

“QUÍMICA VERDE,
PRINCIPIO POR PRINCIPIO”
PE209919-PAPIME



MÉTRICA VERDE, PRINCIPIO POR PRINCIPIO



Dr. Joel Omar Martínez





ESCALA

	10	Totalmente verde
	9	Gran acercamiento verde
	8	Muy buen acercamiento verde
	7	Buen acercamiento verde
	6	Ligero acercamiento verde
	5	Transición café a verde
	4	Ligeramente café
	3	Medianamente café
	2	Muy café
	1	Totalmente café



PRINCIPIOS

- 1.- Prevención
- 2.- Economía atómica
- 3.- Síntesis químicas menos peligrosas
- 4.- Diseño de químicos seguros
- 5.- Uso de disolventes seguros o auxiliares
- 6.- Diseño de la eficiencia energética
- 7.- Uso de materia prima renovable
- 8.- Reducir derivados
- 9.- Catálisis
- 10.- Diseñar sustancias biodegradables
- 11.- Análisis en tiempo real para prevenir la contaminación
- 12.- Químicos seguros para prevenir accidentes

Estado del Arte

SciFinder (2020-2002)

160 referencias que contienen el concepto “Green Chemistry Metrics”

Artículos 122

Simposios, Conferencias 23
1(2020), 2(2019), 3(2018),
4(2017), 1(2016), 5(2015),
1(2013), 4(2012), 1(2006), 1(2005)

Capítulos de Libro 10
2(2018), 1(2015), 1(2014),
1(2013), 1(2012), 1(2010), 3(2009)

Patentes 1 (2011)

**Sin relación 4 1(2019), 1(2014),
1(2011), 1(2008)**

Idiomas
Polaco 1
Portugués 4
Japonés 1
Inglés 153





1) So you think your process is green, how do you know?-Using principles of sustainability to determine what is green-a corporate perspective.

Curzons A.D., Constable D.J.C., Mortimer D.N., Cunningham V.L. *Green Chem.* 2001, 3, 1-6.

2) Green chemistry measures for process research and development.

Constable D.J.C., Curzons A.D., Freitas dos Santos L.M., Geen G.R., Hannah R.E., Hayler J.D., Kitteringham J., McGuire M.A., Richardson J.E., Smith P., Webb R.I., Yu M. *Green Chem.* 2001, 3, 7-9.

3) On inventing reactions for atom economy.

Trost B.M. *Acc. Chem. Res.* 2002, 35, 695-705.

4) Metrics to “green” chemistry-which are the best?

Constable D.J.C., Curzons A.D., Cunningham V.L. *Green Chem.* 2002, 4, 521-527.



5) On the use of “green” metrics in the undergraduate organic chemistry lecture and lab to assess the mass efficiency of organic reactions.

Andraos J., Sayed M. *J. Chem. Educ.* 2007, 84, 1004-1010.

6) “Green star”: a holistic green chemistry metric for evaluation of teaching laboratory experiments.

Ribeiro M.G.T.C., Costa & Adeilo D.A., Machado A.S.C. *Green Chem. Lett. Rev.* 2010, 3, 149-159.

7) Determination of the global material economy (GME) of synthesis sequences-a green chemistry metric to evaluate the greenness of products.

Augé J., Scherrmann M-C. *New J. Chem.* 2012, 36, 1091-1098.

8) Holistic metrics for assessment of the greenness of chemical reactions in the context of chemical education.

Ribeiro M.G.T.C., Costa & Adeilo D.A., Machado A.S.C. *J. Chem. Educ.* 2013, 90, 432-439.

9) Simplified application of material efficiency green metrics to synthesis plans: pedagogical case studies selected from organic synthesis.

Andraos J. *J. Chem. Educ.* 2015, 92, 1820-1830.

10) Exploring green chemistry metrics with interlocking building block molecular models.

Hudson R., Leaman D., Kawamura K.E., Esdale K.N., Glaisher S., Bishop A., Katz J.L. *J. Chem. Educ.* 2016, 93, 691-694.

11) Reaction scale and green chemistry: microscale or macroscale, which is greener?

Duarte R.C.C. *J. Chem. Educ.* 2017, 94, 1255-1264.

Empleo de hojas de cálculo/programas

1) On the use of “green” metrics in the undergraduate organic chemistry lecture and lab to assess the mass efficiency of organic reactions.

Andraos J., Sayed M. *J. Chem. Educ.* 2007, 84, 1004-1010.

2) A methodology for evaluation and selection of nanoparticle manufacturing processes based on sustainability metrics.

Naidu S., Sawhney R., Li X. *Environ. Sci. Technol.* 2008, 42, 6697-6702.

3) “Green star”: a holistic green chemistry metric for evaluation of teaching laboratory experiments.

Ribeiro M.G.T.C., Costa & Adeilo D.A., Machado A.S.C. *Green Chem. Lett. Rev.* 2010, 3, 149-159.



Empleo de hojas de cálculo/programas

4) Inclusion of environmental impact parameters in radial pentagon material efficiency metrics analysis: using bening indices as a step towards a complete assessment of “greenness” for chemical reactions and synthesis plans.

Andraos J. *Org. Process Res. Dev.* 2012, 16, 1482-1506.

5) Reaction scale and green chemistry: microscale or macroscale, which is greener?

Duarte R.C.C. *J. Chem. Educ.* 2017, 94, 1255-1264.

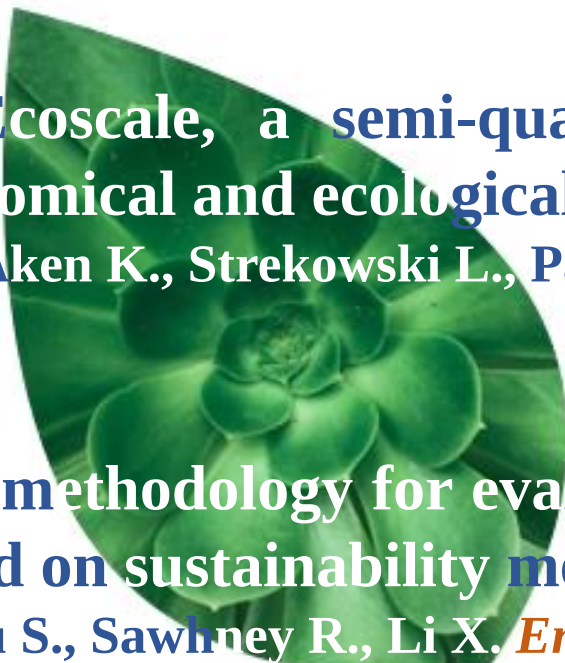
6) Better metrics for “sustainable by design”: toward an *in silico* green toxicology for green(er) chemistry.

Maertens A. Plugge H. *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2018, 6, 1999-2003.

7) AGREE-analytical greenness metric approach and software.

Pena-Pereira F., Wojnowski W., Tobiszewski M. *Anal. Chem.* 2020, 92, 10076-10082.

Consideraciones Ambientales/Seguridad



1) **Ecoscale**, a semi-quantitative tool to select an organic preparation based on economical and ecological parameters.

Van Aken K., Strekowski L., Patiny L. *Beilstein J. Org. Chem.* 2006, 2, 1-7.

2) A methodology for evaluation and selection of nanoparticle manufacturing processes based on sustainability metrics.

Naidu S., Sawhney R., Li X. *Environ. Sci. Technol.* 2008, 42, 6697-6702.



3) **“Green star”**: a holistic green chemistry metric for evaluation of teaching laboratory experiments.

Ribeiro M.G.T.C., Costa & Adeilo D.A., Machado A.S.C. *Green Chem. Lett. Rev.* 2010, 3, 149-159.



Consideraciones Ambientales/Seguridad

4) Inclusion of environmental impact parameters in radial pentagon material efficiency metrics analysis: using benign indices as a step towards a complete assessment of “greenness” for chemical reactions and synthesis plans.

Andraos J. *Org. Process Res. Dev.* 2012, 16, 1482-1506.

5) Choosing the greenest synthesis: a multivariate metric green chemistry exercise.

Mercer S.M., Andraos J., Jessop P.G. *J. Chem. Educ.* 2012, 89, 215-220.

6) Safety/hazard indices: completion of a unified suite of metrics for the assessment of “greenness” for chemical reactions and synthesis plans.

Andraos J. *Org. Process Res. Dev.* 2013, 17, 175-192.

Consideraciones Ambientales/Seguridad

7) Assessing the greenness of the chemical reactions in the laboratory using updated holistic graphic metrics based on the globally harmonized system of classification and labeling of chemicals.

Ribeiro M.G.T.C., Yunes S.F., Machado A.S.C. *J. Chem. Educ.* 2014, 91, 1901-1908.

8) Using green star metrics to optimize the greenness of literature protocols for synthesis.

Duarte R.C.C., Ribeiro M.G.T.C., Machado A.S.C. *J. Chem. Educ.* 2015, 92, 1024-1034.

9) Critical evaluation of published algorithms for determining environmental and hazard impact green metrics of chemical reactions and synthesis plans.

Andraos J. *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2016, 4, 1934-1945.

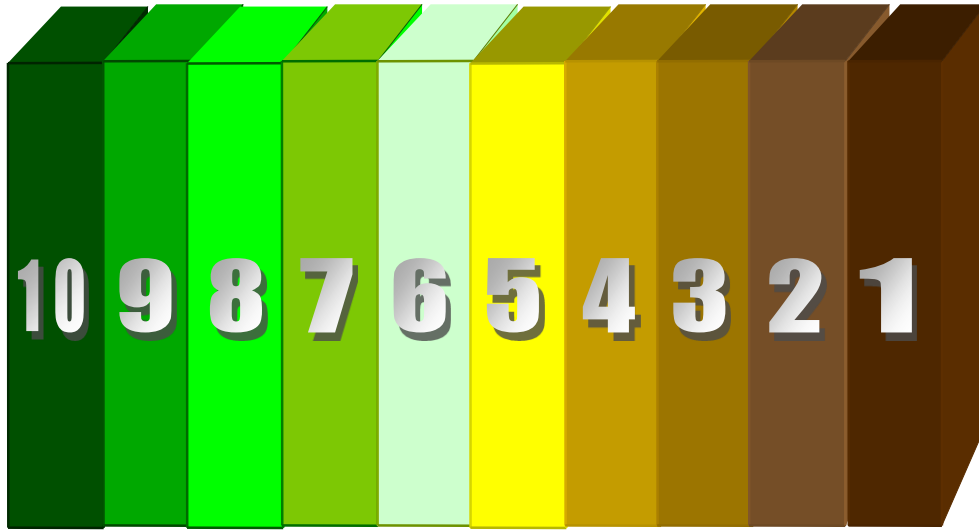


¿Qué tan verde es un proceso o experimento?

Morales Galicia M.L., Martínez J.O., Reyes-Sánchez L., Martín Hernández O., Arroyo Razo G.A., Obaya Valdivia A., Miranda Ruvalcaba R.

Educ. Quím. 2011, 22(3), 240-248.





Código de color y escala tipo Likert para evaluar un acercamiento Verde.

10	Totalmente verde
9	Gran acercamiento verde
8	Muy buen acercamiento verde
7	Buen acercamiento verde
6	Ligero acercamiento verde
5	Transición café a verde
4	Ligeramente café
3	Medianamente café
2	Muy café
1	Totalmente café

Escala de análisis y evaluación

Los valores están basados en la experiencia e intuición y no en una ciencia exacta. Entonces, estás asignaciones subjetivas pueden ser fácilmente modificadas. **Por lo que esta herramienta es flexible.**

OBJETIVO

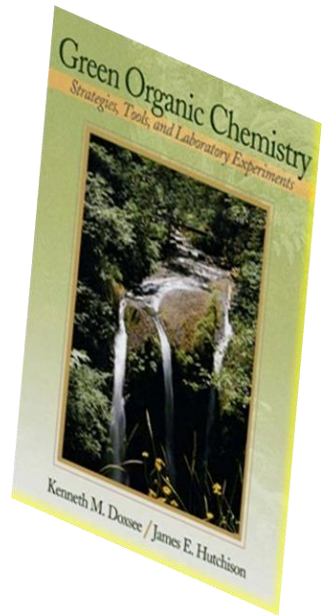
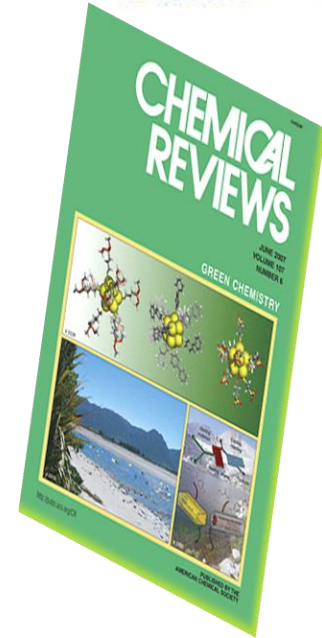
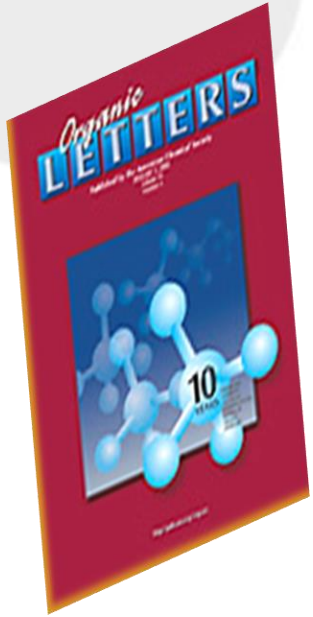
Generar conciencia sobre el poder de decisión para optar por la realización de procesos ambientalmente dañinos, ó **prevenir** la contaminación del medio mediante la introducción de las modificaciones necesarias para minimizar y, si es posible, eliminar la generación de residuos de compuestos químicos.

**Cuál es su real porcentaje de
apropiación de los principios
de la química verde?**



“QUÍMICA VERDE, PRINCIPIO POR PRINCIPIO”

PE209919-PAPIME



Elementos para análisis y evaluación

JOC_{Note}

Green Chemistry Approach to the Synthesis of N-Substituted Piperidones

Margaret M. Faul, Michael E. Kobierski, and
Michael E. Kopach*

Lilly Research Laboratories, A Division of Eli Lilly and Company, Chemical Process Research and Development Division, Eli Lilly and Co., Indianapolis, Indiana 46285-4813

kopach_michael@lilly.com

Received December 13, 2002

Abstract: An efficient green chemistry approach to the synthesis of N-substituted piperidones and piperidines was developed and applied to the synthesis of 1-(2-pyridinyl-methyl)-piperidin-4-one, **1**, a key starting material for the synthesis of LY317615, an antiangiogenic agent currently under development at Eli Lilly and Company (Chart 1).¹ The general utility of this methodology, which presents significant advantages over the classical Dieckman approach to this class of compounds, was also demonstrated by the direct synthesis of a series of substituted piperidones and piperidines, including potential dopamine D4 receptor antagonists **2** and **3**, that have been evaluated in the clinic as antipsychotic agents (Chart 2).²

To support clinical evaluation of LY317615, multi-kilogram quantities of 1-(2-pyridinyl-methyl)-piperidin-4-one, **1**, were required (Chart 1). A synthesis of **1** in 50% yield was reported by Hosken via a classical three-step sequence, involving a bis-Michael addition of 2-(amino-

CHART 1

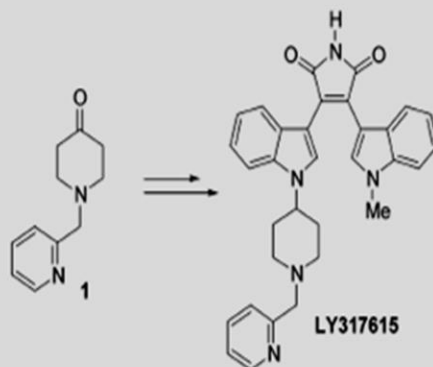
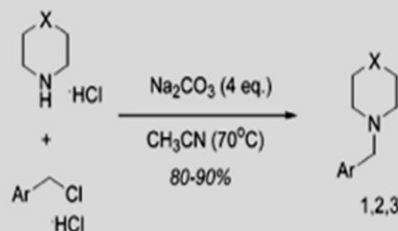
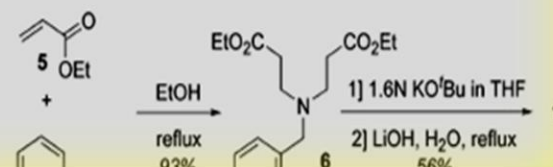


CHART 2



SCHEME 1



Título, autores, nombre de la revista, año, volumen y página inicial (en el idioma original).

Resumen (abstract) en el idioma original.

Resumen en el contexto verde.

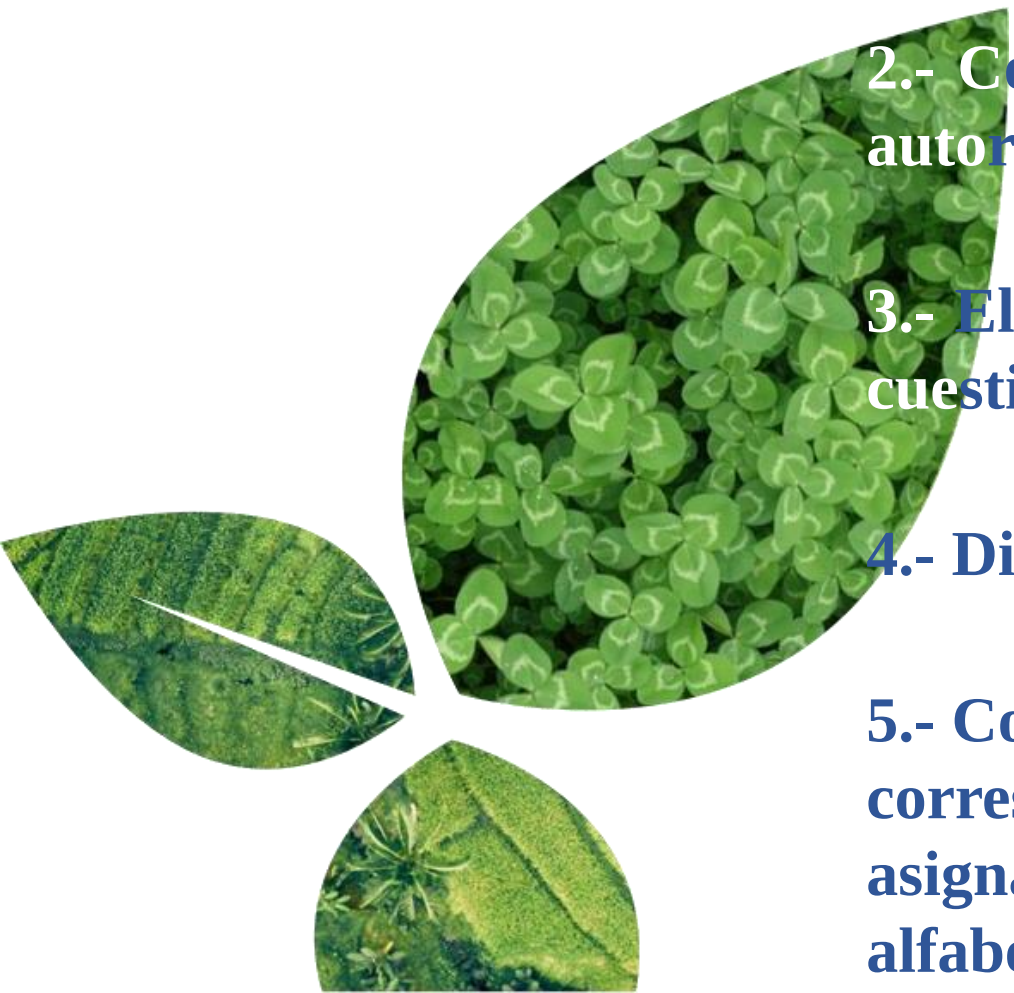
Diagrama de flujo experimental.

Evaluación del acercamiento verde del proceso; a) para cada paso y b) sumativa.



Pasos metodológicos para realizar la evaluación

- 1.- Lectura completa del documento a evaluar, para lograr la mayor comprensión posible de éste.
- 2.- Colocar tal y como aparecen en la publicación, el título, autores, nombre de la revista, año, página inicial y resumen.
- 3.- Elaborar un resumen en el contexto verde del trabajo en cuestión.
- 4.- Dibujar la reacción general del proceso.
- 5.- Construir un diagrama de flujo del método experimental, correspondiente al artículo o trabajo científico por evaluar; asignando a cada etapa una letra en minúscula y orden alfabético consecutivo.



Pasos metodológicos para realizar la evaluación

6.- Colocar para cada etapa experimental, un cuadro conteniendo un número, que indique él o los principios que se abarcan, y evaluar, mediante el código de color propuesto en el **código de color**, el grado de acercamiento verde de éstos.

7.- Igualmente, para cada paso del desarrollo experimental, incluir los pictogramas correspondientes a la toxicidad, inflamabilidad, corrosión y daño al ambiente, de los reactivos, disolventes, productos y residuos generados; para lo cual se debe tener conocimiento de las propiedades físicas, químicas y toxicológicas de todos ellos.

Pasos metodológicos para realizar la evaluación

8.- Elaborar una tabla mostrando; en el orden en el cual aparecen cada uno de los pasos experimentales en el diagrama de flujo, la evaluación justificada en los doce Principios de la química verde, que se hace para cada paso del proceso.

9.- Realizar la evaluación sumativa fundamentada del acercamiento verde del proceso; es decir, explicar por qué se considera que sí o no, se cumplieron determinados principios de la química verde.

10.- Presentar al final del diagrama de flujo experimental, la **escala tipo Likert** de asignación numérica y de **color correspondiente** a la evaluación sumativa con que se califica el proceso de forma global.



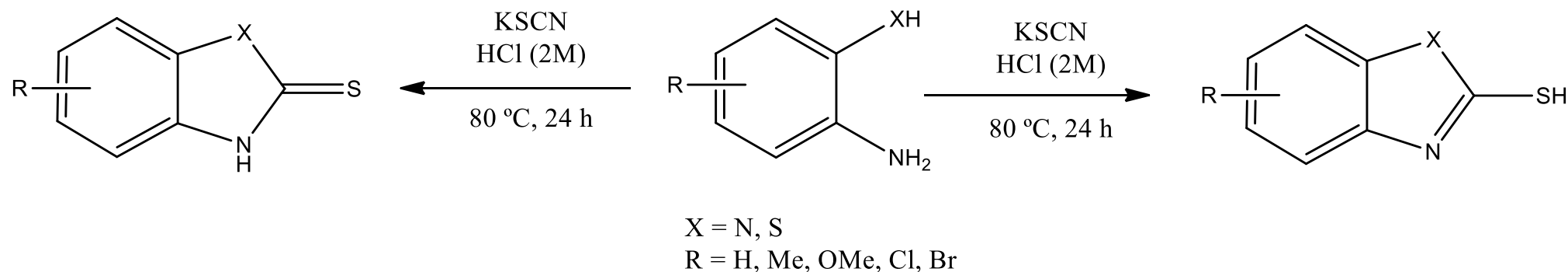
Ejemplo 1: “A new strategy for the synthesis of 2-mercaptobenzazole derivatives by green chemistry metrics”.

Esmail Vessally, Aazam Monfared, Zahra Eskandari, Morteza Abdoli, and Akram Hosseinian.

Phosphorous, Sulfur, and Silicon and Related Elements **2019**, in press, DOI 10.1080/10426507.2019.1571494

Abstract: A green and efficient method has been developed for the synthesis of 2-mercaptobenzazole derivatives via the reaction of commercially available aniline derivatives with low-cost and nontoxic potassium thiocyanate in water. The reactions proceeded smoothly under catalyst- and ligand-free conditions to give the corresponding products in good to excellent yields. The versatility, low cost, and environmental friendliness, in combination with high yields and easy work-up makes the procedure noteworthy.

Resumen en el contexto verde: Se describe la síntesis ambientalmente amigable de benzazoles mediante el empleo de anilinas, tiocianato de potasio, el uso de agua como disolvente y en ausencia de catalizadores o ligandos.



Reacción general.

Diagrama de flujo del ejemplo 1.



a) Derivados de anilina (2 mmol), 3 mL HCl (2M), KSCN (1.0 eq)

3(3)

9(10)

5(7)

12(1)

2(6)

b) Agitación y calentamiento a 80 °C por 24 h

6(5)

11(5)



c) NH₃, KCl

1(5)

6(10)

5(10)

d) Enfriar a t.a., el producto separado se filtra, se lava con agua y se seca para dar el producto



PELIGRO DE EXPLOSIVOS



INFLAMABLE



CARBURANTE



QUÍMICO NOCIVO



DAÑO AL MEDIO AMBIENTE



PELIGRO PARA LA SALUD



GASES BAJO PRESIÓN



CORROSIÓN



TOXICIDAD



Evaluación del acercamiento verde del proceso del ejemplo 1: Siguiendo el orden conforme al diagrama de flujo, se presenta la evaluación en la siguiente **Tabla**.

Paso a	Se emplean aminos las cuales, en general, presentan peligro a la salud, son químicos nocivos, algunas son tóxicas y presentan daño al ambiente, el uso de KSCN se cataloga como un químico nocivo, por lo que se sugiere una evaluación medianamente café (3) respecto al principio 3. También, se emplea como catalizador ácido clorhídrico en mezcla acuosa, por lo que el principio 9 debe ser evaluado como totalmente verde (10); pero, es apropiado comentar que el ácido es nocivo y corrosivo, por lo que es adecuado calificar al principio 12 como totalmente café (1). En relación al empleo de agua como disolvente no se indica la cantidad empleada, si se considera que son los 3 mL del ácido acuoso, entonces es apropiado considerar el principio 5 con un buen acercamiento verde (7). Respecto a la economía atómica, principio 2, en general es alrededor del 65 %, por lo que es apropiado evaluar este principio con un ligero acercamiento verde (6).
Paso b	El diseño de la eficiencia energética no es muy apropiado debido a que el tiempo de reacción es muy prolongado y presenta una alta temperatura, por lo que en este paso el principio 6, se aprecia como una transición café a verde (5). El seguimiento de la reacción la realizan mediante tlc; sin embargo, no se reporta que disolventes y en que proporciones se desarrolla, por lo que el principio 11, debe ser considerado como una transición café a verde (5).
Paso c	Se generan como residuos de la reacción NH_3 , el cual presenta toxicidad, peligro a la salud y es corrosivo y, por otro lado, se produce KCl que es un residuo verde, por lo tanto, es apropiado evaluar el principio 1 como una transición café a verde (5).
Paso d	En este paso, el enfriamiento se lleva a cabo a temperatura ambiente, por lo que el principio 6 es adecuado evaluarlo como totalmente verde (10), además, los lavados se hacen con agua, aunque no indican la cantidad, es el disolvente verde por excelencia, por lo que el principio 5 es apropiado calificarlo como totalmente verde (10).



Evaluación final del ejemplo 1: Este proceso en el paso **a**, al emplear HCl como catalizador, es totalmente verde en lo que al principio **9** se refiere, además, en la etapa **d**, también, es totalmente verde en relación a los principios **5** y **6**. Además, en el paso **a** hay un buen acercamiento verde respecto al principio **5** y un ligero acercamiento verde para el principio **2**. En los pasos **b** y **c**, se detecta una transición café a verde en función de los principios **6**, **11** y **1**. En el paso **a** es totalmente café para el principio **12** y es medianamente café en referencia al principio **3**. Se considera en suma, que es un proceso con un ligero acercamiento verde (6.20), el cual en la escala numérica propuesta, se evalúa con **6**.



Diagrama de flujo del ejemplo 1.



a) Derivados de anilina (2 mmol), 3 mL HCl (2M), KSCN (1.0 eq)



3(3)

9(10)

5(7)

12(1)

2(6)

6(5)

11(5)

b) Agitación y calentamiento a 80 °C por 24 h



c) NH₃, KCl

1(5)

6(10)

5(10)

d) Enfriar a t.a., el producto separado se filtra, se lava con agua y se seca para dar el producto

Ejemplo 2: “Biodiesel production optimization from waste cooking oil using green chemistry metrics”.

Nawel Outili, Halima Kerras, Chahra Nekkab, Rayane Merouani, Abdesslam Hassen Meniai.

Renewable Energy **2020**, 145, 2575-2586

Abstract: Biodiesel is a promising alternative to fossil energy, especially when non edible feedstocks are used in the production process. In the present work, biodiesel was produced from university campus restaurants waste frying soybean oil by means of transesterification reaction. The objective of this study was to reduce the energy and reactants consumption and waste generation to achieve a truly green process. For this purpose, a multiobjective optimization using central composite design (CCD) was performed considering three responses: the reaction conversion, the energy consumption and the green chemistry balance. The last two parameters *i.e.* the energy consumption and the green chemistry balance were considered as responses for the first time, hence an interesting originality. Temperature, KOH catalyst amount and oil to methanol molar ratio were the CDD independent variables.

Five green metrics were used to account for the greenness of the reaction, namely: carbon efficiency, atom economy, reaction mass efficiency, stoichiometric factor and environmental factor.

The obtained quadratic models for the prediction of the optimum responses fitted reasonably well the experimental data. The results showed a maximum oil conversion of 100 %, minimum energy consumption of 2.69 kJ and maximum green chemistry balance of 77.36 % at KOH catalyst concentration of 2 wt%, methanol to oil molar ratio of about 4.73 and minimum temperature of 45 °C.

The physical properties of the produced biodiesel agreed well with the international standards ASTM (American Society for Testing and Materials).

Resumen en el contexto verde: Se describe la producción de biodiesel optimizando el consumo de energía y reactivos, así como la minimización de desechos, mediante el diseño de un compuesto central (CCD). Para determinar el acercamiento verde del proceso se tomaron en cuenta cinco métricos: eficiencia de carbono, economía atómica, eficiencia de la masa de reacción, factor estequiométrico y factor ambiental.

Reacción general.

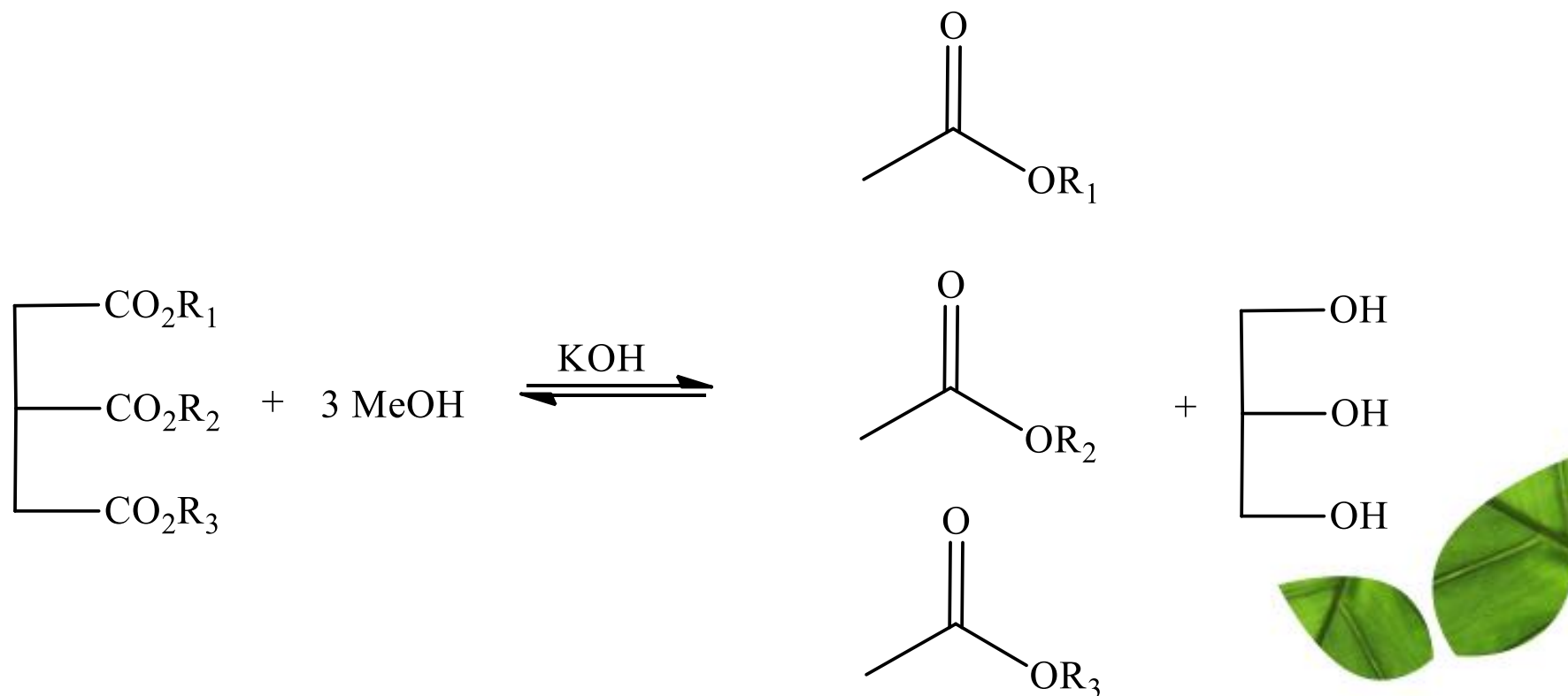
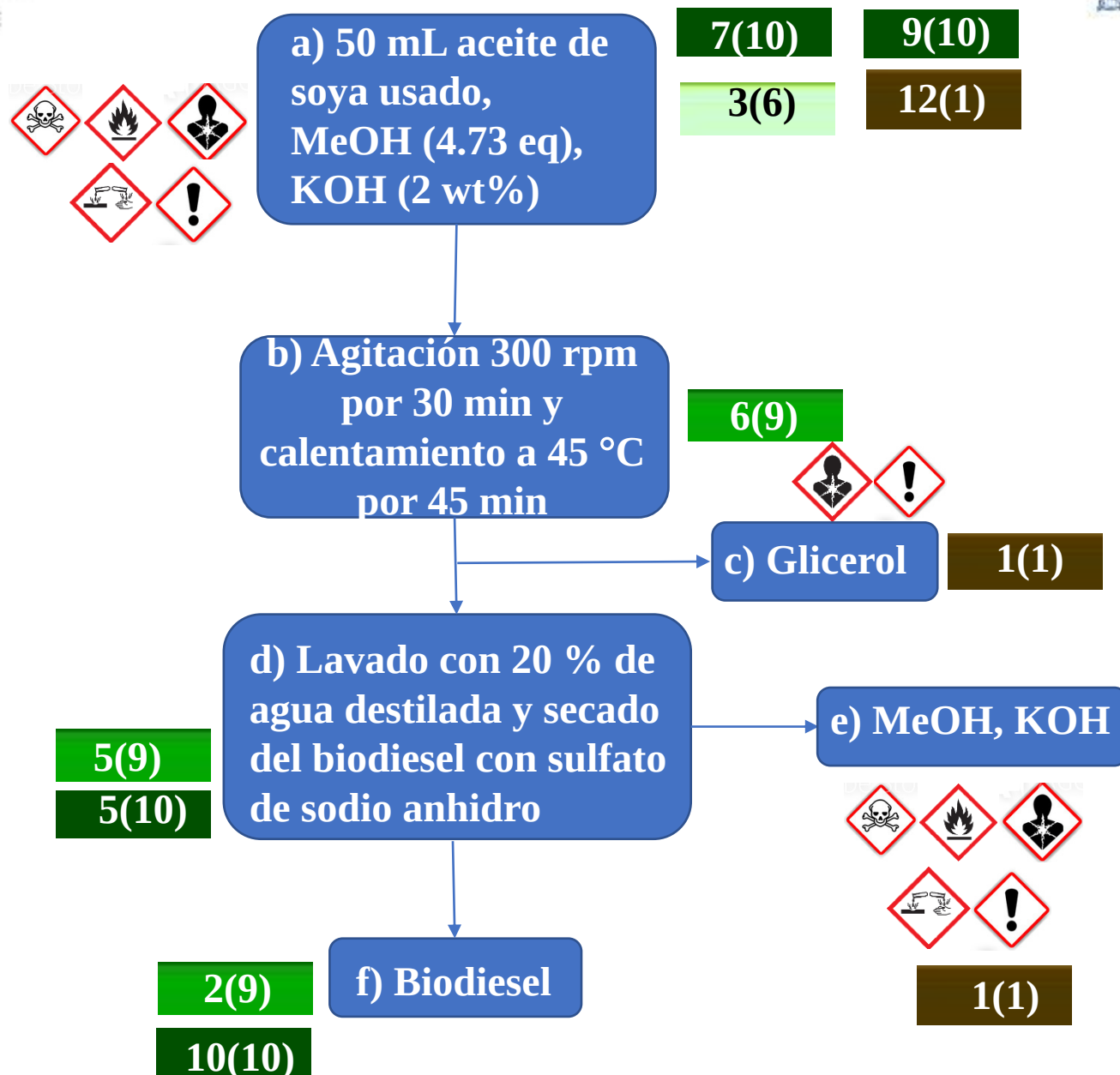


Diagrama de flujo del ejemplo 2.



Evaluación del acercamiento verde del proceso del ejemplo 2: Siguiendo el orden conforme al diagrama de flujo, se presenta la evaluación en la siguiente **Tabla:**

Paso a	Se emplea aceite de soya usado por lo que el principio 7 se debe evaluar como totalmente verde (10), ya que es una materia prima renovable, el uso de metanol como reactivo presentan peligro a la salud, es tóxico y es inflamable por lo que se sugiere que el principio 3 sea evaluado con un ligero acercamiento verde (6), esto en conjunción con el hecho de que el KOH se cataloga como un químico nocivo y es corrosivo, además, este reactivo es el catalizador en la reacción por lo que el principio 9 debe ser evaluado como totalmente verde (10); pero también es apropiado resaltar, como ya se menciona anteriormente, que es nocivo y corrosivo, por lo que es adecuado calificar al principio 12 como totalmente café (1).
Paso b	El diseño de la eficiencia energética es muy apropiado debido a que el tiempo de reacción es corto y presenta una baja temperatura, por lo que en este paso el principio 6, se aprecia con un gran acercamiento verde (9).
Paso c	Se genera como residuo de la reacción glicerol, el cual presenta peligro a la salud y es nocivo, por lo tanto, es apropiado evaluar el principio 1 como totalmente café (1).
Paso d	En este paso, se lleva un lavado con agua destilada para remover el MeOH y el KOH, por lo que el principio 5 es apropiado evaluarlo como un gran acercamiento verde (9), además, se emplea como sustancia auxiliar verde el sulfato de sodio anhidro para secar el biodiesel, aunque no indican la cantidad, es una sustancia verde, por lo que el principio 5 es apropiado calificarlo como totalmente verde (10).
Paso e	Al efectuar el lavado del biodiesel, con agua se separan los residuos MeOH y KOH, los cuales presenta toxicidad, peligro a la salud, inflamabilidad, nocividad y corrosividad, por lo tanto, es apropiado evaluar el principio 1 como totalmente café (1).
Paso f	Se obtiene biodiesel, un compuesto que es degradable, por lo que se sugiere evaluar el principio 10 como totalmente verde (10) y de acuerdo a los esteres metílicos que se obtienen, se puede evaluar el principio 2 con un gran acercamiento verde (9).

Evaluación final del ejemplo 2: Este proceso en los pasos **a**, **d** y **f**, son totalmente verde en lo que al principio 7, **9**, 5 y **10** se refiere. Además, en el paso **a** hay un ligero acercamiento verde respecto al principio 3. En los pasos **b**, **c** y **f**, se detecta un gran acercamiento verde en función de los principios **6**, 5 y 2. En los pasos **a**, **c** y **e** es totalmente café para los principios 1 y 12. Se considera en suma, que es un proceso con un ligero acercamiento verde (6.90), el cual en la escala numérica propuesta, se evalúa con **6**.



Diagrama de flujo final del ejemplo 2.



a) 50 mL aceite de soya usado,
MeOH (4.73 eq),
KOH (2 wt%)

7(10)

3(6)

9(10)

12(1)



b) Agitación 300 rpm
por 30 min y
calentamiento a 45 °C
por 45 min

6(9)



c) Glicerol

1(1)

d) Lavado con 20 % de
agua destilada y secado
del biodiesel con sulfato
de sodio anhidro

5(9)

5(10)

e) MeOH, KOH



1(1)

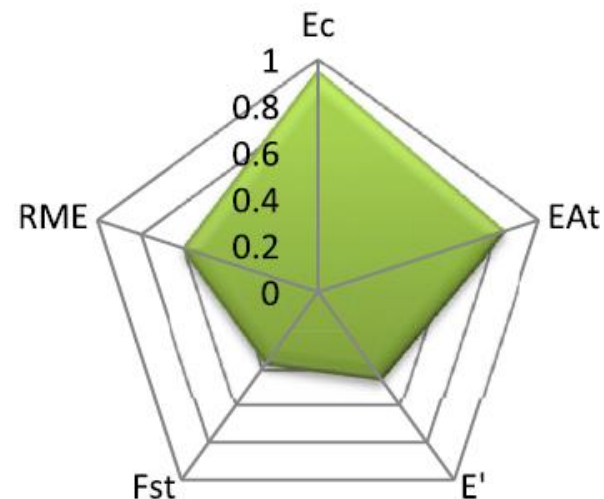
f) Biodiesel

2(9)

10(10)



6



Ejemplo 3: “Polyphenylsulfone (PPSU) for baby bottles: a comprehensive assesment on polymer-related non-intentionally added substances (NIAS)”.

Martin Eckardt, Annemarie Greb and Thoma J. Simat.

***Food Additives & Contaminants: Part A* 2018, 35, 1421-1437.**

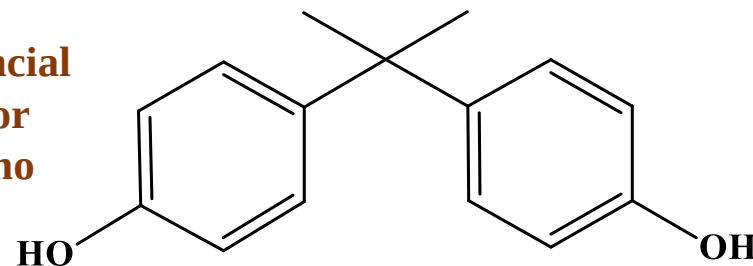
Abstract: Polyphenylsulfone (PPSU) is a new material for the production of baby bottles. PPSU is a polyether plastic formally composed of bisphenol S (BPS) and 4,4'-dihydroxybiphenyl (DHBP), which both have slight endocrine activities in *in vivo* test. So far, little is know about the presence and the release of potentially hazardous substances from PPSU baby bottles. In this study, we present a three-step approach for the analysis of PPSU starting with polymer characterization in terms of chemical structure, total oligomer content and hydrolytic stability. Second is the determination of extractables focusing on monomers, monomers derivatives, linear and cyclic oligomers below 1000 Da and residual solvent. Third is a risk assessment on migration-related substances in accordance to European Union plastics regulation no. 10/2011 based on triplicate consecutive migration experiments using official milk simulant 50 % ethanol. We analysed five types of PPSU baby bottles from different brands as well as corresponding raw material from different manufacturers by various analytical techniques (high-performance liquid chromatography (HPLC)-diode array detector/fluorescence detector/Corona/electrospray ionization-MS, HPLC-size exclusion chromatography, gas chromatography-mass spectrometry (GC-MC), ¹H-NMR). We found significant variations of PPSU materials from different producers with regard to polymer and oligomer chain end groups (methoxylation, chlorination), while total oligomer content below 1000 Da was similar (mean about 0.48 %). BPS was not detected above 0.3 mg/kg polymer in any PPSU. Residual DHBP content ranged between 1.7 and 15.5 mg/kg polymer. The most common oligomer in all PPSU samples was the cyclic tetramer (about 1200mg/kg polymer), which is the only cyclic compound below 1000 Da. Residual solvent, sulfolane, was determined to a maximum of 1300 mg/kg polymer. In migration test, we detected exceedances of neither specific migration limits for listed substances nor of thresholds of toxicological concern for non-listed substances (monomer derivatives, oligomers). Based on our analytical results, no concerns exist regarding migration of polymer-related substances from PPSU baby bottles.

Diagrama de flujo del ejemplo 3.



Principio 4: “Chemical products should be designed to preserve efficacy of function while reducing toxicity”

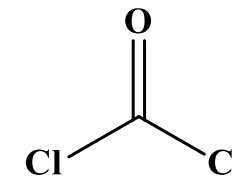
Alto potencial
disruptor
endocrino



Bisfenol A



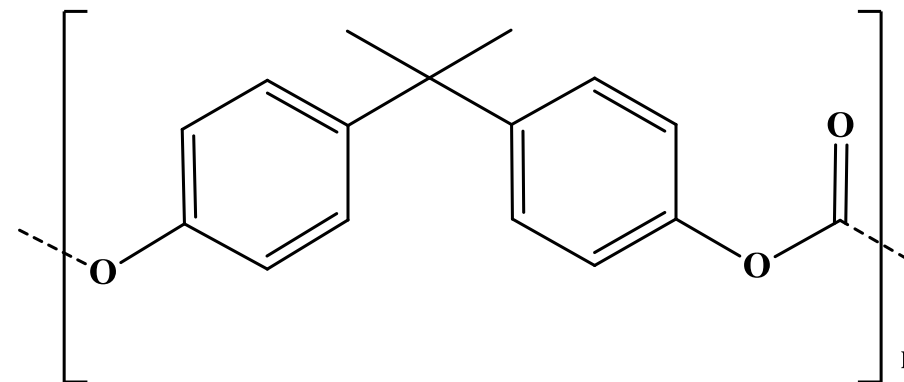
+



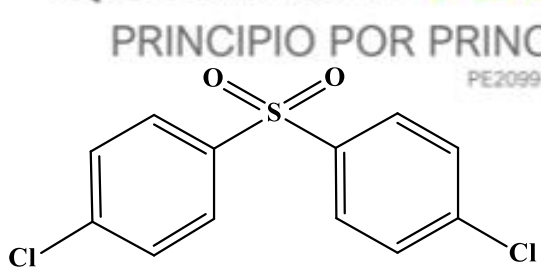
Fosgeno



2 NaOH

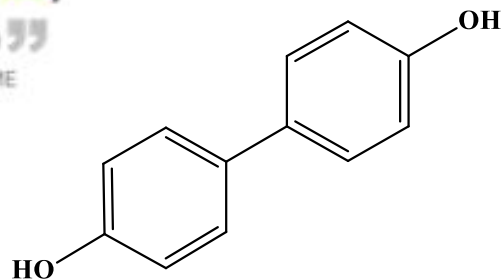


Prohibido para la producción de biberones



4,4'-diclorodifenilsulfona

+



4,4'-dihidroxibifenilo



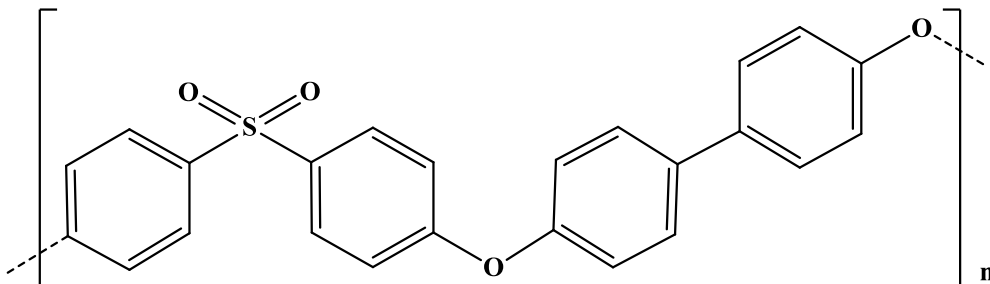
- 1) 2L NMP, K₂CO₃
180 °C, 6 h
2) 1L NMP, enfriar 80 °C
3) Precipitación con NMP/H₂O (1:9)



Bisfenol S:
bajo potencial
disruptor
endocrino

Polímero impuro

Lavado con H₂O, se seca a
120 °C por 12 h a vacío



Menos flamable, más resistente

SECCIÓN 2. Identificación de los peligros

2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

No es una sustancia o mezcla peligrosa.

2.2 Elementos de las etiquetas del SGA, incluidos los consejos de prudencia

No es una sustancia o mezcla peligrosa.

2.3 Peligros no clasificados de otra manera - ninguno(a)



