

## IRAUNKORTASUNA FARMAKOEN SINTESI KIMIKOAN

Erantzun-fitxa

### SINTESI ALTERNATIBOEN ANALISIA

Egileak: 3.TALDEA, EFAVIRENZ

Sara Sudupe

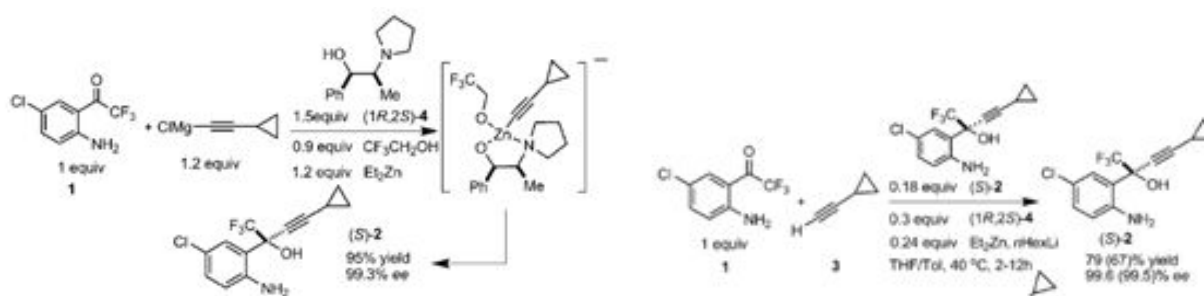
Amaia Gorrotxategi

Ainhoa Aranburu

Ilargi Zipitria

#### Erreakzio(ar)en eskema(k)

#### EFAVIRENZ



#### Analisia egiteko erabili diren tresna eta erraminten definizio laburra

1. CHEMICAL YIELD (ETEKINA): sintesian lortutako produktu kopurua eta erreaktibo kantitatea kontuan hartuz lortu beharko genukeen produktu kantitate teorikoaren arteko erlazioa. Etekinak =  $(\text{masa esperimentalak} / \text{masa teorikoa}) * 100$
2. ENVIRONMENTAL IMPACT FACTOR: sintesiak ingurumenean duen eragina adierazten du, erabilitako substantzia guztien masa kontuan hartuz. **zehaztu gehiago zenolako eragina**
3. ATOM ECONOMY: erreakzioan zehar sortzen diren hondakinei buruzko informazioa ematen digu. Zehazki amaierako produktuan dagoen erreaktibo kopuruaren berri ematen digu.
4. SOLVENT INTENSITY: erabilitako disolbatzaile kopurua hartzen da kontuan, izan ere, onena izango da faktore hau txikia izatea, horrek esan nahi baitu ez dugula disolbatzaile asko erabiltzeko beharrik izan.

## Analisiaren emaitzak (kalkuluak eta komentarioak)

### 1. CHEMICAL YIELD

Hau izango da etekina, ariketak ematen diguna

1. **prozedura:** %95,3
2. **prozedura:** %87

### 2. ENVIRONMENTAL IMPACT FACTOR

Environmental  
impact factor

*E-factor*

$$\frac{\sum m(\text{Input materials}) - m(\text{Product})}{m(\text{Product})}$$

#### 1. prozedura

Input materials-en masa totala: 1614,24g

Produktua: 55.2g

E factor =  $\frac{1614,24\text{g} - 55,2\text{g}}{55,2\text{g}} = 28,24$  1800 g inguru

#### 2. prozedura:

Produktuaren masa lortzeko abiapuntua: 2 mmol erreaktibo (1. konposatua), eta etekina %87 izanik, efavirenzen masa molarra 315 g/mol izanik: 0,55 g produktu izango ditugu.

Input materials-en masa totala: 12,83g

E factor =  $\frac{12,83\text{ g} - 0,55\text{ g}}{0,55\text{g}} = 22,32$

### 3. ATOM ECONOMY

$$AE = \frac{MW(\text{Product}) \times 100}{\sum MW(\text{Raw materials}) + \sum MW(\text{Reagents})}$$

Datuak:

- Mm (efavirenz) = ~~315,67~~ g/mol Zuen prozeduretan lortzen duzuen produktua ez da efavirenz, haren aitzindaria baizik: PM= 289.68
  - Mm(CIF3ONC8H5) = 223,5 g/mol
  - Mm(CIMgC5H5) = 124,5 g/mol
  - Mm (C5H5) = 66g/mol
1. **prozedura:** AE =  $\frac{315,67}{(223,5+124,8)} \times 100 = \%90,63$  %83
  2. **prozedura:** AE =  $\frac{315,67}{(223,5+66)} \times 100 = \%109,04$  %100. Berez emaitza hau gehienez %100 izan beharko litzateke, beraz zerbait ez dugu ondo egin.

### 4. SOLVENT INTENSITY

Solvent intensity SI

$$\frac{\sum m(\text{Solvents})}{m(\text{Product})}$$

### 1. prozeduran

Produktuaren masa 55,2 g da

Disolbatzaileen masa totala=1209,36g

$$SI = 1209,36g/55,2g = 21,9$$

Disolbatzaileen masa kalkulatzeko prozedura:

- Toluenoa: 218ml + 100ml 1,1M. Beraz 218ml dira. Dentsitatea 0,867g/ml izanik, masa 275,98g
- 2,2,2-trifluoroethanol: 19.2g
- Dietilzink: 29.6153g
- THF: 120 ml + 100ml erabili dira, guztira 220 ml. Dentsitatea 0,854 g/ml izanik, masa 409.4g
- Azido zitrikoa: 76.862g
- Ura 200ml, dentsitatea 1g/ml izanik, masa 200g
- Heptanoa 240ml + 50ml. dentsitatea 0,6838g/ml. Beraz, masa 198,302g

### 2. prozedura:

Produktuaren masa 0,55 g

Disolbatzaileen masa totala 9,268g.

$$SI = 9,268/0,55 = 16,85$$

Disolbatzaileen masak kalkulatzeko prozedura:

- Dietil zink 0,528g.
- Azido zitrikoa 3,33g.
- EtOAc 5,41g

### Galderak:

Kalkuluen emaitzak ikusita, zein da metodorik iraunkorrena? Erantzuna argudiatu.

Kalkuluen arabera 2. erreakzioa uste dugu izango dela iraukorrena. Erreakzio hauek kimika berdearen printzipioekin bat datozen ala ez jakiteko, lau parametro ezberdin aztertu ditugu.

Konparaketa egitean, lau parametro horietako 3tan 2.prozedurrak emaitza faboragarriagoak ematen dituela ikusi dugu.

Zergatik da metodo hori faboratua? Zer faktore esperimental dira ezberdintasunaren erantzule?

Guk aztertu ditugun parametroen arabera, aurreko galderan argudiatu bezala, 2. prozedura izango da faboratua.

1. Chemical yield, etekinaren arabera 1. prozedura egokiagoa da, etekina altuagoa baita.
2. Environmental impact factor-en arabera 2. prozedura egokiagoa da, ingurumeneko inpaktua (E factor) baxuagoa delako. **hondakin gutxiago: alkiño sinplea vs alkinoaren magnesiarra**
3. Atom economy-ren arabera, 2. prozedurako balioa handiagoa da, eta hori da onena. Hala ere, emaitza hori ez da fidagarria, %100 baino handiagoa baita. **alkino sinplea vs alkinoaren magnesiarra**
4. Solvent intensity-ren kasuan ere 2. prozedura izango da onena, balio txikiagoa duelako (honek esan nahiko du disolbatzaile gutxiago gastatzen ditugula).

Eraldaketa horien puntu ahulak adierazi eta iraunkortasuna hobetzeko proposamenak egin.

1. prozeduraren puntu ahula E factor eta Solvent Intensity dira, eta 2. prozedurarena etekina, bien arteko konparaketa egiten badugu. Hala ere, saiatu beharko ginatke iraunkortasunerako parametroak ahalik eta onenak izaten, eta agian horretarako beste sintesi modu batzuk bilatu beharko ditugu.

Kimika berdearen 12 printzipioak aintzat hartuta, ba al dira goiko parametroen zerrendan kontuan hartu ez diren beste faktore aproposak prozesu kimiko hauen iraunkortasuna ebaluatzeko? Egokiak al dira aukeratutako parametroak erreakzio kimikoaren iraunkortasunaren ebaluazioa egiteko?

**zuen parametroen bidez neurte ezin dituzuen beste faktoreak?**

Aukeratu ditugun parametroetatik ohartu gara atom economy ez dela oso aproposa izan gure helburua lortzeko, izan ere, emaitzetako bat %100 baino handiagoa denez ez baitigu informazio egokirik ematen. Dena den, nahiz eta guk 4 parametro bakarrik aztertu ditugun, askoz parametro gehiago daude sintesi kimikoen iraunkortasuna aztertzeko: mass productivity, carbon efficiency...

**eta 12 printzipioekin duten erlazioa?**

Txostenaren atal ezberdinentzat utzitako lekuaren tamaina doitu daiteke, baina orrialde kopuru osoa aldatu gabe (gehienez 4 orrialde).