

Kimyasal tepkimeler için göstergeler



<http://www.oc-praktikum.de>

Basit göstergeler

Yapay organik kimyada saflık ve verim, kimyasal bir dönüşümün değerini(niteliğini) tanımlayan ortak dizinlerdir. Y verim, ürünün asıl miktarının katsayısının,(gerçek verim) tepkiden elde ettiği gibi tanımlandığı hasılat, ve kuramsal olarak elde edilen ürünün miktarı eğer toplam sınırlayıcı madde R sitokiyometrik denklemlere göre (kuramsal ve sitokiyometrik verim) dönüştürülmüşse, tabii ki maddenin saflığının % 100 olduğunu varsayarak.

Eğer n_K tepkimeden önce sınırlayıcı madde miktarı ve a_P ve a_K ürünün stokiyometrik sabitleri P ve R sınırlayıcı maddeyse , verim aşağıda verildiği gibidir

$$Y = \frac{n_P a_R}{n_R a_P} \quad (1)$$

Eğer n_P saflaştırmadan sonraki miktarsa, bu son verim olarak adlandırılır. Genellikle bu denklemle tanımlanan verim bir yüzde olarak ifade edilir. (verimin yüzdesi ya da yüzde verim).

Gerçekte tepkimeyi gerçekleştirmeden önce, bir kişi, daha önceden bahsedilen atom korunumunu sitokiyometrik denklemden türetebilir. Atom korunumu, üründe bulunan ve denklemin sol tarafında toplanan atom kütlelerinin oranı olarak ifade edilir. Bu tanımın sonucu olarak, korunum, bakış açısı bakımından değerlendirilen yapay bir yaklaşım tarzıdır. Atom korunumu düşüncesi, B.M. Trost in 1995 [1] tarafından ortaya atıldı.

Ürünün saflığı, (TLC) ince tabaka renkseyicisi (ince katman renk yazımı, kromatografi), (GC) gaz kromatografisi ya da sıvı kromatografisi ile belirlenir ve yüzde olarak ifade edilir. Yine de her çözümlenici (analitik) düzeneğin kendi sınırlamalarının olması, vurgulanması gereken ayrı bir konudur. Örneğin, gaz kromatografisinde 250 °C'nin üzerinde ayrışmadan buharlaşan maddeler incelenebilir.

Elde edilen kütle oranları ve saflaştırılmış ürün m_P bölü deney sırasında tepkime karışımına katılan tüm maddelerin toplam kütlesi olarak tanımladığımız bir tepkimenin kütle verimliliği :

$$e_S = \frac{m_P}{\sum_i m_i} \quad (2)$$

Burada dizin i tüm kullanılan maddeler üzerinde çalışır. Tepkime ortamıyla karışmayacak soğutucu su veya buz gibi soğutucular bizim koşulumuzda göz önüne alınmazlar. Böyle maddeler için hesaplamalar daha ayrıntılı yöntemler içeren veri incelemelerinin işidir.

Burada tanımlandığı gibi kütle verimliliği e_S , E etkeni (Çevresel etken)'nin tersine 1994 yılında R. Sheldon [2] tarafından ortaya atıldığı gibi benzerdir. Biz, bir verimlilik dizinini öyle kullanıyoruz ki daha yüksek bir değer, gerçekte, bir geliştirmeyi gösterir.

Bir tepkimenin enerji verimliliği kıyaslama üzerine tanımlanır, tıpkı elde edilen kütle oranının ve saflaştırılan ürünün m_P deney sırasında toplam tüketilen enerji miktarına oranındaki gibi:

$$e_E = \frac{m_P}{\sum_k E_k} \quad (3)$$

Dizinler, buradaki bütünüyle ayrı olarak ölçülebilir enerji tüketimlerinin üzerinde yürür, örneğin genelde tüketilen elektrik enerjisi. Bu ölçüme, soğutma amacıyla buz üretmek için kullanılan enerji dahildir. Bu tür enerji katkılarının ölçümü için önemli ipuçları Alman NOP makalesinde sunulmuştur.

Energiemessung - Energiekennzahlen.

Atom korunumu, kütle verimliliği ve enerji verimliliği, NOP deneyleri için kendiliğinden hesaplanır ve bu değerler her deneyin sayfasındaki "Değerlendirme" girişi ve "Dizinler" alt seçenek dizelgesi girişi altında bulunabilir.

([Example link](#)).

Organik üretim için çevresel değerlendirme aracı (EATOS)

Kimyasal (çok basamaklı tepkimeleri içeren) tepkimenin değerlendirmesini temel alan bir madde organik üretim için çevresel değerlendirme aracı kullanılarak yürütülebilir tepkimeler (EATOS, [Website EATOS](#)) [3].

Bu yaklaşım (Cf. above) Sheldons E etkenini temel alır, örneğin bir tepkimeye giren toplam madde miktarı elde edilen ürünle ilgilidir.

Kullanılan maddelerden herbiri için MAK (Almanya'daki en yüksek işyeri yoğunluğu) değerlerinden tehlike işaretlerinden, R-sözcük topluluklarından (cf. NOP article [R- und S-Sätze](#)), LD₅₀ değerlerinden ve LC₅₀ değerlerinden türetilen yük etkeni Q tanımlanır, fakat seçeneğe bağlı olarak kullanıcının değerlendirme odağına da bağlı olarak yapılır. Çoğunlukla değişik yapay yollar ve uygulama yöntemlerinin karşılaştırmalı değerlendirmesinde kullanılan Çevresel Dizin ÇD, kendi Q etkenleri ile çarpılan tüm madde kütlelerinin toplamı olarak hesaplanır.

Bu değerlendirme düşüncesi, serbestçe elde edilebilen ve özgür bir yazılım tabanında yerine getirildi. Bu uygulama, hem de atom korunumunu ve Sheldon'un E etkenini, girilen tepkime değerleri için hesaplar.

EATOS değerlendirme yaklaşımının kısa bir açıklamasını **experiment 4010**'nın karşılaştırmasına bir başvuru olarak NOP makalesindeki yeni bir yöntemle birlikte bulabilirsin. "**Bewertung der umweltverträglichkeit von chemischen Reaktionen**". Bunun yanında bir Almanca el kitabı (**Bedienungs- und Benutzungsanleitung für EATOS**) da öneriyoruz.

References

- [1] B. M Trost. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl*, 34:259 – 281, 1995.
- [2] R. Sheldon. *Chemtech*, 24(3):38 – 47, 1994.
- [3] M. Eissen and J. O. Metzger. Environmental performance metrics for daily use in synthetic chemistry. *Chem. Eur. J.*, 8(16):3580 – 3585, 2002.

update April 28, 2008