

## AVALIAÇÃO DA “MICROVERDURA” DE SÍNTESES COM A ESTRELA VERDE

Rita C. C. Duarte<sup>a</sup>, Maria Gabriela T. C. Ribeiro<sup>a,\*</sup> e Adélio A. S. C. Machado<sup>b</sup><sup>a</sup>REQUIMTE, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, Rua do Campo Alegre 687, Porto 4169-007, Portugal<sup>b</sup>Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, Rua do Campo Alegre 687, Porto 4169-007, Portugal

## 1. Critérios para a construção da EV

## 2. Síntese do triacetilacetatocobalto(III)

2.1. Protocolos

2.2. Informações para a construção das EV

## 3. Síntese do tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio

3.1. Protocolos

3.2. Informações para a construção das EV

3.3. EV construídas ignorando o produto

## 1. Critérios para a construção da EV

Tabela 1S. Critérios e pontuações para a classificação das substâncias para a construção da EV

| a) Perigos para a saúde humana e o ambiente das substâncias envolvidas |                                                                                                                 |           |
|------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| Perigos                                                                | Símbolos de perigo                                                                                              | Pontuação |
| Saúde                                                                  | C – corrosivo<br>T – tóxico<br>T+ – muito tóxico                                                                | 3         |
|                                                                        | Xn – prejudicial<br>Xi – irritante                                                                              | 2         |
|                                                                        | Sem indicação                                                                                                   | 1         |
| Ambiente                                                               | N – perigoso para o ambiente                                                                                    | 3         |
|                                                                        | Sem indicação                                                                                                   | 1         |
| b) Perigos de acidente das substâncias envolvidas                      |                                                                                                                 |           |
| Perigos                                                                | Símbolos de perigo                                                                                              | Pontuação |
| Saúde                                                                  | C – corrosivo<br>T – tóxico<br>T+ – muito tóxico                                                                | 3         |
|                                                                        | Xn – prejudicial<br>Xi – irritante                                                                              | 2         |
|                                                                        | Sem indicação                                                                                                   | 1         |
| Inflamabilidade                                                        | F – inflamável<br>F+ – extremamente inflamável                                                                  | 3         |
|                                                                        | Sem indicação                                                                                                   | 1         |
| Reatividade                                                            | E – explosivo<br>O – oxidante                                                                                   | 3         |
|                                                                        | Sem indicação                                                                                                   | 1         |
| c) Degradabilidade e renovabilidade das substâncias envolvidas         |                                                                                                                 |           |
| Características                                                        | Critérios                                                                                                       | Pontuação |
| Degradabilidade                                                        | Não degradáveis ou que não possam ser tratados para se obter a sua degradação em produtos de degradação inócuos | 3         |
|                                                                        | Possam ser tratadas para obter degradação com produtos de degradação inócuos                                    | 2         |
|                                                                        | Degradáveis com produtos de degradação inócuos                                                                  | 1         |
| Renovabilidade                                                         | Não renováveis                                                                                                  | 3         |
|                                                                        | Renováveis                                                                                                      | 1         |

\*e-mail: gribeiro@fc.up.pt

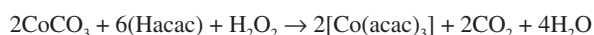
Tabela 2S. Componentes e pontuações para a construção das EV (p = pontuação)

| Princípio da QV                                                         | Critérios                                                                                                                                                                                           | P |
|-------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---|
| P1 – Prevenção                                                          | Todos os resíduos são inócuos (p=1, tabela 1Sa)                                                                                                                                                     | 3 |
|                                                                         | Resíduos que envolvam perigos moderados para a saúde e ambiente (p=2, tabela 1Sa, pelo menos para uma substância, sem substâncias com p=3)                                                          | 2 |
|                                                                         | Formação de pelo menos um resíduo que envolva perigo elevado para a saúde e ambiente (p=3, tabela 1Sa)                                                                                              | 1 |
| P2- Economia atômica                                                    | Reações sem reagentes em excesso ( $\leq 10\%$ ) e sem formação de coprodutos                                                                                                                       | 3 |
|                                                                         | Reações sem reagentes em excesso ( $\leq 10\%$ ) e com formação de coprodutos                                                                                                                       | 2 |
|                                                                         | Reações com reagentes em excesso ( $> 10\%$ ) e sem formação de coprodutos                                                                                                                          | 2 |
|                                                                         | Reações com reagentes em excesso ( $> 10\%$ ) e com formação de coprodutos                                                                                                                          | 1 |
| P3 – Sínteses menos perigosas                                           | Todas as substâncias envolvidas são inócuas (p=1, tabela 1Sa)                                                                                                                                       | 3 |
|                                                                         | As substâncias envolvidas apresentam perigo moderado para a saúde e ambiente (p=2, tabela 1Sa, pelo menos para uma substância, sem substâncias com p=3)                                             | 2 |
|                                                                         | Pelo menos uma das substâncias envolvidas apresenta perigo elevado para a saúde e ambiente (p=3, tabela 1Sa)                                                                                        | 1 |
| P5 – Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | Os solventes e as substâncias auxiliares não existem ou são inócuas (p=1, tabela 1Sa)                                                                                                               | 3 |
|                                                                         | Os solventes e as substâncias auxiliares usadas envolvem perigo moderado para a saúde e ambiente (p=2, tabela 1Sa, pelo menos para uma substância, sem substâncias com p=3)                         | 2 |
|                                                                         | Pelo menos um dos solventes ou uma das substâncias auxiliares usadas envolve perigo elevado para a saúde e ambiente (p=3, tabela 1Sa)                                                               | 1 |
| P6 – Planificação para conseguir eficácia energética                    | Temperatura e pressão ambientais                                                                                                                                                                    | 3 |
|                                                                         | Pressão ambiental e temperatura entre 0 °C e 100 °C que implique arrefecimento ou aquecimento                                                                                                       | 2 |
|                                                                         | Pressão diferente da ambiental e/ou temperatura muito afastada da ambiental                                                                                                                         | 1 |
| P7 – Uso de matérias primas renováveis                                  | Todos os reagentes/matérias-primas/recursos envolvidos são renováveis (p=1, tabela 1Sc)                                                                                                             | 3 |
|                                                                         | Pelo menos um dos reagentes/matérias-primas/recursos envolvidos é renovável, não se considera a água (p=1, tabela 1Sc)                                                                              | 2 |
|                                                                         | Nenhum dos reagentes/matérias-primas/recursos envolvidos é renovável, não se considera a água (p=3, tabela 1Sc)                                                                                     | 1 |
| P8 – Redução de derivatizações                                          | Sem derivatizações ou com uma etapa                                                                                                                                                                 | 3 |
|                                                                         | Usa-se apenas uma derivatização ou duas etapas                                                                                                                                                      | 2 |
|                                                                         | Usam-se várias derivatizações ou mais do que duas etapas                                                                                                                                            | 1 |
| P9 – Catalisadores                                                      | Não se usam catalisadores ou os catalisadores são inócuos (p1, tabela 1Sa)                                                                                                                          | 3 |
|                                                                         | Utilizam-se catalisadores que envolvem perigo moderado para a saúde e ambiente (p=2, tabela 1Sa)                                                                                                    | 2 |
|                                                                         | Utilizam catalisadores que envolvem perigo elevado para a saúde e ambiente (p=3, tabela 1Sa)                                                                                                        | 1 |
| P10 – Planificação para a degradação                                    | Todas as substâncias envolvidas são degradáveis com os produtos de degradação inócuos (p=1, tabela 1Sc)                                                                                             | 3 |
|                                                                         | Todas as substâncias envolvidas que não são degradáveis podem ser tratados para obter a sua degradação com os produtos de degradação inócuos (p=2, tabela 1Sc)                                      | 2 |
|                                                                         | Pelo menos uma das substâncias envolvidas não é degradável nem pode ser tratado para obter a sua degradação com produtos de degradação inócuos (p=3, tabela 1Sc)                                    | 1 |
| P12 – Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | As substâncias envolvidas apresentam perigo baixo de acidente químico (p=1, tabela 1Sb, considerando os perigos físicos e para a saúde)                                                             | 3 |
|                                                                         | As substâncias envolvidas apresentam perigo moderado de acidente químico (p=2, tabela 1Sb, pelo menos para uma substância, sem substâncias com p=3, considerando os perigos físicos e para a saúde) | 2 |
|                                                                         | As substâncias envolvidas apresentam perigo elevado de acidente químico (p=3, tabela 1Sb, considerando os perigos físicos e para a saúde)                                                           | 1 |

## 2. Síntese do triacetilacetatonatocobalto(III)

### 2.1. Protocolos

#### PROTOCOLO A<sup>1</sup>



**Reação.** Num Erlenmeyer de 100 mL, adicionar 2,5 g (21 mmol)

de carbonato de cobalto(II) a 20 mL (194 mmol) de acetilacetona (cerca de 208% de excesso). Aquecer a cerca de 90 °C, com agitação e controlando a temperatura diretamente na reação. De seguida, adicionar gota a gota 30 mL (882 mmol) de uma solução de peróxido de hidrogénio a 10% (cerca de 738% de excesso) durante cerca de 30 min. Entre adições manter o Erlenmeyer coberto com um vidro de relógio. Após terminada a adição, manter a temperatura e agitação durante mais 30 min.

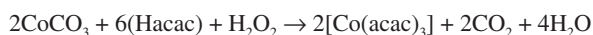
**Isolamento do produto.** Decorrido esse tempo, arrefecer a solução num banho de gelo e sal durante meia hora, filtrar o sólido

verde escuro e secar a 110 °C.

**Purificação.** Dissolver 300 mg do sólido em 10 mL de tolueno aquecido. Decantar a solução escura utilizando um funil de vidro com uma rolha de algodão. Aquecer novamente a solução e adicionar éter de petróleo. Deixar arrefecer até à temperatura ambiente e colocar num banho de gelo até o produto cristalizar. Filtrar o produto, lavar com éter de petróleo gelado e secar.

**Segurança.** Ver perigos associados aos reagentes utilizados na Tabela 3S.

#### PROTOCOLO B<sup>2</sup>



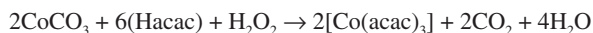
**Reação.** Num Erlenmeyer de 125 mL, aquecer a 90 °C uma mistura de 1,25 g (10,5 mmol) de carbonato de cobalto(II) e 10 mL (97 mmol) de acetilacetona (cerca de 208% de excesso). Adicionar cuidadosamente, gota a gota e com agitação vigorosa, 15 mL (441 mmol) de uma solução de peróxido de hidrogénio a 10% (cerca de 738% de excesso) durante cerca de 15 min, evitando a formação excessiva de bolhas.

**Isolamento do produto.** Arrefecer a mistura num banho de gelo e sal, filtrar os cristais verdes e secar na estufa a 110 °C.

**Purificação.** Dissolver o sólido em tolueno e aquecer a mistura até à ebulição. Filtrar a solução quente e adicionar cerca de 75 mL de éter de petróleo ou heptano. Arrefecer a solução num banho de gelo e sal, filtrar o sólido por sucção e secar ao ar.

**Segurança.** A purificação deve ser realizada na capela (hotte). Ver perigos associados aos reagentes utilizados na Tabela 3S.

#### PROTOCOLO C<sup>3</sup>



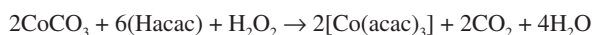
**Reação.** Num Erlenmeyer de 100 mL, colocar 1,25 g (10,5 mmol) de carbonato de cobalto(II) e adicionar 10 mL (97 mmol) de acetilacetona (cerca de 208% de excesso). Aquecer a mistura a cerca de 90 °C, usando um banho de água com agitação constante e controlando a temperatura com um termómetro. De seguida, adicionar gota a gota 15 mL (441 mmol) de uma solução de peróxido de hidrogénio a 10% (cerca de 738% de excesso), mantendo a temperatura a cerca de 90 °C. A adição total da solução de peróxido de hidrogénio deve decorrer durante cerca de 30 min. Entre adições manter o Erlenmeyer coberto com um vidro de relógio. Após terminada a adição, manter a temperatura e agitação durante mais 15 min.

**Isolamento do produto.** Arrefecer a solução num banho de gelo durante 30 min e filtrar por sucção o produto verde escuro. Secar em vácuo por 15 min e, de seguida, secar na estufa a 110 °C.

**Purificação.** Não é prescrita.

**Segurança.** Ver perigos associados aos reagentes utilizados na Tabela 3S.

#### PROTOCOLO D<sup>4</sup>



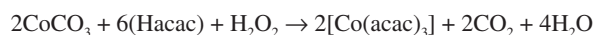
**Reação.** Aquecer uma mistura de 2,5 g (21 mmol) de carbonato de cobalto(II) e 20 mL (194 mmol) de acetilacetona (cerca de 208% de excesso) num banho de vapor a cerca de 85 °C. De seguida, adicionar gota a gota 30 mL (882 mmol) de uma solução de peróxido de hidrogénio a 10% (cerca de 738% de excesso); a mistura fica verde. Quando a efervescência termina, a reação está completa.

**Isolamento do produto.** Arrefecer a solução num banho de gelo e sal e filtrar o sólido por sucção. Lavar o produto com etanol arrefecido e secar a 110 °C durante 15 min.

**Purificação.** Dissolver o produto em 50 mL de tolueno a ferver, filtrar se necessário, e adicionar cerca de 70 mL de heptano. Arrefecer num banho de gelo até o produto precipitar. Filtrar o produto, secar ao ar por alguns minutos e, de seguida, secar na estufa a 110 °C.

**Segurança.** Ver perigos associados aos reagentes utilizados na Tabela 3S.

#### PROTOCOLO E<sup>5</sup>



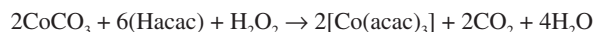
**Reação.** Aquecer uma mistura de 2,5 g (21 mmol) de carbonato de cobalto(II) e 20 mL (194 mmol) de acetilacetona (cerca de 208% de excesso) num banho de vapor a cerca de 85 °C. Adicionar gota a gota 30 mL (882 mmol) de uma solução de peróxido de hidrogénio a 10% (cerca de 738% de excesso); a mistura fica com cor verde. Quando a efervescência termina, a reação está completa.

**Isolamento do produto.** Arrefecer a solução num banho de gelo e sal e filtrar o produto por sucção. Lavar o produto com etanol arrefecido e secar ao ar.

**Purificação.** Dissolver o produto em 50 mL de tolueno a ferver, filtrar se necessário, e adicionar cerca de 70 mL de heptano. Arrefecer num banho de gelo até o produto precipitar. Filtrar o produto e secar ao ar por alguns minutos.

**Segurança.** Ver perigos associados aos reagentes utilizados na Tabela 3S.

#### PROTOCOLO F<sup>6</sup>



**Reação.** Num Erlenmeyer de 125 mL, aquecer entre 90 e 100 °C uma mistura de 5 g (42 mmol) de carbonato de cobalto(II) e 40 mL (388 mmol) de acetilacetona (cerca de 208% de excesso). Agitar rapidamente a mistura enquanto se adiciona gota a gota 60 mL (1,76 mol) de uma solução de peróxido de hidrogénio a 10% (cerca de 738% de excesso). A adição requer cerca de 45 min. O peróxido de hidrogénio deve ser adicionado lentamente, de modo a que a formação de gás não crie espuma.

**Isolamento do produto.** Arrefecer a mistura num banho de gelo e sal, filtrar os cristais e secá-los a 110 °C.

**Purificação.** Dissolver os cristais em 50 mL de benzeno a ferver. Adicionar cerca de 300 mL de heptano ou éter de petróleo e arrefecer a mistura num banho de gelo e sal. Filtrar o produto e secar ao ar.

**Segurança.** Ver perigos associados aos reagentes utilizados na Tabela 3S.

## 2.2. Informações para a construção das EV

**Tabela 3S.** Perigos e pontuações associados às substâncias envolvidas na síntese do triacetilacetatonatocobalto(III)<sup>a</sup>

| Substâncias envolvidas                            | Símbolo de perigo <sup>7</sup> | SH | A | AQ |
|---------------------------------------------------|--------------------------------|----|---|----|
| <b>Reagentes estequiométricos</b>                 |                                |    |   |    |
| Carbonato de cobalto(II) hidratado (CAS 513-79-1) | Xn                             | 2  | 1 | 2  |
| Acetilacetona <sup>c</sup> (CAS 123-54-6)         | Xn                             | 2  | 1 | 2  |
| Peróxido de hidrogénio (CAS 7722-84-1)            | Xn                             | 2  | 1 | 2  |
| <b>Substâncias auxiliares</b>                     |                                |    |   |    |
| <b>Solventes</b>                                  |                                |    |   |    |
| Tolueno (CAS 108-88-3)                            | F; Xn                          | 2  | 1 | 3  |
| Éter de petróleo (CAS 8032-32-4)                  | F; Xn; N                       | 2  | 3 | 3  |
| Etanol (CAS 64-17-5)                              | F                              | 1  | 1 | 3  |
| Heptano (CAS 142-82-5)                            | F; Xn; N                       | 2  | 3 | 3  |
| Benzeno(CAS 71-43-2)                              | F; T                           | 3  | 1 | 3  |
| <b>Produto</b>                                    |                                |    |   |    |
| Triacetilacetatonatocobalto(III) (CAS 21679-46-9) | Xn                             | 2  | 1 | 2  |
| <b>Resíduos</b>                                   |                                |    |   |    |
| Acetilacetona (excesso)                           | Xn                             | 2  | 1 | 2  |
| Peróxido de hidrogénio(excesso)                   | -                              | 1  | 1 | 1  |
| Dióxido de carbono                                | -                              | 1  | 1 | 1  |
| Tolueno                                           | F; Xn                          | 2  | 1 | 3  |
| Éter de petróleo                                  | F; Xn; N                       | 2  | 3 | 3  |
| Etanol                                            | F                              | 1  | 1 | 3  |
| Heptano                                           | F; Xn; N                       | 2  | 3 | 3  |
| Benzeno                                           | F; T                           | 3  | 1 | 3  |
| Água <sup>a,b</sup>                               | -                              | 1  | 1 | 1  |

<sup>a</sup>SH – Saúde Humana; A – Ambiente; AQ – Acidente Químico; Xn – Nocivo; T – Tóxico; N – Perigoso para o ambiente; F – Inflamável.<sup>a</sup>Renováveis; <sup>b</sup>Degradáveis com produtos de degradação inócuos; <sup>c</sup>Degradáveis.

**Tabela 4S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do triacetilacetatonatocobalto(III)<sup>a</sup>, segundo o protocolo A

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                                                                  | Isolamento |                                                | Purificação |                                                | Global |                                                                                      |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|------------------------------------------------|-------------|------------------------------------------------|--------|--------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                                                                       | p          | Explicação                                     | p           | Explicação                                     | p      | Explicação                                                                           |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 2      | Acetilacetona em excesso, Xn                                                                                     | 3          | Sem resíduos                                   | 1           | Éter de petróleo, N                            | 1      | Éter de petróleo, N                                                                  |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Grande excesso de acetilacetona e de peróxido de hidrogénio e formação de coprodutos                             |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Grande excesso de acetilacetona e de peróxido de hidrogénio e formação de coprodutos |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilacetatonatocobalto(III), Xn |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Éter de petróleo, N                                                                  |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 3      | Sem solventes nem substâncias auxiliares                                                                         | 3          | Sem solventes nem substâncias auxiliares       | 1           | Éter de petróleo, N                            | 1      | Éter de petróleo, N                                                                  |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | T ~ 90 °C                                                                                                        | 1          | T ~ 110 °C                                     | 2           | 0 °C < T < 100 °C                              | 1      | T ~ 110 °C                                                                           |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                       | 1          | Substâncias não renováveis                     | 1           | Substâncias não renováveis                     | 1      | Substâncias não renováveis                                                           |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                                                                     |            | NA                                             |             | NA                                             | 2      | Duas etapas                                                                          |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                                                                |            | NA                                             |             | NA                                             | 3      | Sem catalisadores                                                                    |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                                   | 1          | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1           | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                       |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilacetatonatocobalto(III), Xn | 2          | Triacetilacetatonatocobalto(III), Xn           | 1           | Tolueno e éter de petróleo, F                  | 1      | Tolueno e éter de petróleo, F                                                        |

<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

**Tabela 5S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do triacetilacetatonatocobalto(III)<sup>a</sup>, segundo o protocolo B

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                                                                  | Isolamento |                                                | Purificação |                                                | Global |                                                                                      |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|------------------------------------------------|-------------|------------------------------------------------|--------|--------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                                                                       | p          | Explicação                                     | p           | Explicação                                     | p      | Explicação                                                                           |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 2      | Acetilacetona em excesso, Xn                                                                                     | 3          | Sem resíduos                                   | 1           | Éter de petróleo ou heptano, N                 | 1      | Éter de petróleo ou heptano, N                                                       |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Grande excesso de acetilacetona e de peróxido de hidrogénio e formação de coprodutos                             |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Grande excesso de acetilacetona e de peróxido de hidrogénio e formação de coprodutos |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilacetatonatocobalto(III), Xn |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Éter de petróleo, N                                                                  |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 3      | Sem solventes nem substâncias auxiliares                                                                         | 3          | Sem solventes nem substâncias auxiliares       | 1           | Éter de petróleo ou heptano, N                 | 1      | Éter de petróleo ou heptano, N                                                       |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | T ~ 90 °C                                                                                                        | 1          | T ~ 110 °C                                     | 1           | T > 100 °C                                     | 1      | T > 100 °C                                                                           |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                       | 1          | Substâncias não renováveis                     | 1           | Substâncias não renováveis                     | 1      | Substâncias não renováveis                                                           |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                                                                     |            | NA                                             |             | NA                                             | 2      | Duas etapas                                                                          |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                                                                |            | NA                                             |             | NA                                             | 3      | Sem catalisadores                                                                    |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                                   | 1          | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1           | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                       |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilacetatonatocobalto(III), Xn | 2          | Triacetilacetatonatocobalto(III), Xn           | 1           | Tolueno e éter de petróleo ou heptano, F       | 1      | Tolueno e éter de petróleo ou heptano, F                                             |

<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

**Tabela 6S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do triacetilatonatocobalto(III)<sup>a</sup>, segundo o protocolo C

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                                                              | Isolamento |                                                | Global |                                                                                                              |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|------------------------------------------------|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                                                                   | p          | Explicação                                     | p      | Explicação                                                                                                   |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 2      | Acetilacetona em excesso, Xn                                                                                 | 3          | Sem resíduos                                   | 2      | Acetilacetona em excesso, Xn                                                                                 |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Grande excesso de acetilacetona e de peróxido de hidrogénio e formação de coprodutos                         |            | NA                                             | 1      | Grande excesso de acetilacetona e de peróxido de hidrogénio e formação de coprodutos                         |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilatonatocobalto(III), Xn |            | NA                                             | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilatonatocobalto(III), Xn |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 3      | Sem solventes nem substâncias auxiliares                                                                     | 3          | Sem solventes nem substâncias auxiliares       | 3      | Sem solventes nem substâncias auxiliares                                                                     |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | T ~ 90 °C                                                                                                    | 1          | T ~ 110 °C                                     | 1      | T ~ 110 °C                                                                                                   |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                   | 1          | Substâncias não renováveis                     | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                   |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                                                                 |            | NA                                             | 3      | Uma só etapa                                                                                                 |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                                                            |            | NA                                             | 3      | Sem catalisadores                                                                                            |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                               | 1          | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                               |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilatonatocobalto(III), Xn | 2          | Triacetilatonatocobalto(III), Xn               | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilatonatocobalto(III), Xn |

<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

**Tabela 7S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do triacetilacetatonatocobalto(III)<sup>a</sup>, segundo o protocolo D

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                                                                  | Isolamento |                                                | Purificação |                                                | Global |                                                                                      |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|------------------------------------------------|-------------|------------------------------------------------|--------|--------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                                                                       | p          | Explicação                                     | p           | Explicação                                     | p      | Explicação                                                                           |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 2      | Acetilacetona em excesso, Xn                                                                                     | 3          | Etanol                                         | 1           | Heptano, N                                     | 1      | Heptano, N                                                                           |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Grande excesso de acetilacetona e de peróxido de hidrogénio e formação de coprodutos                             |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Grande excesso de acetilacetona e de peróxido de hidrogénio e formação de coprodutos |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilacetatonatocobalto(III), Xn |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Heptano, N                                                                           |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 3      | Sem solventes nem substâncias auxiliares                                                                         | 3          | Etanol                                         | 1           | Heptano, N                                     | 1      | Heptano, N                                                                           |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | T ~ 85 °C                                                                                                        | 1          | T ~ 110 °C                                     | 1           | T ~ 110 °C                                     | 1      | T ~ 110 °C                                                                           |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                       | 1          | Substâncias não renováveis                     | 1           | Substâncias não renováveis                     | 1      | Substâncias não renováveis                                                           |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                                                                     |            | NA                                             |             | NA                                             | 2      | Duas etapas                                                                          |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                                                                |            | NA                                             |             | NA                                             | 3      | Sem catalisadores                                                                    |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                                   | 1          | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1           | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                       |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilacetatonatocobalto(III), Xn | 1          | Etanol, F                                      | 1           | Tolueno e heptano, F                           | 1      | Etanol, tolueno e heptano, F                                                         |

<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

**Tabela 8S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do triacetilacetatonatocobalto(III)<sup>a</sup>, segundo o protocolo E

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                                                                  | Isolamento |                                                | Purificação |                                                | Global |                                                                                      |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|------------------------------------------------|-------------|------------------------------------------------|--------|--------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                                                                       | p          | Explicação                                     | p           | Explicação                                     | p      | Explicação                                                                           |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 2      | Acetilacetona em excesso, Xn                                                                                     | 3          | Etanol                                         | 1           | Heptano, N                                     | 1      | Heptano, N                                                                           |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Grande excesso de acetilacetona e de peróxido de hidrogénio e formação de coprodutos                             |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Grande excesso de acetilacetona e de peróxido de hidrogénio e formação de coprodutos |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilacetatonatocobalto(III), Xn |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Heptano, N                                                                           |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 3      | Sem solventes nem substâncias auxiliares                                                                         | 3          | Etanol                                         | 1           | Heptano, N                                     | 1      | Heptano, N                                                                           |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | T ~ 85 °C                                                                                                        | 2          | Arrefecimento a 0 °C                           | 1           | T > 100 °C                                     | 1      | T > 100 °C                                                                           |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                       | 1          | Substâncias não renováveis                     | 1           | Substâncias não renováveis                     | 1      | Substâncias não renováveis                                                           |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                                                                     |            | NA                                             |             | NA                                             | 2      | Duas etapas                                                                          |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                                                                |            | NA                                             |             | NA                                             | 3      | Sem catalisadores                                                                    |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                                   | 1          | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1           | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                       |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilacetatonatocobalto(III), Xn | 1          | Etanol, F                                      | 1           | Tolueno e heptano, F                           | 1      | Etanol, tolueno e heptano, F                                                         |

<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

**Tabela 9S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do triacetilacetatonatocobalto(III)<sup>a</sup>, segundo o protocolo F

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                                                                  | Isolamento |                                                | Purificação |                                                | Global |                                                                                      |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|------------------------------------------------|-------------|------------------------------------------------|--------|--------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                                                                       | p          | Explicação                                     | p           | Explicação                                     | p      | Explicação                                                                           |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 2      | Acetilacetona em excesso, Xn                                                                                     | 3          | Sem resíduos                                   | 1           | Heptano ou éter de petróleo, N, e benzeno, T   | 1      | Heptano ou éter de petróleo, N, e benzeno, T                                         |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Grande excesso de acetilacetona e de peróxido de hidrogénio e formação de coprodutos                             |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Grande excesso de acetilacetona e de peróxido de hidrogénio e formação de coprodutos |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilacetatonatocobalto(III), Xn |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Heptano, N, e benzeno, T                                                             |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 3      | Sem solventes nem substâncias auxiliares                                                                         | 3          | Sem solventes nem substâncias auxiliares       | 1           | Heptano ou éter de petróleo, N, e benzeno, T   | 1      | Heptano ou éter de petróleo, N, e benzeno, T                                         |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | T ~ 90 °C                                                                                                        | 1          | T ~ 110 °C                                     | 2           | 0 °C < T < 100 °C                              | 1      | T ~ 110 °C                                                                           |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                       | 1          | Substâncias não renováveis                     | 1           | Substâncias não renováveis                     | 1      | Substâncias não renováveis                                                           |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                                                                     |            | NA                                             |             | NA                                             | 2      | Duas etapas                                                                          |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                                                                |            | NA                                             |             | NA                                             | 3      | Sem catalisadores                                                                    |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                                   | 1          | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1           | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                       |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 2      | Carbonato de cobalto(II) hidratado, acetilacetona, peróxido de hidrogénio e triacetilacetatonatocobalto(III), Xn | 2          | Triacetilacetatonatocobalto(III), Xn           | 1           | Heptano ou éter de petróleo, F e benzeno, F, T | 1      | Heptano ou éter de petróleo, F e benzeno, F, T                                       |

<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

### 3. Síntese do tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio

#### 3.1. Protocolos

##### PROTOCOLO A<sup>8</sup>



**Reação.** Num copo Béquer, dissolver 20 g (166 mmol) de hidrogenossulfito de potássio (cerca de 43% de excesso) em 25-30 mL de água desionizada quase a ferver. Preparar uma solução de 2,5 g (29 mmol) de nitrito de potássio em 10 mL de água arrefecida e transferir para uma bureta. Ajustar a temperatura da solução de hidrogenossulfito a 50-60 °C e, agitando continuamente, adicionar lentamente a solução de nitrito da bureta. A temperatura sobe espontaneamente até cerca de 100 °C começando a observar-se a formação de cristais. Uma vez terminada a adição da solução de nitrito, juntar à mistura algumas pastilhas de hidróxido de potássio ou algumas gotas de solução de amoníaco até obter um pH fortemente alcalino e deixar repousar 30 minutos. Transferir o líquido e os cristais para um Erlenmeyer, lavando o conteúdo do copo Béquer com 50 mL de água aquecida. Adicionar à mistura 100 mL de água aquecida, 5 mL de solução de amoníaco e voltar a dissolver o sólido por aquecimento. Arrefecer a solução rapidamente sob água corrente, agitando para estimular a formação de cristais pequenos.

**Isolamento do produto.** Filtrar os cristais em vazio e lavar duas vezes no filtro com solução de amoníaco, previamente arrefecida em gelo.

**Purificação.** Transferir o sólido para um copo Béquer contendo 50 mL de solução diluída de amoníaco arrefecido, agitar e ressuspender os cristais para os lavar. Voltar a filtrar e testar a presença de sulfitos no filtrado (após acidificação) por adição de uma solução diluída de permanganato de potássio. Se ocorrer descoloração, lavar o sólido no filtro com solução diluída de amoníaco arrefecido até que a presença de sulfitos tenha sido eliminada. Lavar os cristais com etanol e, subsequentemente, lavar com acetona e secar numa caixa de Petri à temperatura ambiente.

**Segurança.** Ver perigos associados aos reagentes utilizados na Tabela 10S.

##### PROTOCOLO B<sup>9</sup>



**Reação.** Num copo Béquer, dissolver 40 g (332 mmol) de hidrogenossulfito de potássio (cerca de 43% de excesso) em 50-60 mL de água quase a ferver. Preparar uma solução de 5 g (58 mmol) de nitrito de potássio em 20 mL de água arrefecida e transferir para uma bureta. Ajustar a temperatura da solução de hidrogenossulfito a 50-60 °C e, agitando continuamente, adicionar lentamente a solução de nitrito da bureta. A temperatura sobe espontaneamente até cerca de 100 °C começando a observar-se a formação de cristais. Após a adição da solução de nitrito, juntar à mistura algumas pastilhas de hidróxido de potássio ou algumas gotas de solução concentrada de amoníaco até obter um pH fortemente alcalino e deixar repousar 1 hora. Transferir o líquido e os cristais para um Erlenmeyer de 500 mL, lavando o conteúdo do copo Béquer com 100 mL de água aquecida. Adicionar à mistura 200 mL de água aquecida, alguns mL de solução concentrada de amoníaco e voltar a dissolver o sólido por aquecimento. Arrefecer a solução rapidamente colocando o Erlenmeyer em água corrente, agitando para estimular a formação de cristais pequenos.

**Isolamento do produto.** Filtrar o sólido por sucção e lavar duas vezes no filtro com solução diluída de amoníaco, previamente

arrefecida em gelo.

**Purificação.** Transferir o sólido para um copo Béquer contendo 100 mL de solução diluída de amoníaco arrefecido e misturar completamente os cristais com o líquido. Voltar a filtrar e testar a presença de sulfitos no filtrado (após acidificação) por adição de uma solução diluída de permanganato de potássio. Se ocorrer descoloração, lavar o sólido no filtro com solução diluída de amoníaco arrefecido até que a presença de sulfitos tenha sido eliminada. Lavar os cristais com etanol e, subsequentemente, lavar com acetona e secar à temperatura ambiente.

**Segurança.** Ver perigos associados aos reagentes utilizados na Tabela 10S.

##### PROTOCOLO C<sup>10</sup>



**Reação.** Num copo Béquer, dissolver 20 g (166 mmol) de hidrogenossulfito de potássio (cerca de 43% de excesso) em 25-30 mL de água quase a ferver. Preparar uma solução de 2,5 g (29 mmol) de nitrito de potássio em 10 mL de água arrefecida e transferir para uma bureta. Ajustar a temperatura da solução de hidrogenossulfito a 50-60 °C e, agitando continuamente, adicionar a solução de nitrito da bureta. A temperatura sobe espontaneamente até cerca de 100 °C e formam-se rapidamente cristais. Juntar à mistura alguns mL de solução concentrada de amoníaco até obter um pH fortemente alcalino e deixar repousar 1 hora. Transferir o líquido e os cristais para um Erlenmeyer de 250 mL, lavando o conteúdo do copo Béquer com 50 mL de água aquecida. Adicionar à mistura 100 mL de água aquecida, alguns mL de solução concentrada de amoníaco e voltar a dissolver o sólido por aquecimento. Arrefecer a solução rapidamente em água corrente, agitando para estimular a formação de cristais pequenos.

**Isolamento do produto.** Filtrar os cristais por sucção e lavar duas vezes no filtro com solução diluída de amoníaco, previamente arrefecida em gelo.

**Purificação.** Transferir o sólido para um copo Béquer contendo 50 mL de solução diluída de amoníaco arrefecido e misturar completamente os cristais com o líquido. Filtrar e testar um pouco do filtrado, após acidificação, com solução diluída de permanganato de potássio. Se ocorrer descoloração, lavar o sólido no filtro com mais solução diluída de amoníaco arrefecido até que todos os vestígios de sulfito sejam removidos. Lavar os cristais com etanol e, subsequentemente, lavar com acetona e secar à temperatura ambiente.

**Segurança.** Ver perigos associados aos reagentes utilizados na Tabela 10S.

##### PROTOCOLO D<sup>11</sup>



**Reação.** Juntar, lentamente e com agitação constante, uma solução de 25 g (0,294 mol) de nitrito de potássio em 100 mL de água a uma solução aquecida de hidrogenossulfito de potássio (cerca de 14% de excesso), preparada por saturação de 75 g (1,34 mol) de hidróxido de potássio em 150 mL de água com dióxido de enxofre. Formam-se cristais em forma de agulha. Deixar repousar durante cerca de 1h.

**Isolamento do produto.** Não é prescrito.

**Purificação.** Acrescentar cerca de 1500 mL de água para voltar a dissolver o precipitado, aquecendo. Arrefecer a mistura para precipitar os cristais em forma de agulha. Caso seja necessário, acrescentar algumas pastilhas de hidróxido de potássio para manter a solução alcalina. Filtrar os cristais, lavá-los com água arrefecida, etanol e éter etílico e secá-los num exsiccador a vácuo.

**Segurança.** Ver perigos associados aos reagentes utilizados na Tabela 10S.

### PROTOCOLO E<sup>12</sup>



**Reação.** Juntar, lentamente e com agitação constante, uma solução de 25 g (0,294 mol) de nitrito de potássio em 100 mL de água a uma solução aquecida de hidrogenossulfito de potássio (cerca de 14%

de excesso), preparada por saturação de 75 g (1,34 mol) de hidróxido de potássio em 150 mL de água com dióxido de enxofre. Formam-se cristais em forma de agulha. Deixar repousar durante cerca de 1h.

**Isolamento do produto.** Não é prescrito.

**Purificação.** Recristalizar o produto, utilizando uma solução aquecida de hidróxido de potássio 1 mol L<sup>-1</sup>.

**Segurança.** Ver perigos associados aos reagentes utilizados na Tabela 10S.

### 3.2. Informações para a construção das EV

**Tabela 10S.** Perigos e pontuações associados às substâncias envolvidas na síntese do tri(sulfito-κS)nitrito(3-) de potássio<sup>a</sup>

| Substâncias envolvidas                                 | Símbolo de perigo <sup>7</sup> | SH | A | AQ |
|--------------------------------------------------------|--------------------------------|----|---|----|
| Reagentes estequiométricos                             |                                |    |   |    |
| Nitrito de potássio (CAS 7758-09-0)                    | O, T, N                        | 3  | 3 | 3  |
| Hidrogenossulfito de potássio (CAS 7773-03-7)          | Xi <sup>13</sup>               | 2  | 1 | 2  |
| Hidróxido de potássio (CAS 1310-58-3)                  | C                              | 3  | 1 | 3  |
| Dióxido de enxofre (solução aquosa)                    | Xn                             | 2  | 1 | 2  |
| Substâncias auxiliares                                 |                                |    |   |    |
| Amoníaco (solução aquosa concentrada)                  | C, N                           | 3  | 3 | 3  |
| Amoníaco (solução aquosa)                              | N                              | 1  | 3 | 1  |
| Etanol (CAS 64-17-5)                                   | F                              | 1  | 1 | 3  |
| Acetona (CAS 67-64-1)                                  | F; Xi                          | 2  | 1 | 3  |
| Éter etílico (CAS 60-29-7)                             | F+; Xn                         | 2  | 1 | 3  |
| Água <sup>a,b</sup>                                    | -                              | 1  | 1 | 1  |
| Hidróxido de potássio (CAS 1310-58-3)                  | C                              | 3  | 1 | 3  |
| Permanganato de potássio (solução aquosa) <sup>d</sup> | N                              | 1  | 3 | 1  |
| Produto                                                |                                |    |   |    |
| Tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio diidratado      | Sem dados disponíveis          |    |   |    |
| Resíduos                                               |                                |    |   |    |
| Hidrogenossulfito de potássio diluído (excesso)        | Xi                             | 2  | 1 | 2  |
| Sulfito de potássio (solução aquosa)                   | -                              | 1  | 1 | 1  |
| Amoníaco (solução aquosa)                              | N                              | 1  | 3 | 1  |
| Etanol                                                 | F                              | 1  | 1 | 3  |
| Acetona                                                | F, Xi                          | 2  | 1 | 3  |
| Éter etílico                                           | F+; Xn                         | 2  | 1 | 3  |
| Hidróxido de potássio (solução aquosa)                 | Xi                             | 2  | 1 | 2  |
| Permanganato de potássio (solução aquosa) <sup>d</sup> | N                              | 1  | 3 | 1  |
| Dióxido de enxofre (solução aquosa)                    | Xn                             | 2  | 1 | 2  |
| Água <sup>a,b</sup>                                    | -                              | 1  | 1 | 1  |

<sup>a</sup>SH – Saúde Humana; A – Ambiente; AQ – Acidente Químico; Xn – Nocivo; Xi – Irritante; T – Tóxico; N – Perigoso para o ambiente; F – Inflamável; F+ – Extremamente inflamável; O – Oxidante.

<sup>a</sup> Renováveis; <sup>b</sup> Degradáveis com produtos de degradação inócuos; <sup>c</sup> Degradáveis; <sup>d</sup> Usado como teste e por isso não é considerado na avaliação.

**Tabela 11S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio<sup>a</sup>, segundo os protocolos A e B (considerando máxima perigosidade do produto)

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                                                                                  | Isolamento |                                                | Purificação |                                                             | Global |                                                                                                                                                 |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|------------------------------------------------|-------------|-------------------------------------------------------------|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                                                                                       | p          | Explicação                                     | p           | Explicação                                                  | p      | Explicação                                                                                                                                      |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 1      | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                                                                                                   | 1          | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                 | 1           | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                              | 1      | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                                                                                                                  |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Grande excesso de hidrogenossulfito de potássio e formação de coprodutos                                                         |            | NA                                             |             | NA                                                          | 1      | Grande excesso de hidrogenossulfito de potássio e formação de coprodutos                                                                        |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 1      | Nitrito de potássio, T, N, amoníaco (sol. concentrada), C, N, hidróxido de potássio, C, e tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio |            | NA                                             |             | NA                                                          | 1      | Nitrito de potássio, T, N, amoníaco (sol. concentrada), C, N, hidróxido de potássio, C, e tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio                |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 1      | Amoníaco (sol. concentrada), C, N, e hidróxido de potássio, C                                                                    | 1          | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                 | 1           | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                              | 1      | Amoníaco (sol. concentrada), C, N, hidróxido de potássio, C                                                                                     |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | 0 °C < T < 100 °C                                                                                                                | 2          | Arrefecimento a 0 °C                           | 2           | Arrefecimento a 0 °C                                        | 2      | 0 °C < T < 100 °C                                                                                                                               |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                                       | 1          | Substâncias não renováveis                     | 1           | Substâncias não renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                                                      |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                                                                                     |            | NA                                             |             | NA                                                          | 2      | Duas etapas                                                                                                                                     |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                                                                                |            | NA                                             |             | NA                                                          | 3      | Sem catalisadores                                                                                                                               |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                                                   | 1          | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1           | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos              | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                                                                  |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 1      | Nitrito de potássio, O, amoníaco (sol. concentrada), C, hidróxido de potássio, C, e tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio       | 1          | Tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio         | 1           | Etanol e acetona, F, tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio | 1      | Nitrito de potássio, O, amoníaco (sol. concentrada), C, hidróxido de potássio, C, etanol e acetona, F, e tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio |

<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

**Tabela 12S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do tri(sulfito-κS)nitrito(3-) de potássio<sup>a</sup>, segundo os protocolos A e B (não considerando o produto)

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                                        | Isolamento |                                                | Purificação |                                                | Global |                                                                                                       |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|----------------------------------------------------------------------------------------|------------|------------------------------------------------|-------------|------------------------------------------------|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                                             | p          | Explicação                                     | p           | Explicação                                     | p      | Explicação                                                                                            |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 1      | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                                                         | 1          | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                 | 1           | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                 | 1      | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                                                                        |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Grande excesso de hidrogenossulfito de potássio e formação de coprodutos               |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Grande excesso de hidrogenossulfito de potássio e formação de coprodutos                              |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 1      | Nitrito de potássio, T, N, amoníaco (sol. concentrada), C, N, hidróxido de potássio, C |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Nitrito de potássio, T, N, amoníaco (sol. concentrada), C, N, hidróxido de potássio, C                |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 1      | Amoníaco (sol. concentrada), C, N, e hidróxido de potássio, C                          | 1          | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                 | 1           | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                 | 1      | Amoníaco (sol. concentrada), C, N, hidróxido de potássio, C                                           |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | 0 °C < T < 100 °C                                                                      | 2          | Arrefecimento a 0 °C                           | 2           | Arrefecimento a 0 °C                           | 2      | 0 °C < T < 100 °C                                                                                     |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                             | 1          | Substâncias não renováveis                     | 1           | Substâncias não renováveis                     | 1      | Substâncias não renováveis                                                                            |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                                           |            | NA                                             |             | NA                                             | 2      | Duas etapas                                                                                           |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                                      |            | NA                                             |             | NA                                             | 3      | Sem catalisadores                                                                                     |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                         | 1          | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1           | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                        |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 1      | Nitrito de potássio, O, amoníaco (sol. concentrada), C, hidróxido de potássio, C       | 3          | Substâncias sem perigo de acidente químico     | 1           | Etanol e acetona, F                            | 1      | Nitrito de potássio, O, amoníaco (sol. concentrada), C, hidróxido de potássio, C, etanol e acetona, F |

<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

**Tabela 13S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio<sup>a</sup>, segundo o protocolo C (considerando máxima perigosidade do produto)

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                                                        | Isolamento |                                                | Purificação |                                                             | Global |                                                                                                                       |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|------------------------------------------------|-------------|-------------------------------------------------------------|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                                                             | p          | Explicação                                     | p           | Explicação                                                  | p      | Explicação                                                                                                            |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 1      | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                                                                         | 1          | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                 | 1           | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                              | 1      | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                                                                                        |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Grande excesso de hidrogenossulfito de potássio e formação de coprodutos                               |            | NA                                             |             | NA                                                          | 1      | Grande excesso de hidrogenossulfito de potássio e formação de coprodutos                                              |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 1      | Nitrito de potássio, T, N, amoníaco (sol. concentrada), C, N, e tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio |            | NA                                             |             | NA                                                          | 1      | Nitrito de potássio, T, N, amoníaco (sol. concentrada), C, N, e tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio                |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 1      | Amoníaco (sol. concentrada), C, N                                                                      | 1          | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                 | 1           | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                              | 1      | Amoníaco (sol. concentrada), C, N                                                                                     |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | 0 °C < T < 100 °C                                                                                      | 2          | Arrefecimento a 0 °C                           | 2           | Arrefecimento a 0 °C                                        | 2      | 0 °C < T < 100 °C                                                                                                     |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                                             | 1          | Substâncias não renováveis                     | 1           | Substâncias não renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                            |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                                                           |            | NA                                             |             | NA                                                          | 2      | Duas etapas                                                                                                           |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                                                      |            | NA                                             |             | NA                                                          | 3      | Sem catalisadores                                                                                                     |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                         | 1          | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1           | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos              | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                                        |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 1      | Nitrito de potássio, O, amoníaco (sol. concentrada), C, e tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio       | 1          | Tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio         | 1           | Etanol e acetona, F, tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio | 1      | Nitrito de potássio, O, amoníaco (sol. concentrada), C, etanol e acetona, F, e tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio |

<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

**Tabela 14S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do tri(sulfito-κS)nitrito(3-) de potássio<sup>a</sup>, segundo o protocolo C (não considerando o produto)

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                          | Isolamento |                                                | Purificação |                                                | Global |                                                                             |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|--------------------------------------------------------------------------|------------|------------------------------------------------|-------------|------------------------------------------------|--------|-----------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                               | p          | Explicação                                     | p           | Explicação                                     | p      | Explicação                                                                  |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 1      | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                                           | 1          | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                 | 1           | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                 | 1      | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                                              |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Grande excesso de hidrogenossulfito de potássio e formação de coprodutos |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Grande excesso de hidrogenossulfito de potássio e formação de coprodutos    |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 1      | Nitrito de potássio, T, N, amoníaco (sol. concentrada), C, N             |            | NA                                             |             | NA                                             | 1      | Nitrito de potássio, T, N, amoníaco (sol. concentrada), C, N                |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 1      | Amoníaco (sol. concentrada), C, N                                        | 1          | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                 | 1           | Amoníaco (sol. aq. diluída), N                 | 1      | Amoníaco (sol. concentrada), C, N                                           |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | 0 °C < T < 100 °C                                                        | 2          | Arrefecimento a 0 °C                           | 2           | Arrefecimento a 0 °C                           | 2      | 0 °C < T < 100 °C                                                           |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                               | 1          | Substâncias não renováveis                     | 1           | Substâncias não renováveis                     | 1      | Substâncias não renováveis                                                  |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                             |            | NA                                             |             | NA                                             | 2      | Duas etapas                                                                 |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                        |            | NA                                             |             | NA                                             | 3      | Sem catalisadores                                                           |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                           | 1          | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1           | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                              |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 1      | Nitrito de potássio, O, amoníaco (sol. concentrada), C                   | 3          | Substâncias sem perigo de acidente químico     | 1           | Etanol e acetona, F                            | 1      | Nitrito de potássio, O, amoníaco (sol. concentrada), C, etanol e acetona, F |

<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

**Tabela 15S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio<sup>a</sup>, segundo o protocolo D (considerando máxima perigosidade do produto)

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                                                                      | Purificação |                                                                                                 | Global |                                                                                                                                                |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                                                                           | p           | Explicação                                                                                      | p      | Explicação                                                                                                                                     |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 2      | Hidróxido de potássio, Xi, e dióxido de enxofre, Xn                                                                  | 2           | Éter etílico, Xn, e hidróxido de potássio, Xi                                                   | 2      | Hidróxido de potássio, Xi, dióxido de enxofre, Xn, e éter etílico, Xn                                                                          |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Excesso de hidróxido de potássio e formação de coprodutos                                                            | NA          |                                                                                                 | 1      | Excesso de hidróxido de potássio e formação de coprodutos                                                                                      |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 1      | Nitrito de potássio, T, N, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T, e tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio | NA          |                                                                                                 | 1      | Nitrito de potássio, T, N, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T, e tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio                           |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 3      | Água                                                                                                                 | 1           | Hidróxido de potássio, C                                                                        | 1      | Hidróxido de potássio, C                                                                                                                       |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | T < 100 °C                                                                                                           | 2           | 0 °C < T < 100 °C                                                                               | 2      | 0 °C < T < 100 °C                                                                                                                              |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                           | 1           | Substâncias não renováveis                                                                      | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                                                     |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                                                                         | NA          |                                                                                                 | 3      | Uma só etapa                                                                                                                                   |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                                                                    | NA          |                                                                                                 | 3      | Sem catalisadores                                                                                                                              |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                                       | 1           | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                  | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                                                                 |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 1      | Nitrito de potássio, O, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T, e tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio    | 1           | Hidróxido de potássio, C, etanol, F, éter etílico, F+, e tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio | 1      | Nitrito de potássio, O, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T, etanol, F, éter etílico, F+, e tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio |

<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

**Tabela 16S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio<sup>a</sup>, segundo o protocolo D (não considerando o produto)

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                            | Purificação |                                                       | Global |                                                                                                      |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|----------------------------------------------------------------------------|-------------|-------------------------------------------------------|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                                 | p           | Explicação                                            | p      | Explicação                                                                                           |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 2      | Hidróxido de potássio, Xi, e dióxido de enxofre, Xn                        | 2           | Éter etílico, Xn, e hidróxido de potássio, Xi         | 2      | Hidróxido de potássio, Xi, dióxido de enxofre, Xn, e éter etílico, Xn                                |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Excesso de hidróxido de potássio e formação de coprodutos                  |             | NA                                                    | 1      | Excesso de hidróxido de potássio e formação de coprodutos                                            |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 1      | Nitrito de potássio, T, N, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T |             | NA                                                    | 1      | Nitrito de potássio, T, N, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T                           |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 3      | Água                                                                       | 1           | Hidróxido de potássio, C                              | 1      | Hidróxido de potássio, C                                                                             |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | T < 100 °C                                                                 | 2           | 0 °C < T < 100 °C                                     | 2      | 0 °C < T < 100 °C                                                                                    |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                 | 1           | Substâncias não renováveis                            | 1      | Substâncias não renováveis                                                                           |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                               |             | NA                                                    | 3      | Uma só etapa                                                                                         |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                          |             | NA                                                    | 3      | Sem catalisadores                                                                                    |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                             | 1           | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos        | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                       |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 1      | Nitrito de potássio, O, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T    | 1           | Hidróxido de potássio, C, etanol, F, éter etílico, F+ | 1      | Nitrito de potássio, O, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T, etanol, F, éter etílico, F+ |

<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

**Tabela 17S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do tri(sulfito- $\kappa S$ )nitrato(3-) de potássio<sup>a</sup>, segundo o protocolo E (considerando máxima perigosidade do produto)

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                                                                                | Purificação |                                                                              | Global |                                                                                                                                |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|------------------------------------------------------------------------------|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                                                                                     | p           | Explicação                                                                   | p      | Explicação                                                                                                                     |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 2      | Hidróxido de potássio, Xi, e dióxido de enxofre, Xn                                                                            | 2           | Hidróxido de potássio, Xi                                                    | 2      | Hidróxido de potássio, Xi, dióxido de enxofre, Xn                                                                              |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Excesso de hidróxido de potássio e formação de coprodutos                                                                      | NA          |                                                                              | 1      | Excesso de hidróxido de potássio e formação de coprodutos                                                                      |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 1      | Nitrito de potássio, T, N, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T, e tri(sulfito- $\kappa S$ )nitrato(3-) de potássio | NA          |                                                                              | 1      | Nitrito de potássio, T, N, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T, e tri(sulfito- $\kappa S$ )nitrato(3-) de potássio |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 3      | Água                                                                                                                           | 1           | Hidróxido de potássio, C                                                     | 1      | Hidróxido de potássio, C                                                                                                       |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | T < 100 °C                                                                                                                     | 2           | T < 100 °C                                                                   | 2      | T < 100 °C                                                                                                                     |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                                     | 1           | Substâncias não renováveis                                                   | 1      | Substâncias não renováveis                                                                                                     |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                                                                                   | NA          |                                                                              | 3      | Uma só etapa                                                                                                                   |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                                                                              | NA          |                                                                              | 3      | Sem catalisadores                                                                                                              |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                                                 | 1           | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                               | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                                                                                 |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 1      | Nitrito de potássio, O, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T, e tri(sulfito- $\kappa S$ )nitrato(3-) de potássio    | 1           | Hidróxido de potássio, C, e tri(sulfito- $\kappa S$ )nitrato(3-) de potássio | 1      | Nitrito de potássio, O, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T, e tri(sulfito- $\kappa S$ )nitrato(3-) de potássio    |

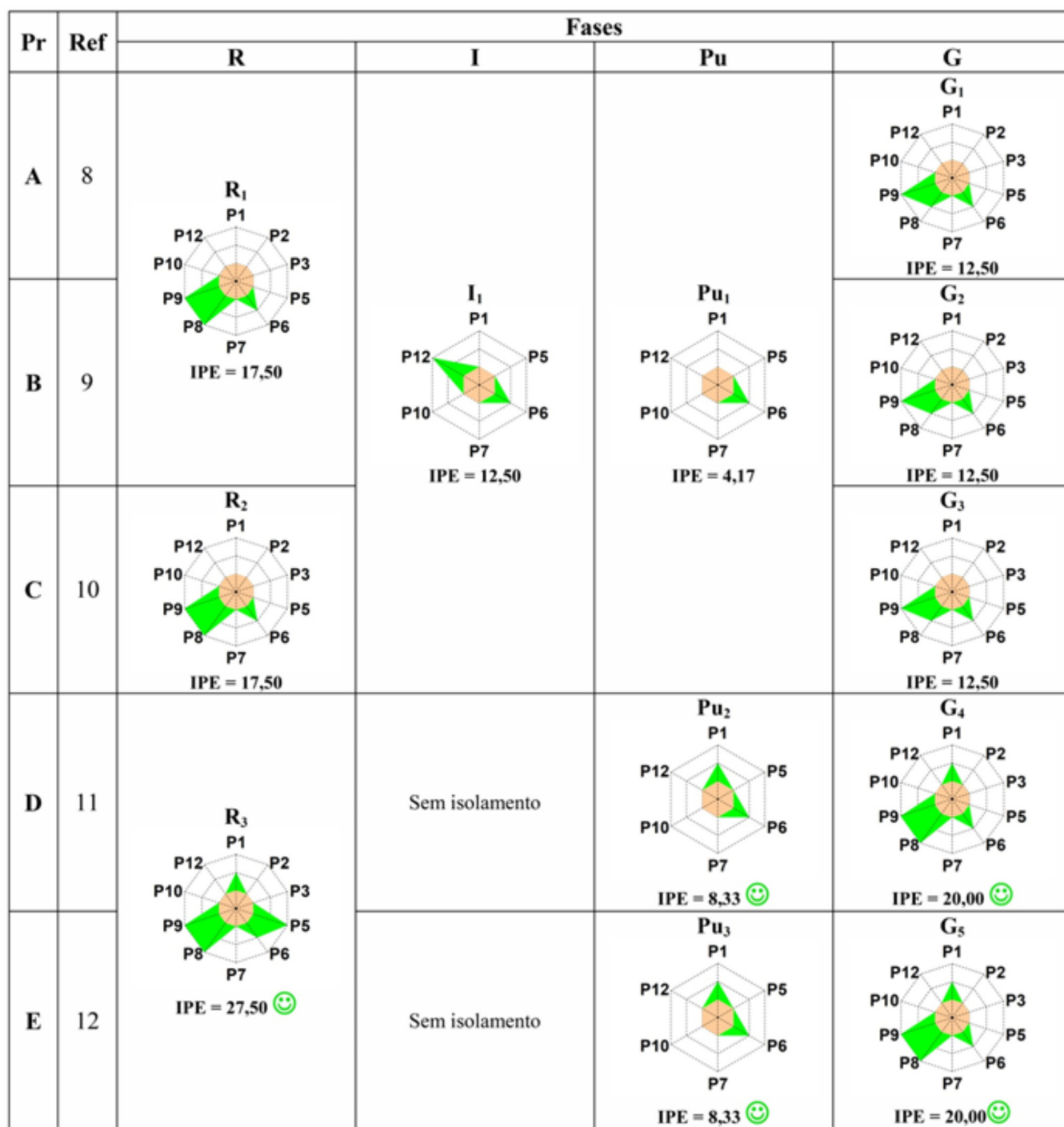
<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

**Tabela 18S.** Componentes e pontuações para construir as EV da síntese do tri(sulfito-κS)nitrato(3-) de potássio<sup>a</sup>, segundo o protocolo E (não considerando o produto)

| Princípios da Química Verde                                                     | Reação |                                                                            | Purificação |                                                | Global |                                                                            |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|----------------------------------------------------------------------------|-------------|------------------------------------------------|--------|----------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                 | p      | Explicação                                                                 | p           | Explicação                                     | p      | Explicação                                                                 |
| <b>P1</b><br>Prevenção                                                          | 2      | Hidróxido de potássio, Xi, e dióxido de enxofre, Xn                        | 2           | Hidróxido de potássio, Xi                      | 2      | Hidróxido de potássio, Xi, dióxido de enxofre, Xn                          |
| <b>P2</b><br>Economia Atômica                                                   | 1      | Excesso de hidróxido de potássio e formação de coprodutos                  |             | NA                                             | 1      | Excesso de hidróxido de potássio e formação de coprodutos                  |
| <b>P3</b><br>Sínteses menos perigosas                                           | 1      | Nitrito de potássio, T, N, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T |             | NA                                             | 1      | Nitrito de potássio, T, N, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T |
| <b>P5</b><br>Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras             | 3      | Água                                                                       | 1           | Hidróxido de potássio, C                       | 1      | Hidróxido de potássio, C                                                   |
| <b>P6</b><br>Planificação para conseguir eficácia energética                    | 2      | T < 100 °C                                                                 | 2           | T < 100 °C                                     | 2      | T < 100 °C                                                                 |
| <b>P7</b><br>Uso de matérias primas renováveis                                  | 1      | Substâncias não renováveis                                                 | 1           | Substâncias não renováveis                     | 1      | Substâncias não renováveis                                                 |
| <b>P8</b><br>Redução de derivatizações                                          | 3      | Uma só etapa                                                               |             | NA                                             | 3      | Uma só etapa                                                               |
| <b>P9</b><br>Catalisadores                                                      | 3      | Sem catalisadores                                                          |             | NA                                             | 3      | Sem catalisadores                                                          |
| <b>P10</b><br>Planificação para a degradação                                    | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                             | 1           | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos | 1      | Substâncias não degradáveis a produtos inócuos                             |
| <b>P12</b><br>Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes | 1      | Nitrito de potássio, O, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T    | 1           | Hidróxido de potássio, C                       | 1      | Nitrito de potássio, O, hidróxido de potássio, C, dióxido de enxofre, T    |

<sup>a</sup>p – Pontuação; NA – Não aplicável.

## 3.3. EV construídas ignorando o produto



**Figura S1.** Comparação entre as EV obtidas para as fases de reação, de isolamento, de purificação e para o processo global nos vários protocolos da síntese do tri(sulfito-κS)nitrito(3-) de potássio não considerando o produto para a avaliação; Pr – Protocolo; R – Reação; I – Isolamento; Pu – Purificação; G – Global; R<sub>p</sub>, I<sub>p</sub>, Pu<sub>p</sub> e G<sub>p</sub> correspondem a diferentes procedimentos encontrados para a reação, isolamento, purificação e processo global, respetivamente; 😊 – Protocolo mais verde

## REFERÊNCIAS

1. <https://woc.uc.pt/quimica/getFile.do?tipo=2&id=1438>, acessada em Maio 2014.
2. <http://www.kimia.um.edu.my/images/kimia/lab%20manual/level%202/Lab%20Manual%20Yr%202%20Inorganic.pdf>, acessada em Maio 2014.
3. Glidewell, C.; *Inorganic Experiments*, 2<sup>nd</sup> ed., Wiley-VCH: Weinheim, 2003.
4. Shalhoub, G. M.; *J. Chem. Educ.* **1980**, 57, 525.
5. [www.orgchem.science.ru.nl/molmat/mm-web/srm4.doc](http://www.orgchem.science.ru.nl/molmat/mm-web/srm4.doc), acessada em Abril 2011 (em Outubro 2013 verificou-se que já não estava disponível).
6. Bryant, B. E.; Fernelius, W. C. Em *Inorganic Syntheses – Volume V*; Bryant, B. E.; Fernelius, W. C.; Moeller, T., eds.; McGraw-Hill Book Company, Inc: New York, 1957.
7. <http://www.sigmaaldrich.com/safety-center.html>, acessada em Maio 2014.
8. Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, fornecido pela docente da disciplina.
9. Palmer, W. G.; *Experimental Inorganic Chemistry*, Cambridge University Press: London, 1965.
10. Adams, D. M.; Raynor, J. B.; *Advanced Practical Inorganic Chemistry*, John Wiley & Sons, Ltd: London, 1965.
11. Sisler, H.; Audrieth, L. F.; *J. Am. Chem. Soc.* **1938**, 60, 1947.
12. Hall, J. R.; Johnson, R. A.; *Phosphorus Sulfur Relat. Elem.* **1977**, 3, 175.
13. <http://www.enartis.com/schede/sicurezza/Potassium%20Bisulphite%20Sol%20Eng.pdf>, acessada em Maio 2014.