



Dr. Yoarhy A. Amador Sánchez
yoarhy@xanum.uam.mx



Química Verde en Síntesis Orgánica

Introducción: ¿Por qué buscar nuevas formas de hacer reacciones?

Durante décadas, la síntesis orgánica se ha basado principalmente en: calentamiento por reflujo uso de grandes volúmenes de solventes tiempos de reacción largos procesos de purificación complejos Estos enfoques presentan varios problemas:

Problemas de la síntesis tradicional Impacto ambiental

- Gran generación de residuos
- Uso de solventes tóxicos
- Emisiones contaminantes

Ineficiencia energética

- Reacciones que requieren calentamiento prolongado
- Alto consumo de energía

Limitaciones sintéticas

- Bajas velocidades de reacción
- Formación de subproductos
- Baja selectividad



Surgimiento de la química verde

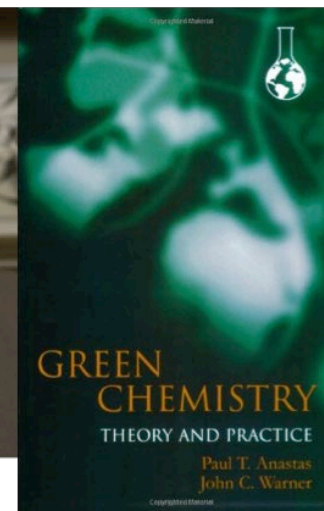
La disciplina de la Química Verde busca diseñar procesos químicos que reduzcan o eliminen sustancias peligrosas. Fue formalizada en 1998 por:

- Paul Anastas
- John C. Warner

Ellos propusieron los **12 principios de la química verde**



Paul Anastas



John Warner



<https://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/gc#!recentarticles&adv>



Los 12 principios de la química verde

1. Prevención de residuos

La síntesis química debe diseñarse para minimizar los subproductos y desechos.

2. Economía atómica

Los métodos sintéticos deben diseñarse para incorporar el mayor porcentaje posible de los átomos de los reactivos en el producto final. Se busca evitar la pérdida de átomos en subproductos.

3. Síntesis químicas menos peligrosas

Siempre que sea posible, los métodos sintéticos deben usar y generar sustancias con baja toxicidad para humanos y medio ambiente.

3. Síntesis químicas menos peligrosas

Siempre que sea posible, los métodos sintéticos deben usar y generar sustancias con baja toxicidad para humanos y medio ambiente.

4. Diseño de productos químicos más seguros

Los productos químicos deben diseñarse para cumplir su función deseada con mínima toxicidad.

5. Uso de solventes y auxiliares más seguros

El uso de solventes, agentes de separación y otras sustancias auxiliares debe: evitarse cuando sea posible o emplear sustancias inocuas.



Los 12 principios de la química verde

6. Eficiencia energética

Los requerimientos energéticos deben reducirse al mínimo.

Idealmente las reacciones deberían realizarse: a temperatura ambiente y a presión atmosférica.

7. Uso de materias primas renovables

Las materias primas deben provenir de fuentes renovables siempre que sea posible. Ejemplos: biomasa, azúcares, aceites vegetales.

8. Reducción de derivados

Se deben evitar pasos innecesarios como: protección y desprotección modificaciones temporales de grupos funcionales.

9. Catálisis

Los catalizadores son preferibles a los reactivos estequiométricos.

10. Diseño para degradación

Los productos químicos deben diseñarse para que se degraden en el ambiente en sustancias inocuas una vez que hayan cumplido su función.

11. Análisis en tiempo real para prevenir contaminación

Se deben desarrollar métodos analíticos que permitan monitorear las reacciones en tiempo real.

12. Química intrínsecamente más segura

Los procesos químicos deben diseñarse para minimizar el riesgo de accidentes.

Las microondas aplicadas en química verde

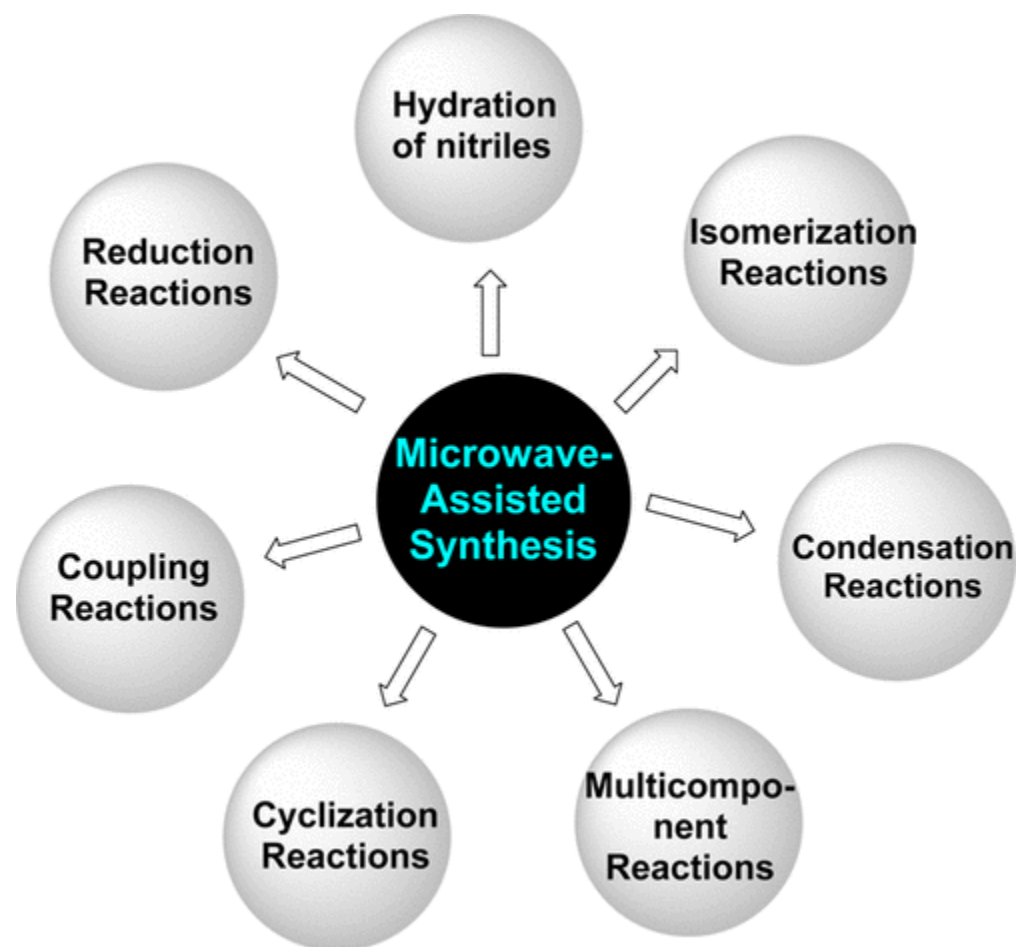
Reacciones asistidas por microondas

Las reacciones asistidas por microondas consisten en utilizar radiación electromagnética en la región de microondas para calentar directamente la mezcla de reacción.

Las microondas corresponden a radiación con frecuencias entre:

300 MHz – 300 GHz

Acc. Chem. Res. **2014**, 47, 4, 1338–1348



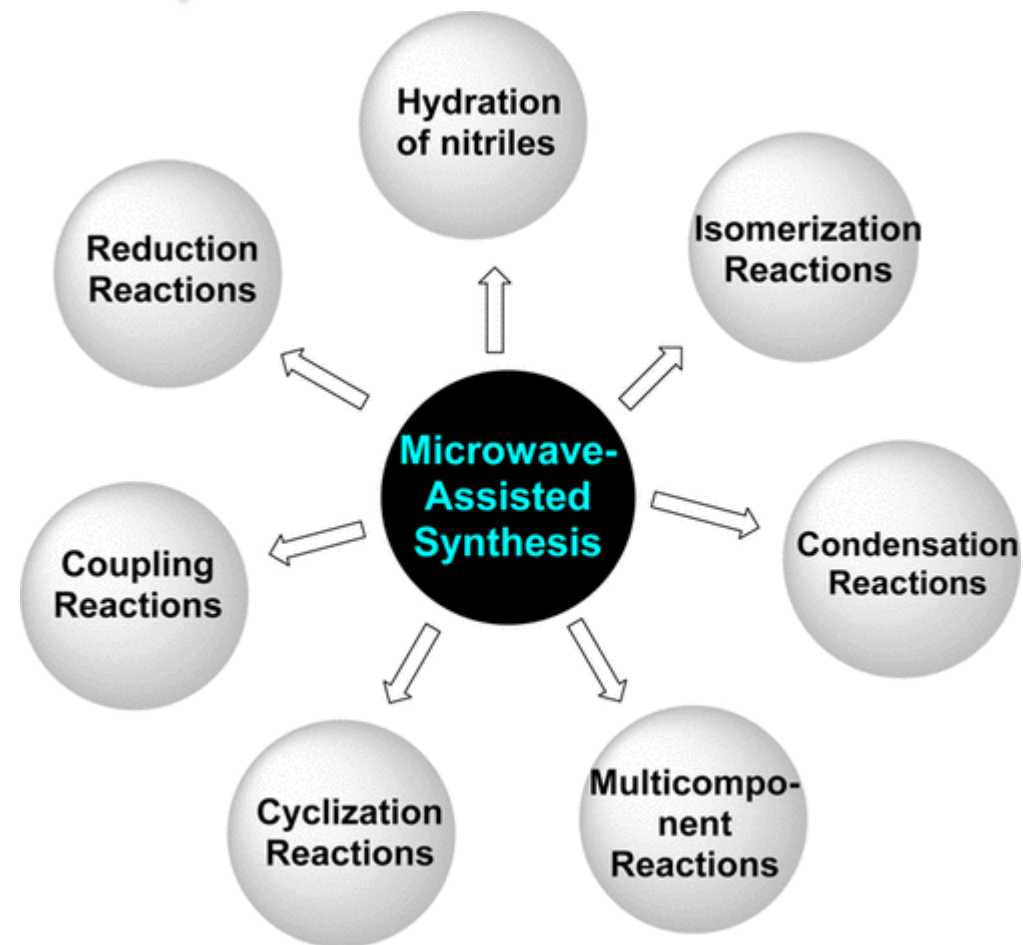
Las microondas aplicadas en química verde

Reacciones asistidas por microondas

Sin embargo, los reactores de laboratorio normalmente operan a:

2.45 GHz, la misma frecuencia que utilizan los hornos domésticos.

En síntesis química, esta radiación se utiliza para acelerar reacciones químicas mediante calentamiento rápido y eficiente.



Las microondas aplicadas en química verde

Fundamento físico del calentamiento por microondas

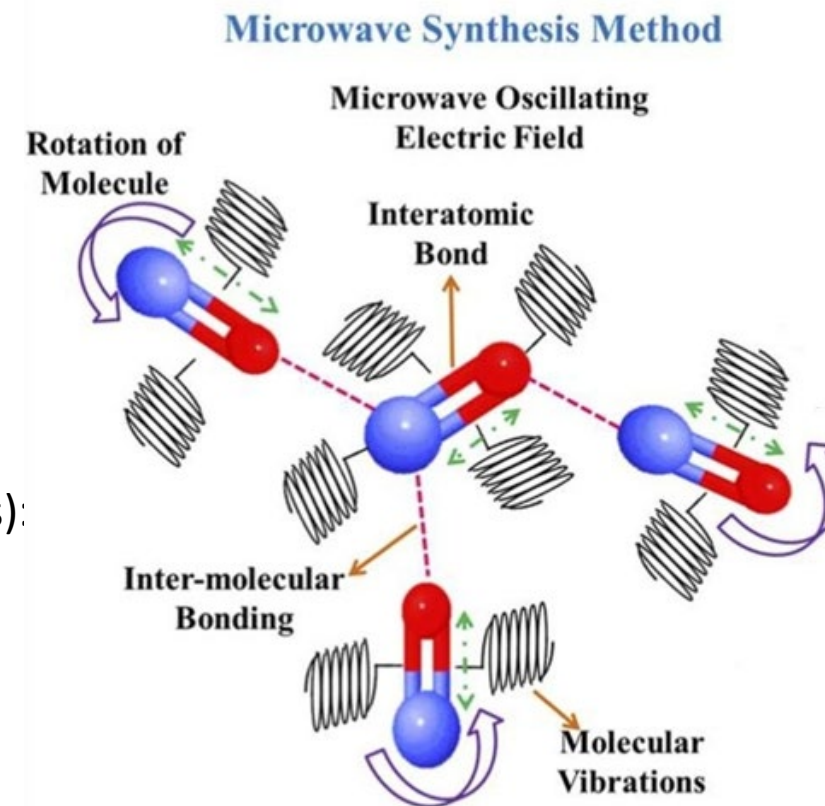
A diferencia del calentamiento convencional, las microondas no calientan el recipiente primero, sino las moléculas directamente.

Polarización dipolar

Las moléculas polares poseen momentos dipolares.

Cuando se aplica un campo eléctrico alternante (como el de las microondas): las moléculas intentan alinearse con el campo, debido a que el campo cambia millones de veces por segundo, las moléculas rotan continuamente generando fricción molecular, disipación de energía y generación de calor.

Este fenómeno es especialmente eficiente en solventes polares como:
 Agua, metanol, etanol, DMF, DMSO





Las microondas aplicadas en química verde

La capacidad de un solvente o material específico para convertir la energía de microondas (MW) en calor está determinada por el llamado **factor de pérdida dieléctrica** o **tangente de pérdida ($\tan \delta$)**.

Cuanto mayor es el valor de **$\tan \delta$** , mejor es el solvente para **absorber microondas y generar un calentamiento eficiente**

Los solventes utilizados en química asistida por microondas se clasifican en tres categorías según su capacidad de absorción de microondas:

Alta absorción: $\tan \delta > 0.5$

Absorción media: $0.1 < \tan \delta < 0.5$

Baja absorción: $\tan \delta < 0.1$

Las microondas aplicadas en química verde

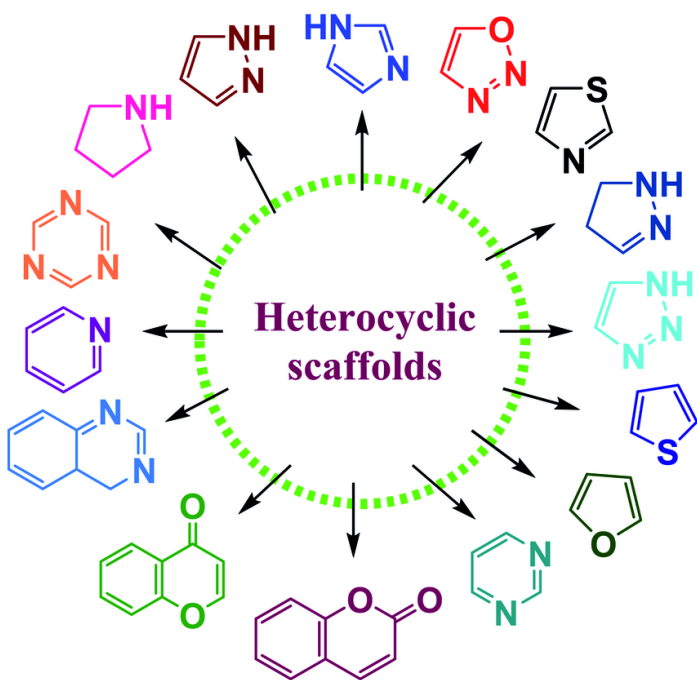
Table 1. Loss Tangents of Frequently Used Solvents in Microwave-Assisted Reactions (2.45 GHz, 20 °C) (25)

solvent	tan δ	solvent	tan δ
ethylene glycol (EG)	1.350	1,2-dichloroethane	0.127
ethanol	0.941	water	0.123
dimethyl sulfoxide (DMSO)	0.825	chloroform	0.091
methanol	0.659	acetonitrile	0.062
1,2-dichlorobenzene	0.280	tetrahydrofuran	0.047
<i>N</i> -methyl-2-pyrrolidone (NMP)	0.275	dichloromethane	0.042
acetic acid	0.174	toluene	0.040
dimethylformamide (DMF)	0.161	hexane	0.020

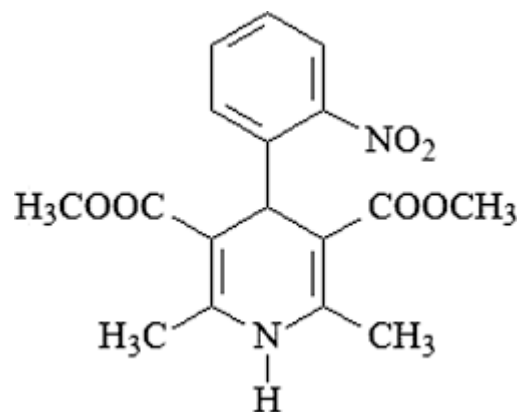
Las microondas aplicadas en química verde

Aplicaciones en síntesis orgánica

Síntesis de heterociclos



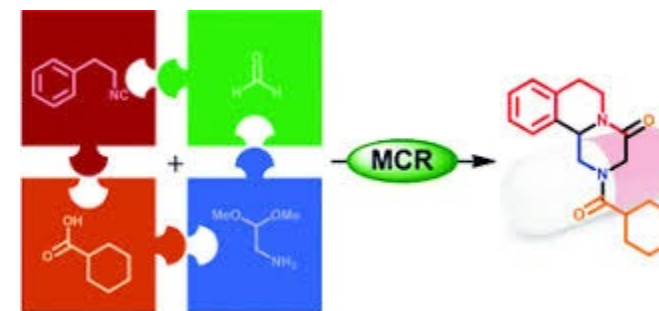
Síntesis de compuestos farmacéuticos



Nifedipina

Antihipertensivo

Reacciones multicomponente



Limitaciones

- no todos los solventes absorben microondas
- algunos reactivos son poco polares
- equipos especializados pueden ser costosos