

«Зелена» хімія - сучасна хімія



«Зелена» хімія – відкриття, розробка та застосування хімічних продуктів та процесів, що зменшують або виключають використання та утворення шкідливих речовин.



Глобальні проблеми Біосфери з точки зору хіміка

- Атмосфера: забруднення, фотохімічний смог, кислотні дощі, деградація озонового шару, глобальна зміна клімату;
- Гідросфера: забруднення, нестача прісної води;
- Ґрунт: забруднення, зниження вмісту гумусу, зниження родючості;
- Енергетика: енергетична криза, викопне паливо, відновлювані джерела енергії;
- Природні ресурси: виснаження, переробка вторинних матеріалів;
- Народонаселення: контроль чисельності, проблема голоду, здоров'я та медична хімія

Дванадцять принципів «зеленої» хімії

1. Упередження. Краще не допускати утворення відходів, ніж займатися їх переробкою чи знищенням.
2. Економія атомів. Методи синтезу повинні розроблятися таким чином, щоб до складу кінцевого продукту включалося якнайбільше атомів реагентів, використаних у ході синтезу.
3. Зниження небезпеки процесів та продуктів синтезу. У всіх можливих випадках слід прагнути до використання або синтезу речовин, не токсичних або мало токсичних для людини і навколишнього середовища.
4. Конструювання "зелених" матеріалів. Технології повинні забезпечувати створення нових матеріалів, що володіють найкращими функціональними характеристиками та найменшою токсичністю.

Anastas, P. T.; Warner, J. C. Green Chemistry: Theory and Practice, Oxford University Press: New York, 1998

5. Використання менш небезпечних допоміжних реагентів. Використання допоміжних реагентів (розчинників, екстрагентів тощо) у процесах синтезу слід по можливості уникати. Якщо це неможливо, ключовим є параметр токсичності.
6. Енергозбереження. Слід усвідомлювати екологічні та економічні наслідки, пов'язані з витратами енергії в хімічних процесах. Бажано здійснювати процеси синтезу при кімнатній температурі та атмосферному тиску.
7. Використання поновлюваної сировини. У всіх випадках, коли це технічно можливо і економічно допустимо, слід віддавати перевагу відновлюваної сировини.
8. Зменшення числа проміжних стадій. Слід мінімізувати або взагалі відмовитися від непотрібних проміжних похідних (блокуючі групи, протектори, проміжні модифікатори фізичних та хімічних процесів), оскільки проміжні стадії пов'язані з генерацією додаткових відходів та споживанням реагентів.

9. Використання каталітичних процесів. Віддавати перевагу каталітичним процесам (з більшою селективністю) порівняно зі стехіометричними реакціями.
10. Біорозкладальність. Хімічний дизайн продуктів повинен забезпечувати їхню легку деградацію в кінці життєвого циклу, що не призводить до утворення сполук, небезпечних для навколишнього природного середовища.
11. Забезпечення аналітичного контролю у реальному масштабі часу. Для запобігання утворенню небезпечних відходів слід розвивати аналітичні методи, що забезпечують можливості моніторингу та контролю у реальному масштабі часу.
12. Запобігання можливості аварій. Хімічні сполуки, що використовуються в технологічних процесах, повинні бути присутніми у формах, що мінімізують ймовірність хімічних аварій (викидів СДОР, вибухів, пожеж).

Сучасний етап розвитку зеленої хімії:

- створення нових шляхів синтезу (переважно на основі каталітичних реакцій);
- заміна не відновлюваних вихідних реагентів відновлюваними (відмова від використання як сировини нафти та природного газу);
 - заміна традиційних органічних розчинників екологічно безпечними або проведення реакцій без використання рідких середовищ;
- впровадження біотехнологій.

Кількісні характеристики, що використовуються для оцінки процесів з погляду Зеленої хімії

Рождер Шелдон: E-фактор та Атомна ефективність

$$E - \text{фактор} = \frac{\text{маса усіх побічних продуктів (відходів виробництва)}}{\text{маса цільового продукту}}$$

E-фактор – критерій для оцінки ступеня використання сировини та кількості відходів, що утворюються (чим більше E-фактор, тим менш “зеленою” є технологія).

Величини E-фактору для різних типів хімічних процесів.

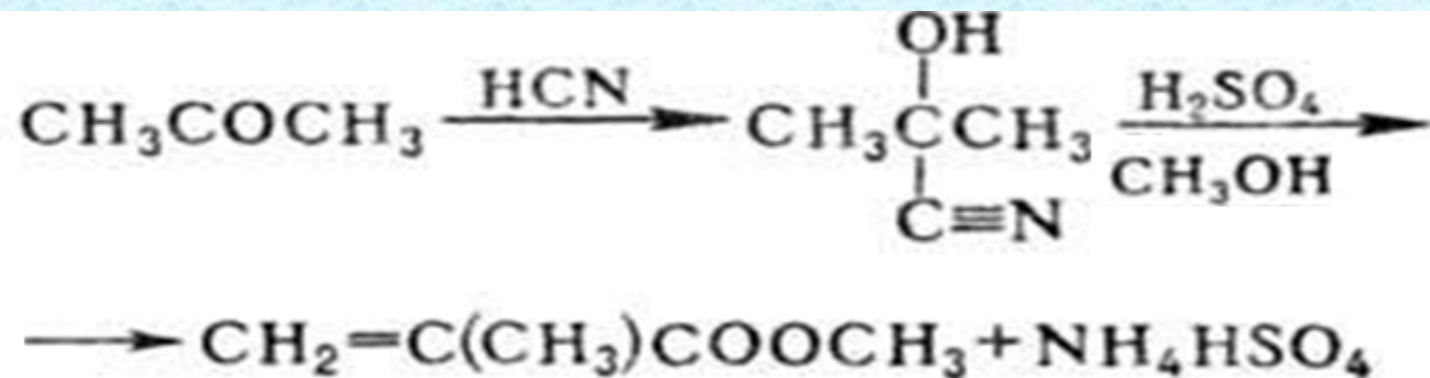
Хімічна продукція	E-фактор
Нафтохімічні продукти	0,1
Продукція основного органічного та неорганічного синтезу	1-5
Продукція тонкого органічного синтезу	5-50
Ліки	25-100 та більше

Атомна ефективність (А-фактор) – дозволяє аналізувати кількість перетворених атомів

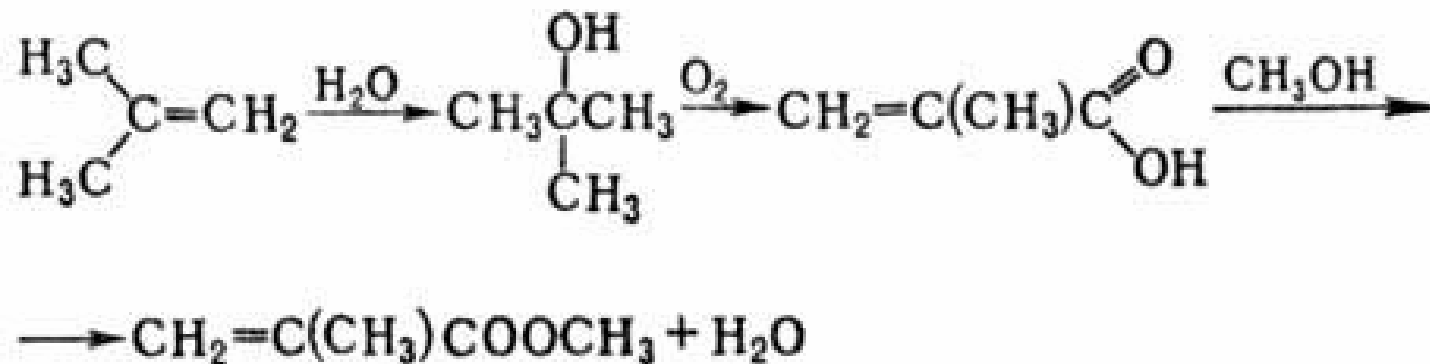
$$\text{Атомна ефективність} = \frac{\text{мольярна маса цільового продукту}}{\sum \text{молярна маса всіх продуктів}} 100\%$$

Чим ближче атомна ефективність до 100%, тим більш «зеленою» є дана реакція.

Методи добування метилметакрилату



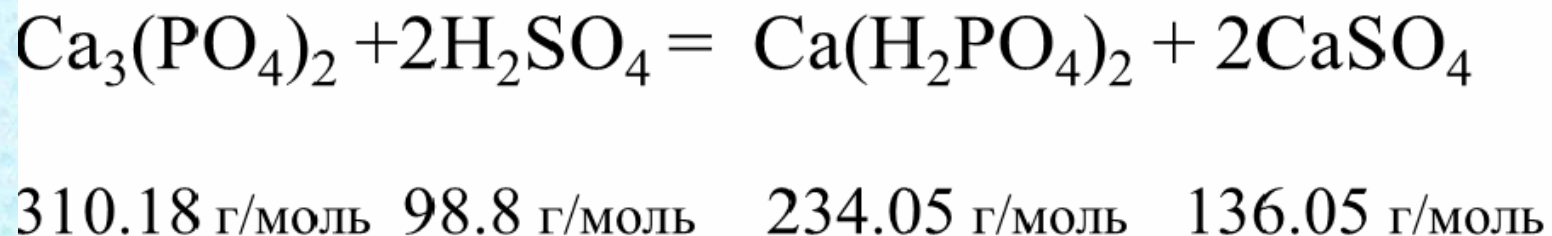
46.5%



84.7%



Основний хімічний процес при виробництві простого суперфосфату описується рівнянням



Розрахувати А та Е-фактори даного процесу

$$E = \frac{2 \cdot 136.05}{234.05} = 1.16$$

$$A = \frac{234.05}{234.05 + 2 \cdot 136.05} 100\% = 46.2\%$$