

Környezetbarát eljárások BSc kurzus, 2019

A zöld kémia mérőszámai

Székely Edit

Green?

Fenntarthatóság,
fenntartható fejlődés.
Értelmezzük
globálisan!

Sustainability

Green
chemistry

Green
engineering

A zöld kémia 12 pontja
(és kiterjesztései)
Melyik milyen
mérőszámmal
jellemezhető ?

Ez az a terület,
amiben szakmai
tevékenységünk során
aktívan részt
vehetünk
(környezetvédelmi
szempontokat is
figyelembe vevő
folyamattervezés és
üzemeltetés pl.)

Fenntartható fejlődés feladat

- <https://www.un.org/sustainabledevelopment/>
- Az ENSZ (United Nation)
- A kiadott lapok alapján, valamint tetszőleges további segédeszközök felhasználásával magyarázzák el a kapott fenntarthatósági célt, és mutassák be, hogy szakmailag és magánemberként mit tehetünk az elérése érdekében.

Atomhatékonyság

$$AE = \frac{\sum M_{\text{termék}}}{\sum M_{\text{reagens}}}$$

Ahol M a mol tömeg

Sztöchiometriai tényező

$$SF = 1 + \frac{\sum m_{\text{reagens, feleslegbe n}}}{\sum m_{\text{reagens, sztöchiome trikus}}} =$$

$$= 1 + \frac{AE \cdot \sum m_{\text{reagens, feleslegbe n}}}{\sum m_{\text{termék, elméleti}}}$$

Ahol m a tömeg

Tömegvisszanyerési hatások

$$MRP = \frac{1}{1 + \frac{X \cdot AE \cdot (c + s + \omega)}{SF \cdot m_{\text{termék}}}}$$

Ahol X a konverzió (a limitáló komponensre felírva),
 m a termék tömege,
 c a felhasznált katalizátor tömege
 s a felhasznált oldószer tömege
 ω a felhasznált egyéb segédanyagok tömege

Tömegre vonatkoztatott reakció hatékonyság

$$RME = X \cdot AE \frac{1}{SF} \cdot MRP = \frac{1}{1 + E}$$

Sheldon féle E faktor

$$E = \frac{\sum m_{\text{hulladék}}}{\sum m_{\text{termék}}}$$

Az E faktor (környezeti tényező) tipikus értékei

Industry	E-factor	Annual Production tonnes	Total Waste tpa	No of transformations	Years of development
Oil Refining	ca. 0.1	$10^6 - 10^8$	10 million	Separations	100+
Bulk Chemicals	<1 to 5	$10^4 - 10^6$	5 million	1-2	10 – 50
Fine Chemicals	5 to >50	$10^2 - 10^4$	0.5 million	3-4	4 - 7
Pharmaceuticals	25 to >100	$10 - 10^3$	0.1 million	6+	3 - 5

EQ factor = environmental quotient

$$EQ = \frac{\sum (m_{\text{hulladék},i} \cdot Q_i)}{\sum m_{\text{termék}}}$$

Ahol Q a környezetkárosítási súlyfaktor

Q értéke 0 tiszta vízre, 1 NaCl-ra, míg kromát sók esetén >100

A konkrét értékek megállapodástól függenek (ezért a lista szubjektív lesz).

Q értéke függhet:

- fizikai tulajdonságok (korrozivitás, robbanásveszély, gyulladási hőmérséklet, pH stb.)
- toxicitás (halálos dózis, rákkeltő hatás, mutagén hatás, akut vagy krónikus toxicitás stb.)

Eljárásra, folyamatra vonatkozó intenzitás tényezők (egységnyi termék tömegre vonatkoztatott fajlagosok)

- Tömeg
 - Reagens
 - Oldószer
 - hulladék
- Energia
 - Felhasznált
 - Life cycle energy
 - Oldószer visszanyerés stb
- Hulladék
- Ekvivalensek
 - CO₂
 - etanol
- Etanol ekvivalens (EE)
jelenti azt az etanol mennyiséget (kilogrammban, tonnában, vagy millió tonnában kifejezve), amellyel fedezni tudjuk egy adott nyersanyagból előállított energia mennyiségét, vagy jelenti azt a mennyiséget, amelyből egy adott szén-alapú vegyi anyag termelése fedezhető a termodinamikai ekvivalenciát figyelembe véve.

Zöld kémia feladat

- A zöld kémia 12 pontja mindegyikéhez adja meg, hogy milyen módon lehetne számszerűsíteni.

A zöld kémia 12 alapelve

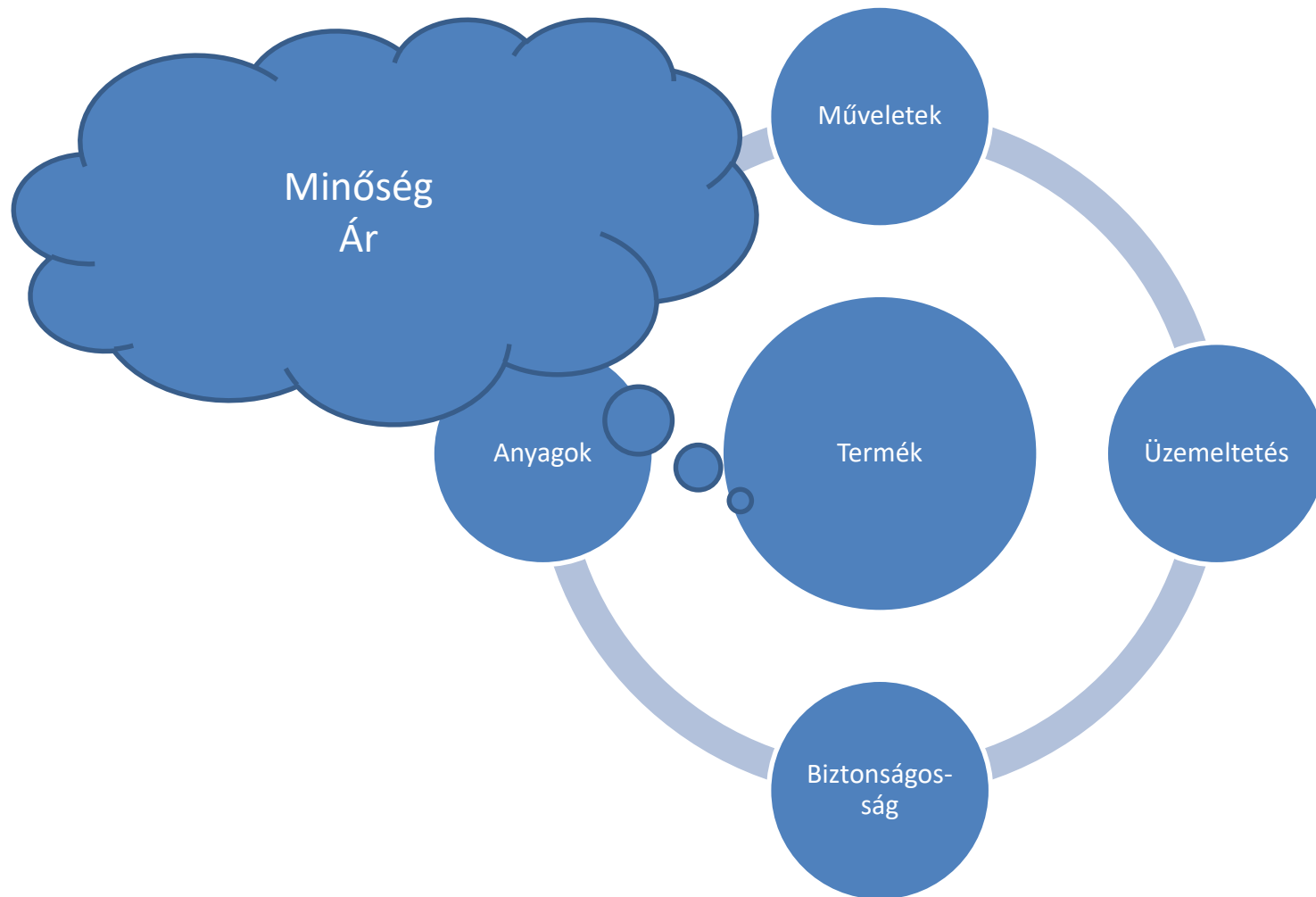
1. Megelőzés: Jobb megelőzni a hulladék keletkezését, mint a keletkezése után kezelni, megsemmisíteni.
2. Maximális anyagfelhasználás: Új anyagok előállításánál, szintézisének törekedni kell a kiindulási anyagok maximális felhasználására, a melléktermékek képződésének visszaszorítására.
3. A legkevésbé veszélyes reakció keresése: Lehetőség szerint már a szintézisek tervezésekor olyan reakciókat kell választani, amelyekben a felhasznált és a keletkező anyagok nem mérgezőek, illetve a környezetre nem ártalmasak.
4. A legkevésbé mérgező anyagok tervezése: Új anyagok előállításánál törekedni kell arra, hogy a termékkel szembeni elvárások teljesítése mellett annak mérgező hatása minél kisebb legyen.
5. Környezetbarát oldószerek és segédanyagok használata: Minimalizálni kell a segédanyagok (pl. oldószerek) használatát, amennyiben mégis szükségesek, azok lehetőleg környezetbarát tulajdonságúak ("zöldek") legyenek.
6. Az energiafelhasználás csökkentése: Törekedni kell az energiafelhasználás csökkentésére, olyan szintézisek kidolgozására, amelyek közönséges hőmérsékleten és nyomáson mennek végbe.
7. Megújuló nyersanyagok használata: A vegyipari eljárások alapanyagait lehetőleg megújuló nyersanyagokból válasszuk.
8. A származékkészítés csökkentése: Kerülni kell a felesleges származékok, köztitermékek és melléktermékek előállítását.
9. Katalizátorok használata: A nagy mennyiségben szükséges reagensekkel szemben előnyben kell részesíteni a szelektív katalizátorokat.
10. Lebomló anyagok tervezése: A termékeket úgy kell megtervezni, hogy használatuk után ne szennyezzék a környezetet, és bomlásuk környezetre ártalmatlan termékekhez vezessen.
11. Állandó ellenőrzés: Új és érzékeny analitikai módszereket kell használni a vegyipari folyamatok állandó ellenőrzésére, hogy a veszélyes anyagok képződését idejében észlelhessük.
12. A vegyipari balesetek valószínűségének csökkentése: A vegyipari folyamatokban olyan anyagokat kell használni, amelyek csökkentik a vegyipari balesetek (tűz, robbanás, káros anyagok kibocsátása) esélyét.

Green engineering (EPA definíció)

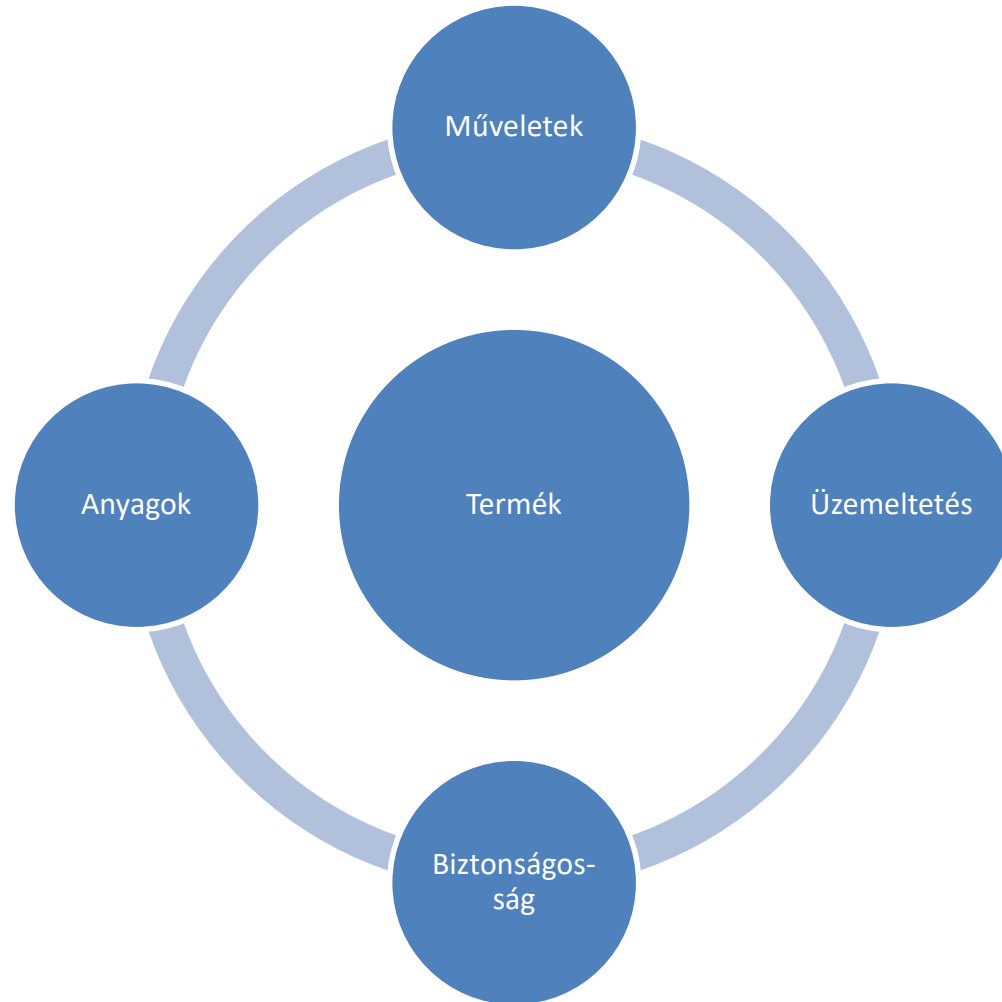
Green Engineering is the design, commercialization and use of processes and products that are *feasible* and *economical* while:

- Reducing the generation of pollution *at the source*.
- *Minimizing the risk* to human health and the environment.

Ha eljárást tervezünk...

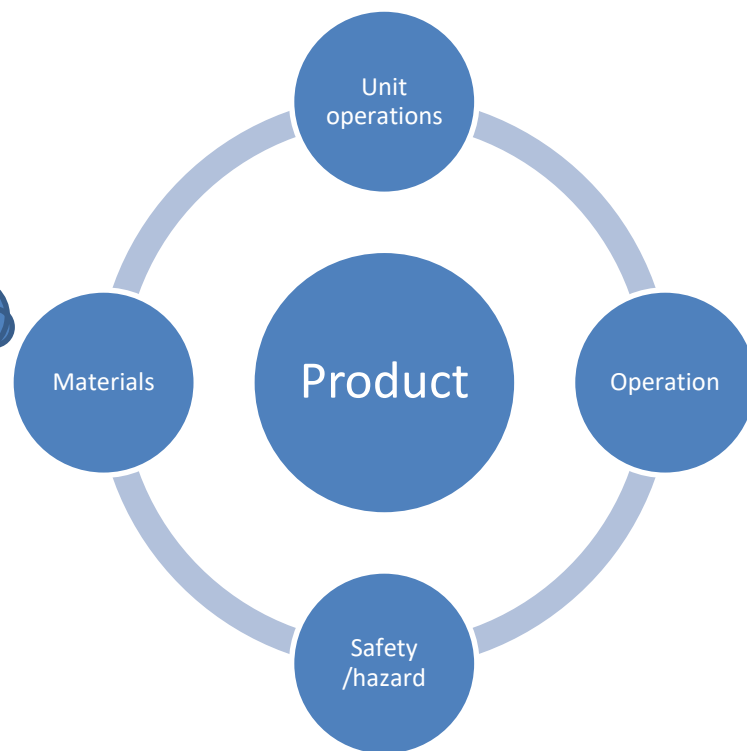


Ha eljárást tervezünk...

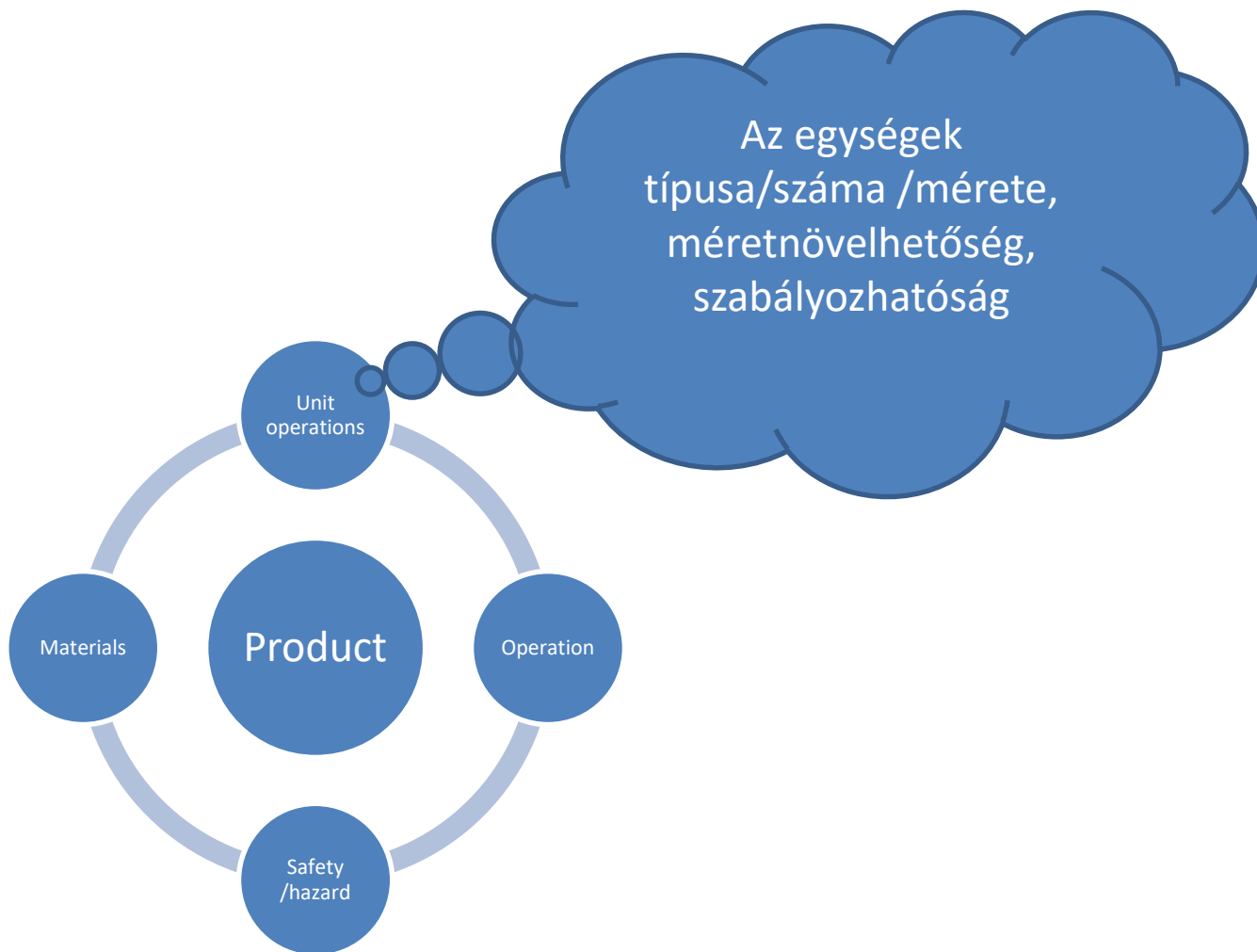


Ha eljárást tervezünk...

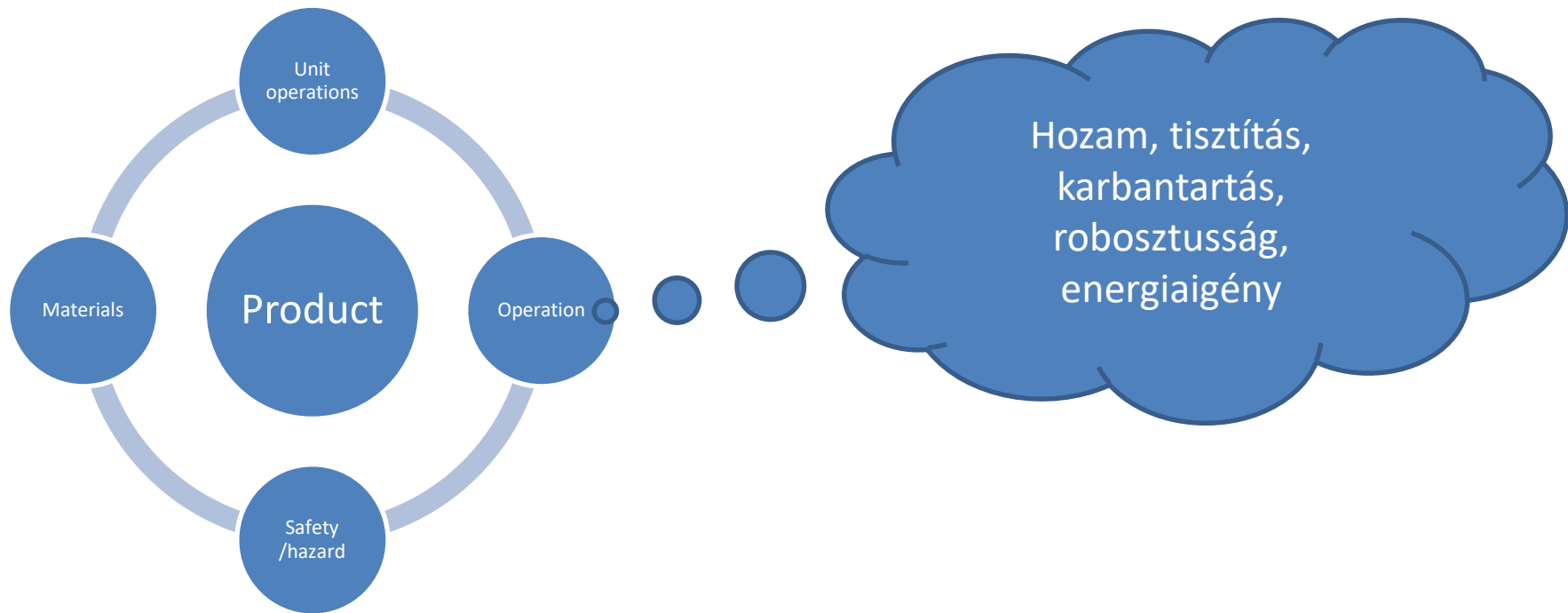
Fizikai és kémiai tulajdonságok, ár és szükséges mennyiség, elérhetőség/hozzáférhetőség



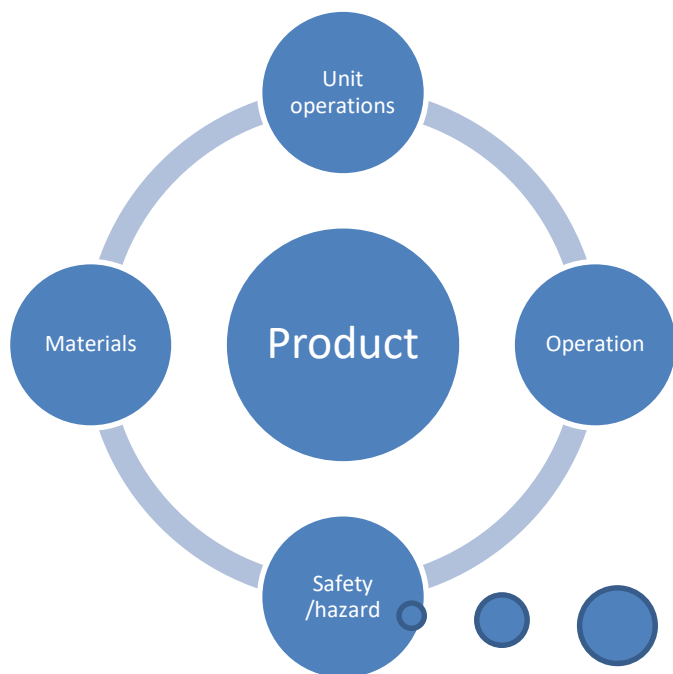
Ha eljárást tervezünk...



Ha eljárást tervezünk...



Ha eljárást tervezünk...



Környezeti/egészségi/
munkavédelmi
kockázatok és a
bekövetkezés
valószínűsége