

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

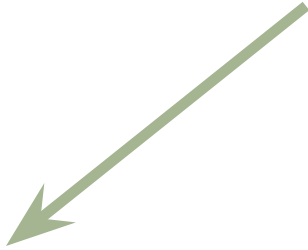
Основні підходи “зеленої хімії”

1. Враховує **всі етапи “життєвого циклу”** хімічного продукту
2. Намагається створити такий **хімічний продукт/процес**, який є повністю безпечним
3. Працює як **система принципів**

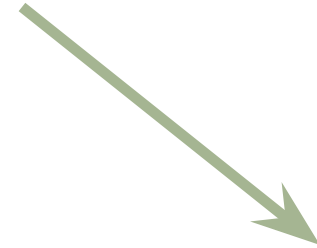


Забезпечення сталого розвитку

Основні напрями



Переробка, утилізація,
знешкодження



Виключення
використання/утворення
небезпечних продуктів

12 принципів «зеленої» хімії

Paul Anastas



John C. Warner



1. Упередження.
2. Економія атомів.
3. Зниження шкідливості процесів та продуктів синтезу.
4. Конструювання «зелених» матеріалів.
5. Використання менш шкідливих допоміжних реагентів.
6. Енергозбереження.
7. Використання відновлюваної сировини.

12 принципів «зеленої» хімії

8. Зменшення кількості проміжних стадій.
9. Використання каталітичних процесів.
10. Дизайн продуктів, що біорозкладаються.
11. Забезпечення аналітичного контролю в реальному часі.
12. Попередження аварій.

P – Prevent wastes
R – Renewable materials
O – Omit derivatisation steps
D – Degradable chemical products
U – Use of safe synthetic methods
C – Catalytic reagents
T – Temperature, Pressure ambient
I – In-Process monitoring
V – Very few auxiliary substrates
E – E-factor, maximise feed in product
L – Low toxicity of chemical products
Y – Yes, it is safe

S. L. Y. Tang, R. L. Smith and M. Poliakoff, *Green Chem.*, **2005**, **7**,761.

Основні поняття

- **Небезпека**
- **Ризик** = $f(\text{небезпека} \times \text{час дії})$

- **Оцінка ефективності синтезу:**

Економія атомів (використання атомів) **АЕ**

Е(nvironmental)-фактор – *кг відходів на 1 кг продукту*

RME -фактор

СЕ -фактор

МІ -фактор



Barry Trost

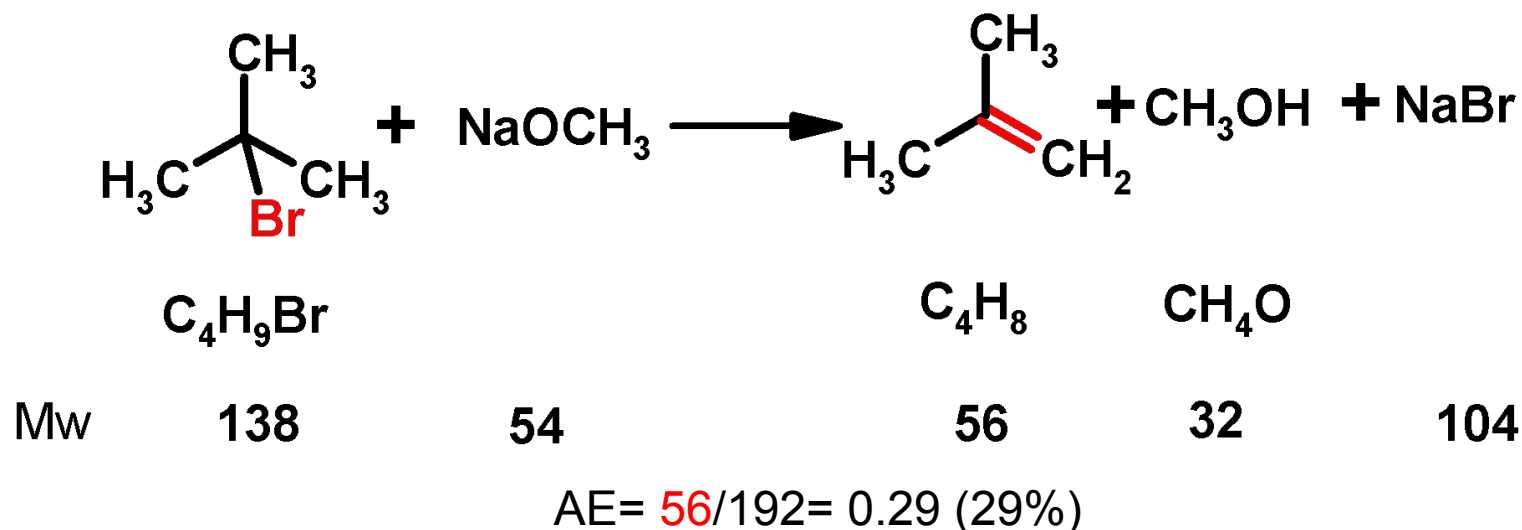


R. A. Sheldon

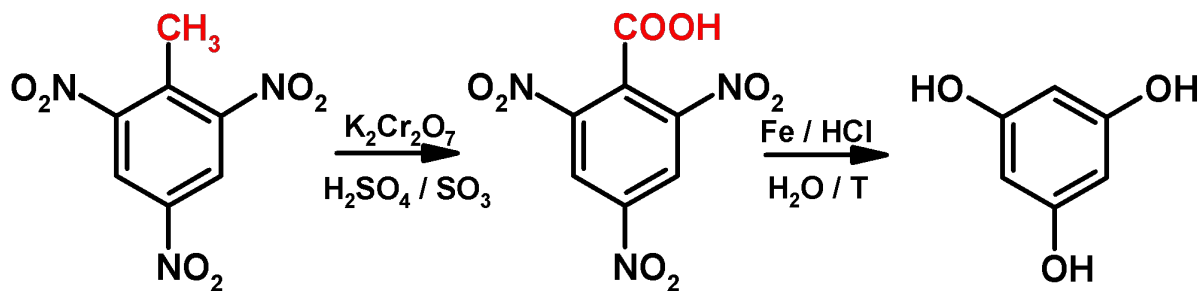
“Використання” атомів, Е-фактор

“Використання атомів” (AE) = *Відносна мол. маса бажаного продукту* / *сума відн. мол. мас усіх утворених продуктів*

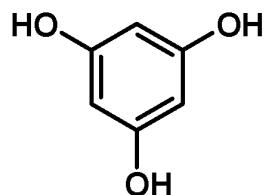
E(nvironmental)-фактор – *кг відходів на 1 кг продукту*



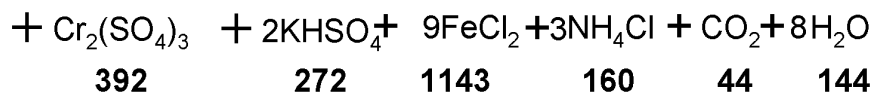
“Використання” атомів, Е-фактор



$$AE = 126/2281 = 5\%$$



Продукт
Mw= 126



Е-фактор (теор.)= 2282/126= 17%

Е-фактор (прат.)= 40%

Е-фактор: хімічна промисловість

Промисловий сегмент	Обсяг (тон на рік)*	Е-фактор (кг відходів на кг продукції)
Основна хімія	10^4 - 10^8	<1-5
Тонкий хімічний синтез	10^2 - 10^4	5-50
Фармацевтична галузь	10 - 10^3	25-100
<i>* Річне світове виробництво або окремого сектору</i>		

•Roger A. Sheldon “E factors, green chemistry and catalysis: an odyssey / Chem. Commun., 2008, 3352-3365.

EQ-фактор

EQ-фактор – різні відходи мають різний рівень небезпеки (**Q**)

$$EQ = E(\text{кг відходів на 1 кг продукта}) \times Q$$

Q = 1 для **NaCl**

Q = 1000 (?) для **солей Cr**

Джерела відходів



Багатостадійність
синтезу



Стехіометричні
реагенти –
кислоти і
основи



Втрати
органічних
розчинників

Розв'язок проблеми



Каталітичні реакції,
альтернативні
реакційні середовища



Окиснення-
відновлення



Реакції без
розчинників

Безвідходне виробництво

«Безотходная технология есть практическое применение знаний, методов и средств с тем, чтобы в рамках потребностей человека обеспечить наиболее рациональное использование природных ресурсов и энергии и защитить окружающую среду.»

«Декларация о малоотходной и безотходной технологии и использования отходов», 1979 г.

«Безотходная технология – это такой способ производства продукции (процесс, предприятие, территориально-производственный комплекс), при котором наиболее рационально и комплексно используются сырье и энергия в цикле сырьевые ресурсы-производство-потребление-вторичные сырьевые ресурсы таким образом, что любые воздействия на окружающую среду не нарушают ее нормального функционирования»

ЕЭК ООН, 1984 г.

