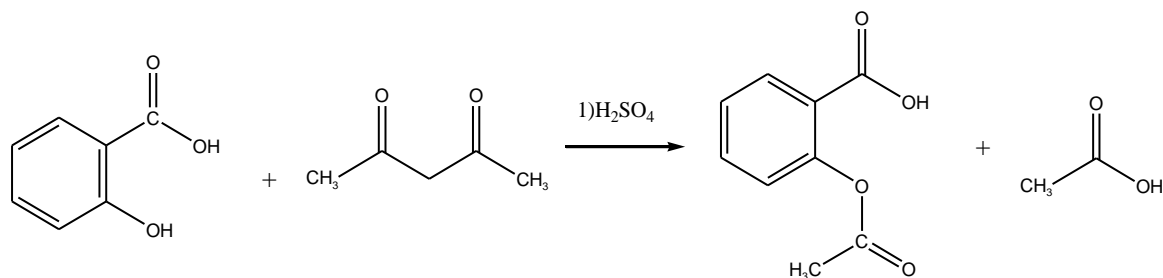
Opcional (purificación)

1. Recristalizar de agua

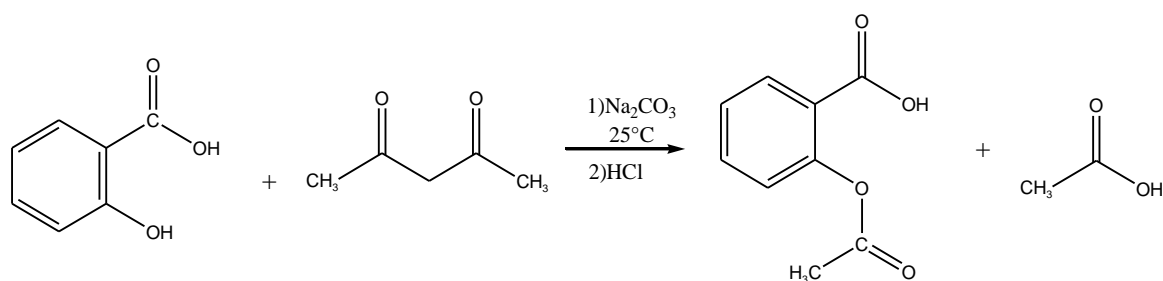
4.2. Síntesis de aspirina

La reacción que tiene lugar es:

Técnica tradicional



Técnica alternativa



Técnica tradicional

Tabla 7. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Ácido salicílico	2 g
Anhídrido acético	5 mL
Ácido sulfúrico concentrado	2 gotas

Tabla 8. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Ácido salicílico	0	1	0	A		Puede causar irritación del tracto respiratorio, tracto gastrointestinal y ojos, quemaduras en la piel, dolor de cabeza, náuseas y vómitos, disminución de la visión, zumbidos en los oídos y sordera, confusión, sudores, disturbios metabólicos y daño al riñón.
Anhídrido acético	3	2	1	B		Puede causar quemaduras cutáneas, gastrointestinales y oculares, dolor abdominal, de garganta, piel, y ojos, dificultad respiratoria y shock.
Ácido sulfúrico concentrado	3	0	2	B		Corrosivo, provoca quemaduras. Irritante, Irrita vías respiratorias.

Tabla 9. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

<i>Material</i>	<i>Cantidad</i>	<i>Material</i>	<i>Cantidad</i>
Equipo de micrométodos	1	Propipeta	1
Soporte universal	1	Cristalizador chico	1
Pinzas de tres dedos con nuez	2	Mangueras	1
Vaso de precipitados de 100 mL	2	Agitador magnético	1
Probeta de 50 mL	1	Parrilla eléctrica	1
Pipeta de 5 mL	1		1

Procedimiento y diagrama del proceso

1. Colocar 2 g de ácido salicílico en un matraz bola de 10 mL y añadir 5 mL de anhídrido acético seguidos de 2 gotas de ácido sulfúrico concentrado.
2. Agitar manualmente con cuidado hasta que el ácido salicílico se disuelva.

3. Montar un refrigerante en posición de reflujo y conectarlo al matraz que deberá estar en el cristalizador con agua, iniciar el calentamiento y mantener a reflujo durante 15 minutos.
4. Dejar enfriar a temperatura ambiente y pesar la mezcla a un vaso de precipitados de 100 mL.
5. Enfriar el vaso ligeramente en baño de hielo hasta que se produzcan cristales.
6. Añadir 50 mL de agua fría.
7. Filtrar al vacío y lavar el matraz con el filtrado las veces que sea necesario.
8. Pesar el producto obtenido.
9. Determinar punto de fusión del producto y comparar con el de la materia prima.

Opcional (purificación)

9. Colocar el producto bruto en un vaso de precipitados de 100 mL y añadir 25 mL de una solución saturada de NaHCO_3
10. Agitar hasta que cesen las burbujas producidas de CO_2 y filtrar al vacío
11. Verter cuidadosamente el filtrado en un vaso de precipitados y adicionar gota a gota HCl conc. Sin dejar de agitar, hasta que no se observe más precipitación de la aspirina. Enfriar en hielo.
12. Filtrar al vacío y enjuagar con pequeñas cantidades de agua destilada.

Técnica alternativa

Tabla 10. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Ácido salicílico	0.56 g
Anhídrido acético	1.2 mL
Carbonato de sodio	2.4 g
Ácido clorhídrico (50%)	10 mL

Tabla 11. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).






	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Ácido salicílico	0	1	0	A		Puede causar irritación del tracto respiratorio, tracto gastrointestinal y ojos, quemaduras en la piel, dolor de cabeza, náuseas y vómitos, disminución de la visión, zumbidos en los oídos y sordera, confusión, sudores, disturbios metabólicos y daño al riñón.
Anhídrido acético	3	2	1	B		Puede causar quemaduras cutáneas, gastrointestinales y oculares, dolor abdominal, de garganta, piel, y ojos, dificultad respiratoria y shock.
Carbonato de sodio	2	0	0	B		Por exposición causa enrojecimiento de piel y ojos, dolor abdominal, ocular y de garganta, tos, visión borrosa y sensación de quemazón.
Ácido clorhídrico	3	0	1	B	 	Corrosivo, provoca quemaduras. Irritante, Irrita vías respiratorias.

Tabla 12. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

<i>Material</i>	<i>Cantidad</i>	<i>Material</i>	<i>Cantidad</i>
Equipo de micrométodos	1	Pinzas de tres dedos con nuez	1
Probeta de 10 mL	1	Soporte universal	1
Cristalizador chico	1	Mangueras	1

Procedimiento y diagrama del proceso

1. En un vaso de precipitados de 50 mL colocar 0.56g de ácido salicílico y disolver en 1.2 mL de anhídrido acético y mezclar con la varilla de vidrio.
2. Una vez que se obtenga una mezcla homogénea, adicionar 2.4g de carbonato de sodio y agitar nuevamente la mezcla con la varilla de vidrio durante 10 minutos.
3. Adicionar lentamente 6 mL de agua destilada y posteriormente una disolución de ácido clorhídrico al 50% hasta que el pH sea de 3.
4. Enfriar la reacción en un cristizador con hielo.
5. Filtrar al vacío y lavar con agua fría.
6. Pesar el producto obtenido.
7. Determinar punto de fusión del ácido acetilsalicílico y compararlo con el de la materia prima.

Opcional (purificación)

1. Recristalizar con 10 mL de acetato de etilo y hexano (1:1)

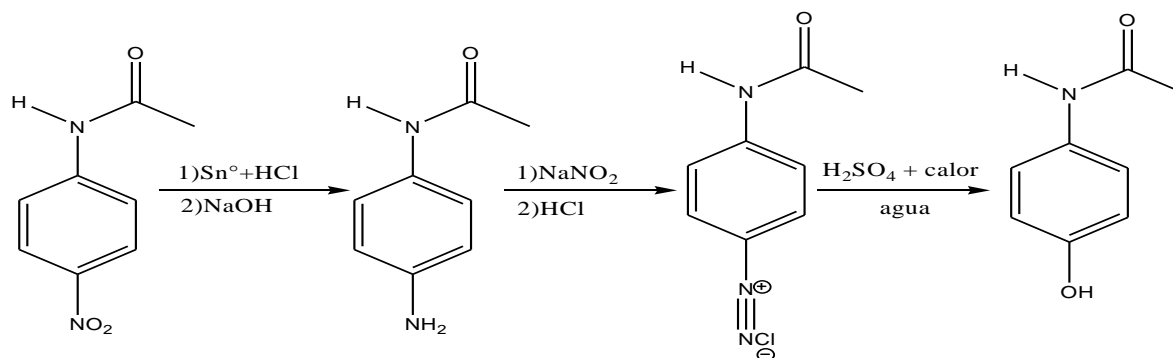
NOTAS:

- El ácido acetilsalicílico es ligeramente soluble en agua por lo que es necesario que se utilice agua fría.

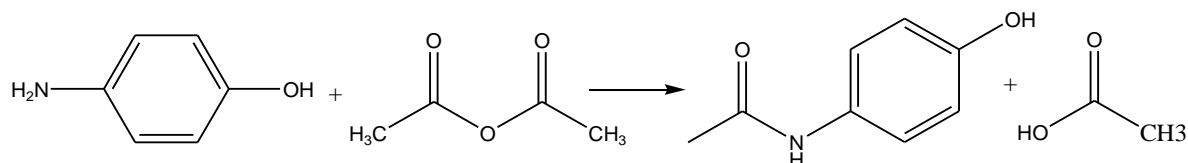
4.3 Síntesis de paracetamol

Las reacciones de estudio son:

Técnica tradicional:



Técnica alternativa:





Técnica tradicional

Tabla 13. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
p-nitroacetanilida	2 g
Estaño	25 g
Cloruro de sodio	5 g
Cloruro de metileno	20 mL
Ácido clorhídrico concentrado	50 mL
Ácido clorhídrico 1 N	25 mL
Ácido clorhídrico 2 N	12.5 mL
Hidróxido de sodio al 40%	100 mL
Hidróxido de sodio en lentejas	5 g
p-aminoacetanilida	5g
Nitrito de sodio	2g
Agua destilada	150 mL

Tabla 14. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
-------	----------------	----------	------------	--------------------------	-------------------

p-nitroacetanilida	1	1	1	A		Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias.
Estaño	1	1	1	A		Ha sido investigado como tumorigeno.
Cloruro de sodio	1	0	0	A		Causa irritación leve en ojos y piel. Podría causar vómito, deshidratación, diarrea, problemas de tensión sanguínea, contracciones musculares, rigidez, colapso, muerte.
Cloruro de metileno	2	1	0	B		Irritaciones en piel, mucosas y en ojos. Trastornos de visión, náuseas, vómitos. En grandes cantidades causa efectos en el sistema nervioso central.
Ácido clorhídrico	3	0	1	B	 	Corrosivo, provoca quemaduras. Irritante, Irrita vías respiratorias.




Hidróxido de sodio	3	0	1	B		Dependiendo de la exposición puede causar desde irritación leve a quemaduras graves en tracto respiratorio, ojos, piel que pueden dar lugar a neumonitis severa y ceguera.
p-aminoacetanilida	2	1	0	B		Puede causar reacción alérgica en la piel, irritación de los ojos, y dificultad respiratoria.
Nitrito de sodio	3	0	1	B		La sustancia irrita los ojos, la piel y el tracto respiratorio. La sustancia puede tener efectos sobre la sangre y el sistema nervioso. La exposición puede producir la muerte.

Tabla 15. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

Material	Cantidad
Barra magnética	1
Cristalizador	1

Equipo Quickfit	1
Frasco boca ancha 50 mL	1
Pipeta graduada de 10 mL	2

Probeta graduada de 100 mL	1
Vaso de precipitados de 100 mL	1
Vaso de precipitados de 250 mL	1
Vaso de precipitados de 500 mL	1
Embudo Büchner	1
Matraz Kitasato de 250 mL	1
Material	Cantidad
Matraz Erlenmeyer de 125 mL	1
Matraz Erlenmeyer de 250 mL	2

Propipeta	1
Manguera	2
Manguera para vacío	1
Pinzas de 3 dedos	3
Soporte universal	3
Espátula	1
Parrilla eléctrica con agitación	1
Termómetro	1

Procedimiento y diagrama del proceso

1ª parte

- Colocar 10 g de p-nitroacetanilida, 25 g de estaño y una barra magnética en un matraz bola de 250mL.
- Colocar el matraz sobre la parrilla de agitación y dentro de un cristizador con hielo.
- Agitar y añadir lentamente (porciones de 5 mL) 50 mL de ácido clorhídrico concentrado.
- Calentar suavemente a baño María por 20 minutos.
- Verter la mezcla en un vaso de precipitados de 500 mL sumergido en hielo, y con agitación magnética, agregar lentamente 100 mL de una solución de hidróxido de sodio al 40% (fría) hasta obtener un pH alcalino.
- Destilar la mezcla por arrastre de vapor.
- Trasvasar el destilado obtenido a un matraz Erlenmeyer y agregar 5 g de cloruro de sodio, agitar hasta la disolución y separar por decantación.
- Extraer con 60 mL de cloruro de metileno (3 extracciones con 20 mL cada una) y reunir todos los extractos orgánicos.
- Secar la solución orgánica con 5 g de hidróxido de sodio sólido.
- Evaporar el cloruro de metileno con baño María en la campana de extracción.

2ª parte

- Colocar 5 g de p-aminoacetanilida, 12.5 mL de ácido clorhídrico 2 N y 12.5 mL de agua destilada en un matraz Erlenmeyer de 125 mL.
- Enfriar la mezcla en un baño de hielo usando el cristizador y agitar magnéticamente.
- Una vez que la mezcla alcance una temperatura de 0-5°C, verter la solución a un matraz Erlenmeyer de 250mL que contenga 2g de nitrito de sodio disueltos en 25 mL de agua destilada fría (mantener la reacción en el baño de hielo).
- Al término de la adición dejar que la reacción alcance la temperatura ambiente.
- Verter la mezcla en 25 mL de ácido clorhídrico 1N contenido en un matraz Erlenmeyer de 250 mL.
- Calentar a baño María durante 30 minutos con agitación magnética.
- Deje en reposo la mezcla durante 15 minutos y enfriar con hielo.
- Filtrar al vacío y lavar con agua hasta pH neutro.

19. Determinar punto de fusión del producto y comparar con el de la materia prima.

Opcional (purificación)

1. Recristalizar con agua

Técnica alternativa

Tabla 16. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
p-aminofenol	0.40 g
Anhídrido acético	0.35 mL
Agua destilada	0.50 mL

Tabla 17. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
p-aminofenol	0	1	0	A	 	Nocivo por inhalación e ingestión, puede provocar irritación del tracto respiratorio.
Anhídrido acético	3	2	1	B		Puede causar quemaduras cutáneas, gastrointestinales y oculares, dolor abdominal, de garganta, piel, y ojos, dificultad respiratoria y shock.

Tabla 18. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

Material	Cantidad
Equipo de micrométodos	1
Pipeta de 1 mL	1
Vidrio de reloj	1
Pinzas de tres dedos con nuez	1
Soporte universal	1
Parrilla de calentamiento	1

Procedimiento y diagrama del proceso

1. En un matraz redondo de 10 mL colocar 0.35mL de anhídrido acético, 0.4 g de p-aminofenol y 0.5 mL de agua.
2. Adaptar el refrigerante de agua en posición de reflujo y calentar hasta la temperatura de reflujo y mantenerlo por 30 minutos
3. Enfriar la reacción en un baño de hielo.
4. Filtrar al vacío y lavar con agua fría.
5. Pesar el producto obtenido
6. Determinar punto de fusión del p-acetaminofenol y compararlo con el de la materia prima.

Opcional

1. Recristalizar de agua y usar carbón activado si es necesario

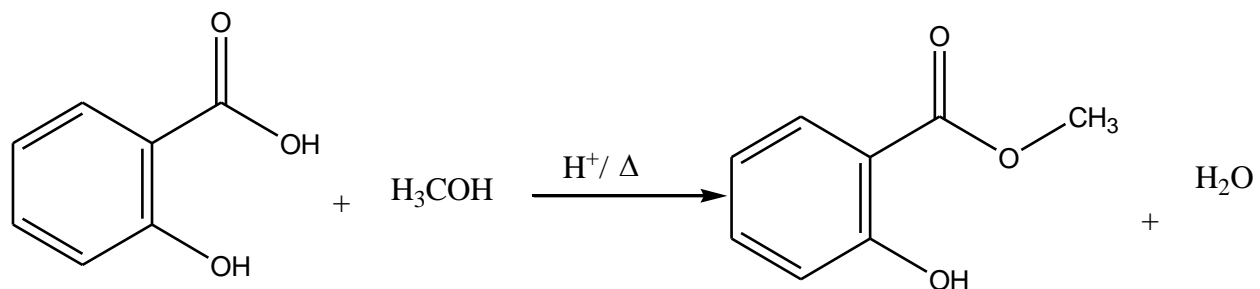


4.4. Síntesis de un éster

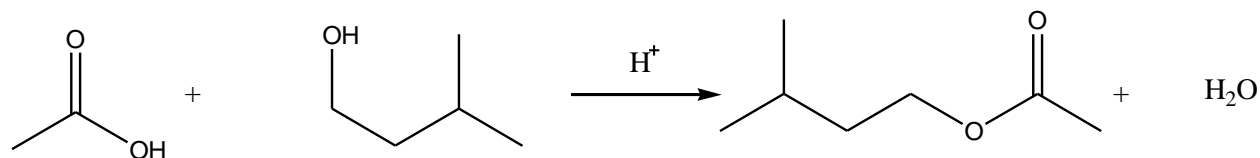
Las reacciones de estudio son:

Técnica tradicional:

Salicilato de metilo

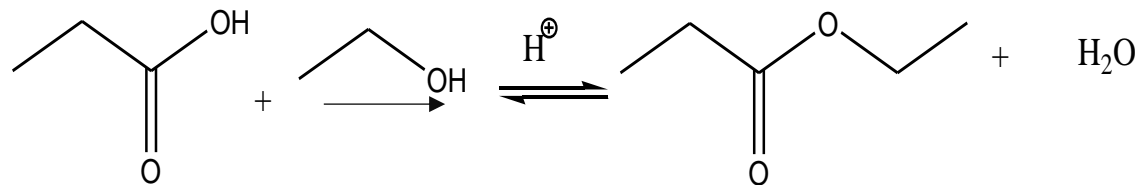


Acetato de isoamilo



Técnica alternativa:

Propionato de etilo



Técnica tradicional (salicilato de metilo)

Tabla 19. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional de obtención de salicilato de metilo. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Ácido salicílico	1.0 g
Ácido sulfúrico concentrado	1 mL
Metanol	3 mL
Agua	2 mL
Bicarbonato de sodio al 5%	5 mL
Cloruro de calcio anhidro	0.1 g

Tabla 20. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Ácido salicílico	0	1	0	A		Puede causar irritación del tracto respiratorio, tracto gastrointestinal y ojos, quemaduras en la piel, dolor de cabeza, náuseas y vómitos, disminución de la visión, zumbidos en los oídos y sordera, confusión, sudores, disturbios metabólicos y daño al riñón.
Ácido sulfúrico concentrado	3	0	2	B	 	Corrosivo, provoca quemaduras. Irritante, Irrita vías respiratorias.
Metanol	2	3	0	B		Irrita las mucosas nasales y oculares. Produce asfixia, vértigo, tos, dolor de cabeza, náuseas, vómito, trastornos oculares, convulsiones e inconciencia.
Bicarbonato de sodio	1	0	0	A		Puede causar desde irritación de las vías respiratorias superiores hasta neumonía química, irritación y quemaduras en la piel y ojos, la ingestión por más de 5 días puede causar diarrea, mareo, vómito y dolor abdominal.
Cloruro de calcio anhidro	2	0	1	B		Irritación de las vías respiratorias, en piel y mucosa gástrica.

Tabla 21. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

<i>Material</i>	<i>Cantidad</i>	<i>Material</i>	<i>Cantidad</i>
Equipo de micrometodos	1	Soporte universal	1
Baño de arena	1	Pinzas para soporte	1
Pipeta graduada de 10 mL	1	Anillo de hierro	1
Pipeta graduada de 5 mL	2	Probeta graduada de 100 mL	1
Propipeta	1	Mangueras	1
Parrilla eléctrica con agitador magnético	1	Espátula	1
Piseta con agua	1		

Procedimiento y diagrama del proceso

1. En un matraz de bola de una boca de 10 mL colocar un gramo de ácido salicílico y disolver en 3 mL de metanol.
2. Agregar poco a poco 1 mL de ácido sulfúrico concentrado agitando ligeramente el matraz de manera manual.
3. Colocar el refrigerante en posición de reflujo y calentar en baño de arena a ebullición con agitación magnética durante 40 minutos.
4. Terminando el reflujo, enfriar el matraz con agua.
5. Vaciar la mezcla de reacción a un embudo de separación que contenga 5 mL de agua destilada fría.
6. Enjuagar el matraz de reacción con 2 mL de agua fría y adicionarlos al embudo de separación.
7. Agitar varias veces la mezcla dentro del embudo y separar las fases.
8. Descartar la capa acuosa (superior).
9. Regresar la capa orgánica (inferior) al embudo de separación y se adiciona una solución de bicarbonato de sodio al 5% hasta un pH neutro o ligeramente alcalino, repetir la operación 2 veces, siempre descartando la fase acuosa.
10. Agregar a la solución orgánica 3 mL de agua y separar nuevamente las fases.
11. Vaciar la capa orgánica en un vaso de precipitados de 50 mL y agregar 0.1 g de cloruro de calcio anhidro para secar el éster.
12. Agitar suavemente, dejar reposar hasta que el éster esté completamente claro y separarlo por decantación.

NOTAS:

- ★ El tiempo de reflujo comienza cuando escurran gotas por el matraz.

Técnica tradicional (acetato de isoamilo)







Tabla 22. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional de obtención de acetato de isoamilo. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Ácido acético glacial	2.4 mL
Ácido sulfúrico concentrado	0.4 mL
Alcohol isoamílico	1.8 mL
Bicarbonato de sodio al 5%	9 mL
Solución saturada de cloruro de sodio	1 mL
Sulfato de magnesio anhidro	0.1 g

Agua

10 mL

Tabla 23. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Ácido acético glacial	3	2	0	B		Inflamable. Provoca quemaduras graves.
Ácido sulfúrico concentrado	3	0	2	B	 	Corrosivo, provoca quemaduras. Irritante, Irrita vías respiratorias.
Alcohol isoamílico	1	2	0	B		Irrita las mucosas nasales y oculares. Produce asfixia, vértigo, tos, dolor de cabeza, náuseas, vómito, trastornos oculares, convulsiones e inconciencia.
Bicarbonato de sodio	1	0	0	A		Puede causar desde irritación de las vías respiratorias superiores hasta neumonía química, irritación y quemaduras en la piel y ojos, la ingestión por más de 5 días puede causar diarrea, mareo, vómito y dolor abdominal.
Cloruro de sodio	1	0	0	A		Causa irritación leve en ojos y piel. Podría causar vómito, deshidratación, diarrea, problemas de tensión sanguínea, contracciones musculares, rigidez, colapso, muerte.


Sulfato de magnesio anhidro	1	0	0	A		Irritación de las vías respiratorias, en piel, ojos y mucosa gástrica.
-----------------------------	---	---	---	---	--	--

Tabla 24. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

<i>Material</i>	<i>Cantidad</i>	<i>Material</i>	<i>Cantidad</i>
Equipo de micrométodos	1	Soporte universal	1
Baño de arena	1	Pinzas para soporte	1
Pipeta graduada de 1 mL	1	Anillo de hierro	1
Pipeta graduada de 5 mL	2	Probeta graduada de 50 mL	1
Propipeta	1	Mangueras	1
Vaso de precipitados de 50 mL	2	Espátula	1
Piseta con agua	1	Parrilla eléctrica con agitador magnético	1

Procedimiento y diagrama del proceso

1. En un matraz de bola de una boca de 10 mL colocar 1.8 mL de alcohol isoamílico y en 2.4 mL de metanol.
2. Agregar poco a poco 0.4 mL de ácido sulfúrico concentrado agitando ligeramente el matraz de manera manual.
3. Colocar el refrigerante en posición de reflujo y calentar en baño de arena a ebullición con agitación magnética durante 40 minutos.
4. Terminando el reflujo, enfriar el matraz con agua.
5. Vaciar la mezcla de reacción a un embudo de separación que contenga 5 mL de agua destilada fría.
6. Enjuagar el matraz de reacción con 2 mL de agua fría y adicionarlos al embudo de separación.
7. Agitar varias veces la mezcla dentro del embudo y separar las fases.
8. Descartar la capa acuosa (inferior).
9. Regresar la capa orgánica (superior) al embudo de separación y se adiciona una solución de bicarbonato de sodio al 5%, repetir la operación 2 veces, siempre descartando la fase acuosa.
10. Agregar a la solución orgánica 3 mL de agua, añadir 1 mL de solución saturada de cloruro de sodio y separar cuidadosamente las fases.
11. Vaciar la capa orgánica en un vaso de precipitados de 50 mL y agregar 0.1 g de sulfato de magnesio anhidro para secar el éster.
12. Agitar suavemente, dejar reposar hasta que el éster esté completamente claro y separarlo por decantación.

NOTAS:

- ★ El tiempo de reflujo comienza cuando escurran gotas por el matraz.

Técnica alternativa (propionato de etilo)

Tabla 25. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Ácido propiónico	1.8 mL
Etanol	1.2 mL
Ácido sulfúrico concentrado	0.4 mL

Tabla 26. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).




	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Ácido propiónico	3	2	1	B		Sustancia corrosiva, provoca quemaduras.
Etanol	2	3	1	B		Sustancia inflamable. Nocivo- irritante y reactivo leves.
Ácido sulfúrico concentrado	3	0	2	B		Corrosivo.

Tabla 27. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

Material	Cantidad
Matraz bola de 25 mL	1
T de destilación	1
Refrigerante de agua con mangueras	1
Termómetro	1
Colector	1

Matraz Erlenmeyer de 10 mL	1
Pipeta graduada de 5 mL	3
Vaso de precipitados de 250 mL	1
Parrilla eléctrica con agitador magnético	1

Procedimiento y diagrama del proceso

1. Colocar 1.85 mL de ácido propiónico, 0.4 mL de ácido sulfúrico concentrado y 1.6 mL de etanol dentro del matraz bola de 25 mL
2. Montar un equipo de destilación
3. Calentar 20 minutos a reflujo y otros 20 minutos más de destilación a 51-53°C
4. Al finalizar la destilación se puede detectar el olor del propionato de etilo, abanicando la boca del matraz Erlenmeyer de 10 mL donde se colectó el mismo
5. Medir el volumen del producto obtenido
6. Obtener punto de ebullición
7. Pesar el residuo que se quedó en el matraz bola al término de la destilación

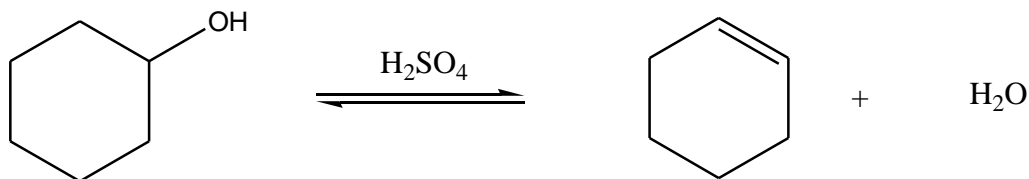
NOTAS:

- ★ La reacción debe realizarse en una campana, usando goggles y guantes
- ★ El H_2SO_4 es usado como catalizador de la reacción

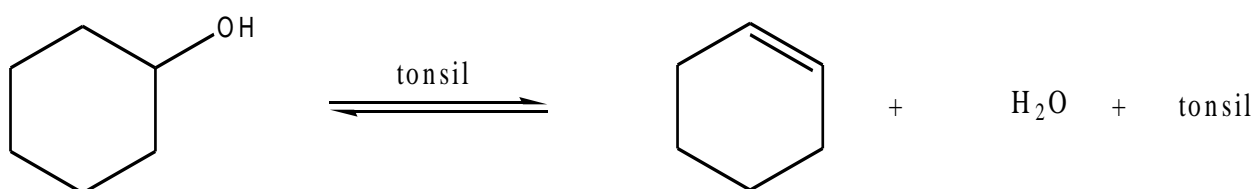
4.5. Deshidratación de ciclohexanol

Las reacciones de estudio son:

Técnica tradicional:



Técnica alternativa:



Técnica tradicional

Tabla 28. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
ciclohexanol	3 mL
Ácido sulfúrico concentrado	0.5 mL
Cloruro de sodio	1 g
Bicarbonato de sodio al 5%	15 mL
Sulfato de sodio anhidro	0.5 g

Tabla 29. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Ciclohexanol	1	2	0	B		Nocivo por inhalación y por ingestión. Irrita las vías respiratorias y la piel.
Ácido sulfúrico concentrado	3	0	2	B		Corrosivo.



Cloruro de sodio	1	0	0	A		Causa irritación leve en ojos y piel. Podría causar vómito, deshidratación, diarrea, problemas de tensión sanguínea, contracciones musculares, rigidez, colapso, muerte.
Bicarbonato de sodio	1	0	0	A		Puede causar desde irritación de las vías respiratorias superiores hasta neumonía química, irritación y quemaduras en la piel y ojos, la ingestión por más de 5 días puede causar diarrea, mareo, vómito y dolor abdominal.
Sulfato de sodio anhidro	1	0	0	A		Si se ingiere puede irritar la boca, esófago y estómago. Irrita vías respiratorias, la piel y ojos cuando la exposición es elevada.

Tabla 30. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

<i>Material</i>	<i>Cantidad</i>	<i>Material</i>	<i>Cantidad</i>
Barra magnética	1	Probeta de 10 mL	1
Cristalizador	1	Soporte universal	2
Equipo Quickfit	1	Embudo Büchner	1
Canastilla de calentamiento	1	Termómetro	1
Matraz Kitasato	1	Tapón monohoradado	1
Pipeta graduada de 1 mL	1	Vaso de precipitados de 100 mL	1
Propipeta	1	Piseta con agua destilada	1

Procedimiento y diagrama del proceso

- Colocar 3 mL de ciclohexanol y una barra magnética de agitación en un matraz bola de 50mL.
- Adicionar gota a gota 0.5 mL de ácido sulfúrico concentrado mientras se agita magnéticamente.
- Montar un equipo de destilación.
- Iniciar el calentamiento controlando la temperatura y esperar a que la temperatura se establezca (aproximadamente a 80°C).
- Recolectar todo lo que destile en un rango de 80-85°C. El matraz colector deberá estar sumergido en un baño de hielo dentro de un cristalizador.
- Suspenda el calentamiento bajo estas tres condiciones:
 - La temperatura ha superado los 85°C o empieza a subir súbitamente
 - Solo queda un pequeño residuo en el matraz
 - Empiezan a aparecer vapores blancos de SO₂.
- Transferir el destilado en el embudo de separación y agregar agua destilada. Colocar el tapón en el embudo y agitar lentamente.
- Separar las fases y descartar la fase inferior (fase acuosa).
- Adicionar 1 g de cloruro de sodio al embudo de separación que contiene la fase orgánica resultante de los pasos anteriores.
- Desechar la solución saturada de cloruro de sodio (fase inferior) y a continuación lavar el producto contenido en el embudo de separación (fase superior) con una disolución de bicarbonato de sodio al 5%, repetir tres veces más empleando porciones de 5 mL cada vez.
- En cada lavado se debe desechar la fase acuosa.
- Colocar la fase orgánica en un vaso de precipitados de 100 mL, y adicionar 0.5 g de sulfato de sodio anhidro.
- Agitar durante 30 minutos y después filtrar al vacío.
- Transferir el producto a una probeta de 10 mL para medir su volumen.

Técnica alternativa

Tabla 31. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Ciclohexanol	4.8 mL
Tonsil SSP	0.2 g

Tabla 32. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).


	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Ciclohexanol	1	2	0	B		Nocivo por inhalación y por ingestión. Irrita las vías respiratorias y la piel.
Tonsil SSP	NA	NA	NA	NA	NA	Si se ingieren grandes cantidades puede causar irritación estomacal y/o intestinal. La Inhalación repetida y prolongada puede causar irritación a las vías respiratorias. Al contacto con ojos puede causar irritación mecánica.

Tabla 33. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

Material	Cantidad
Equipo de micrométodos	1
Pipeta de 5 mL	1
Probeta de 10 mL	1
Termómetro de -10 a 400°C	1

Material	Cantidad
Porta termómetro	1
Pinzas de tres dedos con nuez	2
Soporte universal	1
Parrilla de calentamiento	1

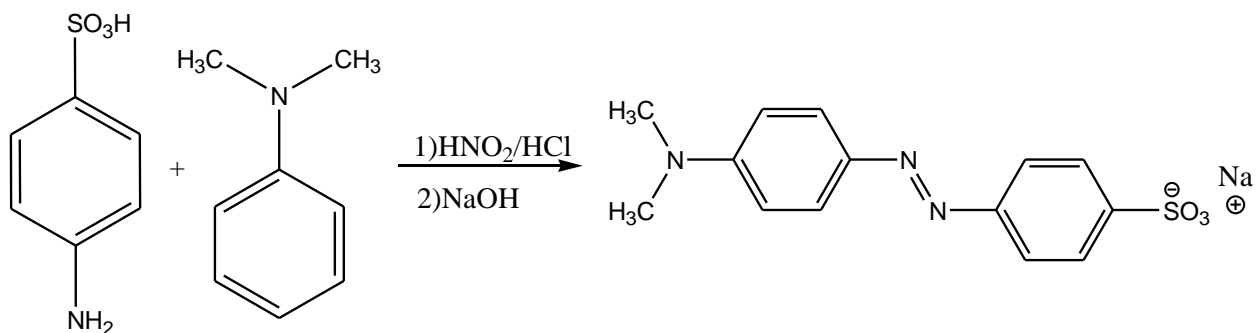
Procedimiento y diagrama del proceso

1. Colocar 4.8 mL de Ciclohexanol, 0.2 g de Tonsil SSP y una barra magnética de agitación en un matraz bola de 50mL.
2. Montar un equipo de reflujo directo,
3. Agregar cuerpos de ebullición y calentar la mezcla usando una parrilla con agitación durante 60 minutos.
4. Montar un equipo de destilación.
5. Iniciar el calentamiento controlando la temperatura y esperar a que la temperatura se estabilice (aproximadamente a 80°C).
6. Recolectar todo lo que destile en un rango de 80-85°C. El matraz colector deberá estar sumergido en un baño de hielo dentro de un cristizador.
7. Suspenda el calentamiento bajo estas tres condiciones:
 - a. La temperatura ha superado los 85°C o empieza a subir súbitamente
 - b. Solo queda un pequeño residuo en el matraz
 - c. Empiezan a aparecer vapores blancos de SO₂.

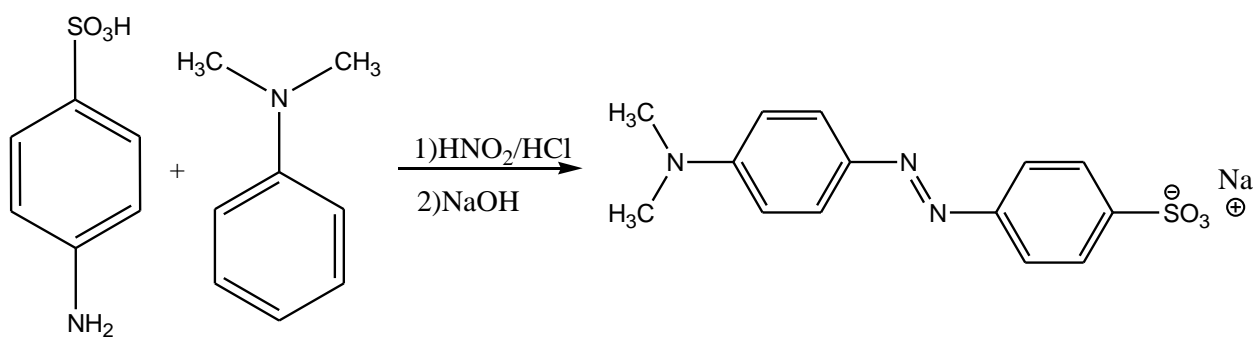
4.6. Síntesis de un azocompuesto

Las reacciones de estudio son:

Técnica tradicional:



Técnica alternativa:



Técnica tradicional

Tabla 34. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Ácido sulfanílico	1 g
N, N- dimetilanilina	0.6 mL
Nitrito de sodio	0.4 g
Ácido clorhídrico 1 N	5 mL
Ácido clorhídrico 2 N	2.5 mL
Hidróxido de sodio 1N	5 mL
Hidróxido de sodio 2 N	2.5 mL

Tabla 35. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Ácido sulfanílico	3	1	0	B		Corrosivo e irritante en vías respiratorias, piel, ojos y sistema digestivo.
N,N-dimetilanilina	3	2	0	B		Toxico por inhalación, ingestión y contacto con la piel.
Nitrito de sodio	3	0	1	B		Por inhalación o ingestión: labios o uñas azulados, piel azulada, tos, vértigo, dolor de cabeza, dificultad respiratoria, pérdida de conocimiento. Causa irritación al contacto con la piel y ojos.
Ácido clorhídrico	3	0	1	B		Corrosivo, provoca quemaduras. Irritante, Irrita vías respiratorias.
Hidróxido de sodio	3	0	1	B		Dependiendo de la exposición puede causar desde irritación leve a quemaduras graves en tracto

						respiratorio, ojos, piel que pueden dar lugar a neumonitis severa y ceguera.
--	--	--	--	--	--	--

Tabla 36. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

Material	Cantidad	Material	Cantidad
Vaso de precipitados de 50 mL	3	Pipeta graduada de 5 mL	3
Matraz Erlenmeyer de 125 mL	1	Soporte universal	2
Cristalizador mediano	1	Embudo Büchner	1
Matraz Kitasato	1	Varilla de agitación	1
Propipeta	1	Piseta con agua destilada	1

Procedimiento y diagrama del proceso

- Preparar las siguientes mezclas en 3 vasos de precipitados de 50 mL diferentes:
 - Vaso 1. Colocar 2.5 mL de HCl 2 N y poner el vaso en baño de hielo.
 - Vaso 2. Pesar 1 g de ácido sulfanílico y agregar 2.5 mL de NaOH 2N.
 - Vaso 3. Pesar 0.4 g de NaNO_2 y disolver en 5 mL de agua destilada.
- Verter la mezcla del vaso 2 en la solución de nitrito de sodio y agitar suavemente con ayuda de la varilla.
- Una vez teniendo esta mezcla, agregar al vaso donde está el ácido clorhídrico en baño de hielo.
- En un matraz Erlenmeyer de 125 mL mezclar 0.6 mL de N,N- dimetilanilina en 5 mL de ácido clorhídrico 1 N, y entonces, agregar el producto resultante del vaso 1.
- Una vez hecha la mezcla, neutralizar cuidadosamente con hidróxido de sodio 1N hasta un pH ligeramente alcalino*
- Dejar en reposo la mezcla durante 20 minutos y después de este tiempo filtrar al vacío.

Opcional (purificación)

- Recristalizar con agua.

NOTA:





* Se observa un color pardo-anaranjado, lo que indica la sal sódica del colorante.

Técnica alternativa

Tabla 37. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Ácido sulfanílico	0.1 g
N, N- dimetilnilina	3 gotas
Nitrito de sodio	0.15 g
Ácido clorhídrico conc.	3 gotas
Hidróxido de sodio al 10%	5 mL

Tabla 38. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Ácido sulfanílico	3	1	0	B		Corrosivo e irritante en vías respiratorias, piel, ojos y sistema digestivo.
N,N-dimetilanilina	3	2	0	B		Toxico por inhalación, ingestión y contacto con la piel.
Nitrito de sodio	3	0	1	B		Por inhalación o ingestión: labios o uñas azulados, piel azulada, tos, vértigo, dolor de cabeza, dificultad respiratoria, pérdida de conocimiento. Causa irritación al contacto con la piel y ojos.
Ácido clorhídrico	3	0	1	B		Corrosivo, provoca quemaduras. Irritante, Irrita vías respiratorias.


Hidróxido de sodio	3	0	1	B		Dependiendo de la exposición puede causar desde irritación leve a quemaduras graves en tracto respiratorio, ojos, piel que pueden dar lugar a neumonitis severa y ceguera.

Tabla 39. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

Material	Cantidad
Vaso de precipitados de 150 mL	2
Pipeta de 1 mL	1
Varilla de vidrio	1
Vidrio de reloj	1
Espátula	1
Parrilla de calentamiento	1

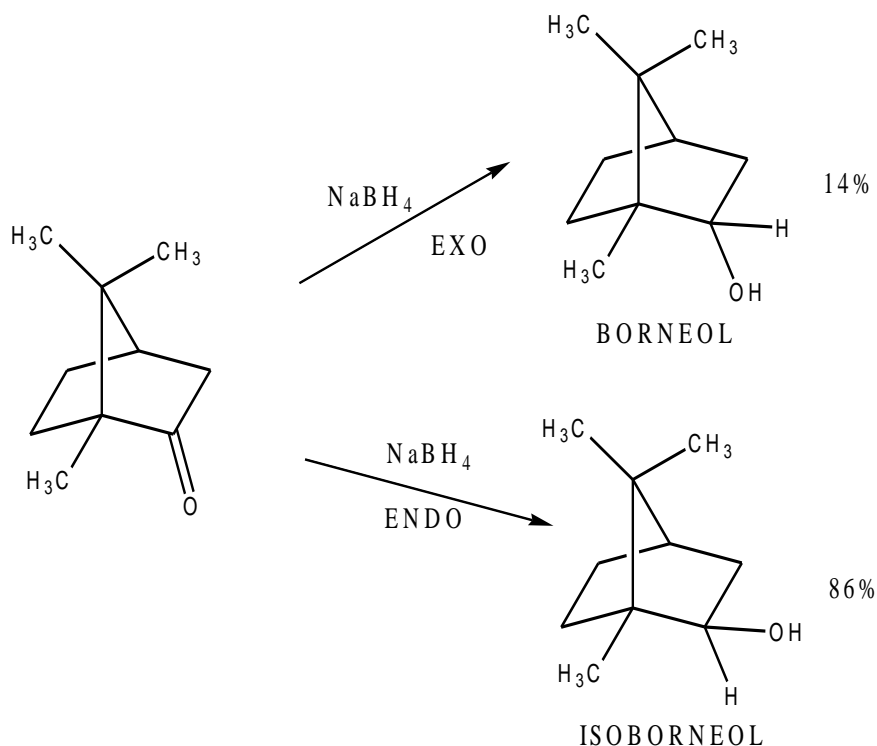
Procedimiento y diagrama del proceso

1. En un vaso de precipitados de 50 mL, colocar 0.1 g de ácido sulfanílico, 3 gotas de N,N-dimetilanilina, 3 gotas de ácido clorhídrico concentrado y 1 mL de agua.
2. Enfriar la mezcla hasta tener una temperatura de 0-5°C.
3. En otro vaso de precipitados de 50 mL, preparar una solución de 0.15g de nitrito de sodio disueltos en 2 mL de agua.
4. Mantener la temperatura debajo de 5°C y agregar gota a gota y con agitación constante 0.4 mL de la solución de nitrito de sodio a la solución de amina y ácido sulfanílico.
5. Una vez terminada la adición, agitar la mezcla hasta que esta llegue a temperatura ambiente.*
6. Agregar gota a gota una solución de hidróxido de sodio al 10% hasta tener un pH de 10.
7. Calentar de reacción con agitación constante y retirarla al iniciar la ebullición.
8. Enfriar en hielo.
9. Lavar con agua helada y secar el producto en el desecador o en la estufa para posteriormente pesarlo.

NOTA: * La mezcla adquiere una coloración rojo-vino oscuro.

4.7. Síntesis de borneol

La reacción de estudio es:



Técnica tradicional

Tabla 40. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica tradicional. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Alcanfor comercial	3 g
Etanol	10 mL
Borohidruro de sodio	1.5 g

Tabla 41. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Alcanfor	2	2	0	B		Irritante en vías respiratorias, piel y ojos.





Etanol	0	3	0	B		Sustancia inflamable. Nocivo-irritante y reactivo leves.
Borohidruro de sodio	3	4	2	B	  	Quemaduras (ojos, piel, garganta y pecho), dolor, dificultad respiratoria, jadeo, vómitos, shock o colapso.

Tabla 42. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

Material	Cantidad	Material	Cantidad
Equipo de micrométodos	1	Soporte universal	1
Probeta de 25 mL	1	Parrilla	1
Cristalizador	1	Pinza de 3 dedos con nuez	2

Procedimiento y diagrama del proceso

1. Disolver 3 gramos de alcanfor en 10 mL de etanol.
2. Agregar a la solución, 1.5 gramos de borohidruro de sodio en pequeñas porciones.*
3. Calentar la mezcla suavemente a baño María por 10 minutos (mantener el volumen de etanol constante).
4. Verter la mezcla en 50 gramos de hielo/agua y lavar el matraz con pequeñas cantidades de etanol.
5. Esperar a que se derrita el hielo y filtrar al vacío el sólido formado.

Opcional (purificación)

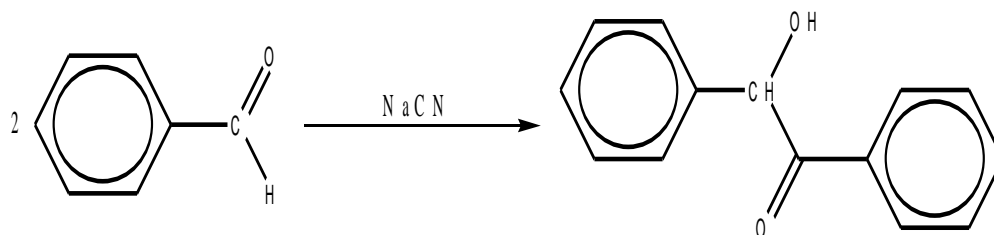
1. Disolver en la mínima cantidad de etanol caliente
2. Adicionar agua caliente hasta que la solución se vuelva turbia
3. Agregar etanol caliente para redissolver el sólido formado.
4. Enfriar en hielo y filtrar el producto al vacío.

NOTA:

* Puede haber efervescencia

4.8. Síntesis de benzoína

La reacción de estudio es:



Técnica alternativa

Tabla 41. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Benzaldehído	2 mL
Etanol	4 mL
Cianuro de sodio	0.25 g

Tabla 43. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Benzaldehído	2	2	0	B		Irritante, insuficiencia respiratoria, dermatitis, somnolencia, vértigo, inconsciencia, narcosis, dolor de cabeza, convulsiones.
Etanol	0	3	0	B		Sustancia inflamable. Nocivo-irritante y reactivo leves.
Cianuro de sodio	3	0	0	B		Muy tóxico por inhalación, por ingestión y en contacto con la piel. En contacto con ácidos libera gases muy

						tóxicos. Muy tóxico para los organismos acuáticos, puede provocar a largo plazo efectos negativos en el medio ambiente acuático.
--	--	--	--	--	--	--

Tabla 44. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

Material	Cantidad	Material	Cantidad
Equipo de micrométodos	1	Parrilla	1
Pipeta de 1 mL	1	Soporte universal	1
Pipeta de 5 mL	1	Pinza de 3 dedos con nuez	1

Procedimiento y diagrama del proceso

1. Disolver 0.5 g de cianuro de sodio en 1.75 mL de agua en un matraz bola de 50 mL.
2. Agregar al matraz una solución de 2 mL en 4 mL de etanol.
3. Colocar un refrigerante en posición de reflujo.
4. Calentar la mezcla en un baño de agua a ebullición durante 20 minutos.
5. Verter el contenido del matraz a un vaso de precipitados y enfriar en baño de hielo.
6. Filtrar el precipitado al vacío y lavar con 1.5 mL de etanol y después repetidas veces con agua fría.

Opcional (purificación)

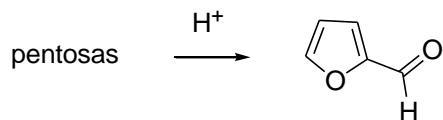
1. Recristalizar de etanol.
2. Enfriar, secar y pesar.

NOTA:

- ★ El NaCN es sumamente nocivo. Se debe evitar olerlo o que esté en contacto con la piel.

4.9. Furfural

La reacción de estudio es:





Técnica alternativa

Tabla 45. Lista de reactivos y cantidades para realizar la técnica alternativa. (Elaboración propia, 2016).

Reactivo	Cantidad
Ácido sulfúrico al 20 %	50 mL
Diclorometano	15 mL
Papa	7.5 g
Cloruro de sodio	El necesario
Sulfato de sodio anhidro	El necesario

Tabla 46. Código de riesgo de los reactivos de la técnica. (Elaboración propia, 2016).

	Salud	Inflamabilidad	Reactivo	Protección	Pictogramas de seguridad	Resumen de riesgo
Ácido sulfúrico	3	0	2	B		Provoca quemaduras graves en la piel y lesiones oculares graves. Nocivo para los organismos acuáticos.
Diclorometano	2	0	0	B		Nocivo. Posibles efectos cancerígenos. Carcinógeno. Efecto del órgano de blanco. Dañino si se ingiere. Irritante
Cloruro de sodio	1	0	0	A		No se considera una sustancia peligrosa.

Sulfato de sodio anhidro	1	1	2	B	No se considera una sustancia peligrosa.
--------------------------	---	---	---	---	--

Tabla 47. Material y equipo requerido. (Elaboración propia, 2016).

Material	Cantidad	Material	Cantidad
Equipo Quickfit	1	Embudo de vidrio	1
Embudo de separación	1	Parrilla	1
Vaso de precipitados de 250 mL	1	Soporte universal	2
Probeta de 50 mL	1	Pinza de 3 dedos con nuez	2
Anillo de hierro	1		

Procedimiento y diagrama del proceso

1. Pesar 7.5 g de cáscara de papa, y colocarlos en un matraz balón de 100 mL con 50 mL de solución de ácido sulfúrico al 20%, (o HCl al 12 %) tapar el matraz y guardarlo así durante 8 días
2. Calentar por microondas o parrilla diferentes muestras del macerado durante 40 min.
3. Después de este tiempo dejar enfriar la mezcla de reacción, filtrar y lavar el residuo con pequeños volúmenes de agua que se juntan con el filtrado
4. Saturar el filtrado con NaCl
5. Extraer el furfural de la solución acuosa con de 15 mL de diclorometano
6. Secar el extracto con Na_2SO_4 anhidro y filtrar o decantar para eliminarlo
7. Destilar el diclorometano hasta que en el matraz quede un residuo aceitoso color amarillo y olor característico
8. Determinar el volumen de producto para calcular el rendimiento.

NOTA:

- ★ Como la cantidad de producto suele ser muy pequeña es difícil medir el volumen, por lo que es aconsejable pesar el matraz con el que se va a realizar la destilación para determinar la cantidad de producto por diferencia de peso.



Casa abierta al tiempo
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 09022
Matrícula: 2151800978

EVALUACIÓN CUANTITATIVA DE LA ACEPTABILIDAD AMBIENTAL EN EXPERIMENTOS DE ALGUNOS PROGRAMAS CURRICULARES DE LA DIVISIÓN DE CIENCIAS BIOLÓGICAS Y DE LA SALUD DE LA UAM-IZTAPALPA.

En la Ciudad de México, se presentaron a las 11:00 horas del día 8 del mes de septiembre del año 2017 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

DR. JOSE GUSTAVO AVILA ZARRAGA
DR. IGNACIO LOPEZ Y CELIS
DR. SERGIO ANDRES ALATORRE SANTAMARIA

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:


MAESTRA EN CIENCIAS (ENERGIA Y MEDIO AMBIENTE)

DE: NADYA IVETTE BIRRICHAGA BONILLA

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

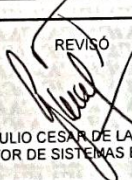
APROBAR

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó a la interesada el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.




NADYA IVETTE BIRRICHAGA BONILLA
ALUMNA

REVISÓ




LIC. JULIO CESAR DE LARA ISASSI
DIRECTOR DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI



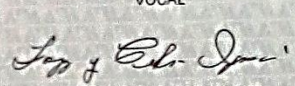
DR. JOSE GILBERTO CORDOBA HERRERA

PRESIDENTE



DR. JOSE GUSTAVO AVILA ZARRAGA

VOCAL



DR. IGNACIO LOPEZ Y CELIS

SECRETARIO



DR. SERGIO ANDRES ALATORRE SANTAMARIA