

«ЗЕЛЕНА» АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

ЕЛЕКТРОННІ МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ І. І. МЕЧНИКОВА
ФАКУЛЬТЕТ ХІМІЇ ТА ФАРМАЦІЇ
КАФЕДРА АНАЛІТИЧНОЇ ТА ТОКСИКОЛОГІЧНОЇ ХІМІЇ

«ЗЕЛЕНА» АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

ЕЛЕКТРОННІ МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до практичних занять

для здобувачів третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти
спеціальності ЕЗ Хімія, ОНП Хімія

ОДЕСА
ОНУ
2025

УДК 543.2:544.2
З-481

Укладачі:

О. М. Гузенко, кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри аналітичної та токсикологічної хімії;

Д. В. Снігур, кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри аналітичної та токсикологічної хімії;

А. В. Демчук, здобувачка вищої освіти за третім (освітньо-науковим) рівнем вищої освіти.

Рецензенти:

Р. Є. Хома, доктор хімічних наук, професор кафедри аналітичної та токсикологічної хімії Одеського національного університету імені І. І. Мечникова;

Т. О. Кіосе, доктор хімічних наук, професор кафедри неорганічної хімії та хімічної освіти Одеського національного університету імені І. І. Мечникова.

Рекомендовано вченою радою факультету хімії та фармації

ОНУ імені І. І. Мечникова.

Протокол № 7 від 24 квітня 2025 р.

З-481 «Зелена» аналітична хімія [Електронний ресурс] : електрон. метод. вказівки до практ. занять для здобувачів третього (освіт.-наук.) рівня вищ. освіти спец. ЕЗ Хімія, ОНП Хімія / уклад.: О. М. Гузенко, Д. В. Снігур, А. В. Демчук. – Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2025. – 36 с. – 1,2 МБ.

Методичні вказівки складено відповідно до програми курсу «“Зелена” аналітична хімія». Вони містять теоретичні відомості щодо основ застосування принципів зеленої хімії у практичній діяльності фахівців в галузі «Хімія», та контрольні питання до підсумкового контролю знань.

Рекомендовані для здобувачів вищої освіти природничих факультетів при підготовці до занять з навчальних дисциплін, що присвячені питанням “Зеленої” аналітичної хімії.

УДК 543.2:544.2

ЗМІСТ

ВСТУП	4
I. ЗЕЛЕНА ХІМІЯ	5
1. Профілактика	7
2. Економія атомів	8
3. Відносно небезпечні хімічні синтези	9
4. Розробка безпечніших хімічних речовин	10
5. Безпечні розчинники та допоміжні речовини	11
6. Енергоефективність	11
7. Використання відновлюваної сировини	12
8. Зменшення кількості похідних продуктів (дериватизація)	13
9. Каталіз	14
10. Розкладність продуктів	15
11. Аналіз у режимі реального часу для запобігання забрудненню ...	17
12. Безпечніша хімія для запобігання нещасним аваріям	17
II. ЗЕЛЕНА АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ	19
III. РОЗУМНА АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ	29
ПЕРЕЛІК ПИТАНЬ ДО ПІДСУМКОВОГО КОНТРОЛЮ	33
СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ	34

ВСТУП

Сімнадцять Цілей сталого розвитку Організації Об'єднаних Націй (ЦСР ООН) спрямовані на вирішення глобальних проблем, пов'язаних з бідністю, нерівністю, кліматом, деградацією навколишнього середовища, процвітанням, миром і справедливістю (Організація Об'єднаних Націй, 2025). Досягнення цих цілей матиме вирішальне значення для сприяння переходу до більш сталого суспільства. Ціль 4 стосується якісної освіти, де наступне покоління хіміків, інженерів-хіміків та тих, хто працює в суміжних галузях, має бути оснащене та мати можливість практикувати та поширювати підходи до зеленої хімії, до проектування та розробки процесів і продуктів. Навчання у секторі вищої освіти є ключовим компонентом у досягненні цієї мети, завдяки чому нинішня робоча сила та майбутній потенціал можуть завдяки зеленій хімії здійснити стійкі трансформаційні зміни.

Через роки після розвитку зеленої хімії та визначення її 12 принципів, освітяни в усьому світі визнали вплив та переваги інтеграції цієї галузі в освітню, сервісну та дослідницьку діяльність. Завдяки впровадженню зеленої хімії в освіту, хіміки навчаються проектувати з урахуванням екологічних та людських навичок, створюючи менш небезпечні процеси та продукти, а також сприяючи подальшому сприянню здоровішому та безпечнішому світу для цього та майбутніх поколінь. Ця реалізація, яка спочатку була зосереджена на просуванні рушійних сил змін шляхом сприяння впровадженню зеленої хімії, заміні контенту та нарощуванні потенціалу, в останні роки змістилася на розбудову спільноти та розширення можливостей освітян для створення агентів змін. Ці надихаючі особи та установи потім стають частиною спільноти, яка живе та дихає зеленою хімією та сталим розвитком, і можуть надалі сприяти повній реформі навчальних програм.

Головною метою зеленої хімії з моменту її зародження як наукової галузі понад 30 років тому було те, щоб вся хімія зрештою стала зеленою.

I. ЗЕЛЕНА ХІМІЯ

Зелена хімія – це інноваційний підхід до проектування, виробництва та застосування хімічних продуктів, спрямований на мінімізацію шкідливого впливу на здоров'я людини та довкілля. Вона базується на ідеї сталого розвитку, ефективного використання ресурсів і зменшення токсичних відходів.

У 1998 році Пол Анастас та Джон Ворнер у книзі «Зелена хімія: теорія та практика» сформулювали **12 принципів зеленої хімії**, які стали основою для розробки екологічно безпечних технологій. Ці принципи охоплюють усі етапи хімічного процесу – від вибору сировини до утилізації продуктів – і сприяють створенню безпечніших, економічно вигідніших та енергоефективніших методів.

У цьому переліку ми розглянемо кожен із 12 принципів, їх значення та приклади застосування у сучасній науці та промисловості.

1. **Запобігання утворенню відходів (профілактика).** Краще уникати утворення відходів, ніж намагатися їх переробляти чи знешкоджувати.
2. **Економія атомів.** Синтез слід проектувати так, щоб у кінцевий продукт входило якнайбільше вихідних матеріалів (мінімізація втрат атомів).
3. **Менш небезпечний синтез.** Де це можливо, варто використовувати речовини та методи, що мають мінімальну токсичність для людини та довкілля.
4. **Розробка безпечніших хімічних продуктів.** Хімічні продукти повинні бути ефективними, але з мінімальною шкідливістю.
5. **Безпечні розчинники та допоміжні речовини.** Де можливо, слід уникати використання допоміжних речовин (наприклад, органічних розчинників) або замінювати їх на безпечніші альтернативи.
6. **Енергоефективність.** Хімічні процеси повинні проводитися за мінімально можливих температур і тиску, щоб знизити витрати енергії.
7. **Використання відновлюваної сировини.** Сировина має бути відновлюваною (наприклад, біомаса), а не вичерпною (нафта, вугілля).
8. **Уникнення похідних продуктів (дериватизація).** Мінімізація використання блокуючих груп та захистів у синтезі, щоб зменшити кількість побічних реакцій.

9. **Каталіз.** Каталітичні реакції (як правило, селективніші та ефективніші) кращі за стехіометричні.

10. **Розкладність продуктів.** Хімічні продукти повинні розкладатися в довкіллі на нетоксичні компоненти, а не накопичуватися.

11. **Аналіз у реальному часі для запобігання забрудненню.** Потрібно використовувати методи моніторингу, щоб контролювати утворення небезпечних речовин під час процесу.

12. **Інтеграція безпечнішої хімії для запобігання аваріям.**

Використовувати речовини та форми їх застосування, що зменшують ризик витоку, вибухів та пожеж.

Зелений синтез – це метод хімічного синтезу, метою якого є зменшення впливу хімічних реакцій та методів на навколишнє середовище. Методи зеленого синтезу використовують рослинні екстракти, мікроорганізми або білки як біо-кепіруючі та біо-відновлювальні агенти, а також їхню роль як біо-нанофабрик для отримання біогенних наночастинок (НЧ). Зелена хімія наголошує на мінімізації небезпечних сполук, зменшенні відходів, що утворюються в традиційному органічному синтезі, та врахуванні впливу як виробництва, так і утилізації. З 2011 року впровадження методів зеленої хімії призвело до скорочення хімічних відходів на 27 %, при цьому значну роль відіграє покращена хімічна переробка. Ключові стратегії скорочення включають модифікацію процесу, усунення токсичних реагентів та зменшення кількості етапів, необхідних в органічному синтезі. Крім того, сталий синтез на основі зеленої хімії та виготовлення поверхонь наноматеріалів привернули увагу завдяки своїм чудовим каталітичним властивостям, легкості обробки, повторному використанню, економічній ефективності та біосумісності. Наприклад, металеві НЧ, синтезовані з рослинних екстрактів та відходів тваринного походження, набули популярності як біовідновлювачі для різних органічних перетворень. Фармацевтична промисловість все більше прагне до практик сталого хімічного процесу для виробництва сучасних ліків та покращення екологічності численних препаратів. У цьому огляді буде розглянуто, перш за все, кроки, концепції та методи, що є основоположними для зеленої хімії.

1. Профілактика

Краще запобігти утворенню відходів, ніж обробляти чи прибирати їх після їх утворення. Перший принцип, який часто називають принципом запобігання, є найважливішим, а інші принципи – це «як» його досягти.

Часто використовуваним показником відходів є E-фактор, описаний Роджером Шелдоном, який співвідносить вагу відходів, що утворюються одночасно, з вагою цільового продукту.

E-Factor (екологічний фактор) – це кількісний показник, який використовується в зеленій хімії для оцінки ефективності хімічного процесу з точки зору утворення відходів. Він визначається як співвідношення маси відходів до маси корисного продукту:

$$E \text{ Factor} = \frac{\text{Маса відходів}}{\text{Маса цільового продукту}}$$

Що враховується у відходах?

- Побічні продукти реакції
- Витрачені реагенти, розчинники, каталізатори
- Матеріали, використані для очищення (наприклад, фільтри, сорбенти)
- Вода та інші допоміжні речовини

Чим **нижчий** E-Factor, тим **ефективніший** і «зеленіший» процес:

E = 0 – ідеальний випадок (відсутність відходів)

E < 1 – дуже ефективний процес (мало відходів)

E > 50 – неефективний процес (багато відходів)

Типові значення E-Factor для різних галузей

Галузь промисловості	Середній E-Factor
Нафтохімія	< 0,1
Масові хімікати	1–5
Фармацевтика	25–100+

Зовсім недавно Фармацевтичний круглий стіл Інституту зеленої хімії ACS віддав перевагу масоємності процесу, яка виражає співвідношення ваги всіх матеріалів (води, органічних розчинників, сировини, реагентів, допоміжних речовин для процесу), що використовуються, до ваги виробленого активного лікарського інгредієнта (АЛІ). Це важливий фокус

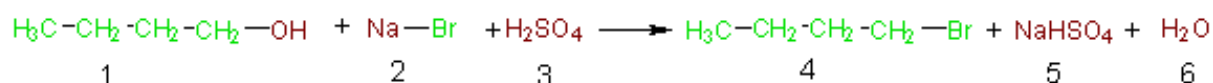
круглого столу через історично велику кількість відходів, що утворюються одночасно під час виробництва ліків – у багатьох випадках понад 100 кілограмів на кілограм АЛІ. Однак, коли компанії застосовують принципи зеленої хімії до розробки процесу АЛІ, часто досягається різке скорочення відходів, іноді до десятикратного. Тому важливо поширити результати, досягнуті ACS GCIPR, на всі сфери фармацевтичної промисловості, особливо на біофармацевтичний та генеричний сектори, а також на інші сектори хімічних підприємств, де для виробництва їхньої продукції використовується синтетична хімія.

2. Економія атомів

Методи синтезу повинні бути розроблені таким чином, щоб максимізувати включення всіх матеріалів, що використовуються в процесі, до кінцевого продукту.

Атомна економія, розроблена Баррі Тростом, ставить питання: «які атоми реагентів входять до складу кінцевого продукту(ів), а які атоми втрачаються?»

Традиційно ефективність реакції вимірювалася шляхом обчислення відсотка виходу. Припустимо, що наступна реакція заміщення дає 100 % вихід. Хоча це добре, ми можемо пролити більше світла на ефективність реакції, обчисливши «відсоток атомної економії» наступним чином:



% Атомна економія = (Поглиблена маса використаних атомів / Поглиблена маса всіх реагентів) · 100 = (137/275) · 100 = 50 %

Відсоток економії атомів – це просто формульна маса бажаного(их) продукту(ів) (сполука 4, 137 г/моль), поділена на суму формульних мас усіх реагентів (275 г/моль), що в цьому випадку дає 50 %. Простіше кажучи, навіть якщо наш відсотковий вихід становить 100 %, лише половина маси атомів реагентів «вбудовується» в бажаний продукт, тоді як інша половина витрачається на небажані побічні продукти. Уявіть, що ви кажете мамі, що спекли торт і викинули половину інгредієнтів! Таким чином, хіміки повинні не лише прагнути досягти максимального відсоткового виходу, але й розробляти синтез, який максимізує включення атомів реагентів у бажаний продукт.

Принцип № 2 стосується реагентів. Однак, як відомо, під час синтезу ми зазвичай використовуємо інші матеріали, такі як розчинники. Ці матеріали зазвичай складають основну частину вхідних матеріалів, тому ми також повинні враховувати відходи, які вони утворюють, що буде розглянуто в наступних Принципах зеленої хімії.

3. Відносно небезпечні хімічні синтези

Де це можливо, методи синтезу повинні бути розроблені таким чином, щоб використовувати та отримувати речовини, які мають незначну токсичність або взагалі не мають токсичності для здоров'я людини та навколишнього середовища.

Якщо подумати, це принцип, що складається з двох частин, розділений першими двома словами: «де це можливо». Вживання цих двох слів передбачає, що уникнути використання токсичних речовин може бути непрактичним або неможливим. Хіміки постійно використовують токсичні речовини, тому що реакційноздатні хімічні речовини забезпечують реакції, які є кінетично та термодинамічно сприятливими. І доки не будуть розроблені реагенти(розчинники)-замінники разом з новими протоколами синтезу, матеріали, що за своєю суттю токсичні, продовжуватимуть використовуватися.

Для хіміка-органіка в процесі синтезу важливим є лише успішне хімічне перетворення новим способом, з новою речовиною (молекулою) або в новому порядку. Цей принцип вимагає від хіміків розширити своє визначення того, що являє собою хороша наука.

Багато хто знову і знову доводив, що токсичність і пов'язані з нею небезпеки та ризики, обумовлені хімічною реакцією. Фактично, хімія або хімічне перетворення в синтезі зазвичай найменше впливає на загальний профіль токсичності (і більшість інших показників сталого розвитку та екологічності) продукту або процесу, за винятком тих випадків, коли ми навмисно виробляємо молекулу, яка є токсичною або біологічно активною за своєю природою. Це, безумовно, стосується багатьох сполук, які синтезуються у фармацевтичному, хімічному чи іншому виробництві – речовини є токсичними та/або мають інший вплив на живі організми за своєю природою.

Хімічні речовини та матеріали, що використовуються для здійснення хімічних перетворень, мають значення, і хімікам потрібно звертати більше уваги на вибір реагентів та розчинників. Легко не враховувати всі інші «речовини» та зосередити всю свою енергію на синтетичному шляху, який забезпечує бажаний продукт.

Час від часу хіміки справді створюють молекули, які мають токсичні або інші небезпечні ефекти, і наступний принцип стосуватиметься розробки безпечніших молекул.

4. Розробка безпечніших хімічних речовин

Хімічні продукти повинні бути розроблені таким чином, щоб зберігати ефективність функції та одночасно зменшувати токсичність.

Мінімізація токсичності при одночасному збереженні функціональності та ефективності може бути одним із найскладніших аспектів розробки безпечніших продуктів та процесів. Досягнення цієї мети вимагає розуміння не лише хімії, але й принципів токсикології та екологічної науки. Реакційноздатні хімічні речовини часто використовуються хіміками для виробництва продуктів, оскільки вони є досить цінними для впливу на молекулярні перетворення. Однак вони також більш схильні до реакції з небажаними біологічними мішенями, живими організмами та навколишнім середовищем, що призводить до небажаних побічних ефектів.

На сьогоднішній день розвиваються комплексна взаємодія між токсикологами та хіміками, яка зосереджена на навчанні наступного покоління вчених розробляти безпечніші хімічні речовини використовуючи цілісний та міждисциплінарний підхід. Галузь токсикології швидко розвивається, включаючи та застосовуючи досягнення молекулярної біології для розкриття механізмів токсичності. З'ясування цих шляхів служить відправною точкою для формулювання правил проектування, необхідних хімікам, щоб керуватися своїм вибором у прагненні створювати безпечніші хімічні речовини.

5. Безпечні розчинники та допоміжні речовини

Використання допоміжних речовин (наприклад, розчинників) має бути по можливості виключено або бути нешкідливим.

Розчинники всіх видів мають велике значення для хімії, не кажучи вже про хімічний процес та загальну «зеленість» реакції. У багатьох випадках реакції не проходитимуть без розчинників. Твердження, що вони не мають значення, або що важлива лише хімія, є не просто логічною помилкою, це хімічно неправильно. Також було показано, що розчинники становлять 50-80% маси у стандартній хімічній операції періодичного циклу залежно від того, чи додається вода, чи ні. Більше того, розчинники становлять близько 75% сукупного впливу на навколишнє середовище протягом життєвого циклу стандартної хімічної операції періодичного циклу.

Розчинники також споживають більшу частину енергії в процесі. Розчинники по черзі нагрівають, дистилюють, охолоджують, перекачують, змішують, переганяють у вакуумі, фільтрують тощо. І це ще до того, як вони можуть бути перероблені або ні. Якщо їх не переробляють, їх часто спалюють.

Розчинники також є основними факторами, що впливають на загальний профіль токсичності, вони викликають найбільше занепокоєння щодо питань безпеки процесу, оскільки вони є легкозаймистими та леткими або за певних умов вибухонебезпечними. Вони також зазвичай потребують використання засобів індивідуального захисту того чи іншого виду.

Отже, мета полягає у виборі розчинників, які мають хімічний сенс, зменшують потреби в енергії, мають найменшу токсичність, найменший вплив на навколишнє середовище протягом циклу використання та не мають значного впливу на безпеку.

6. Енергоефективність

Потреби в енергії слід враховувати з огляду на їхній вплив на навколишнє середовище та економіку, і їх слід мінімізувати. Синтетичні методи слід проводити за кімнатної температури та тиску.

Серед хіміків, що займаються органічним синтезом, температура чи тиск не враховуються. Хімік просто дотримується протоколу, щоб реакція пройшла до завершення та призвела до одержання цільового продукту з

якогомога вищим виходом. Енергія, з точки зору хіміка, не має значення і, по суті, безкоштовна. Просто вставте вилку в розетку або нагрівальну спіраль навколо колби, або дістаньте рідкий азот із посудини Дьюара.

Енергія та залучення хіміків до роздумів про енергію – це набагато більше, ніж просто намагання проводити реакції за кімнатної температури та тиску. Самі реакції рідко є такими, на які використовується більша частина енергії; більша частина використовується на видалення розчинника для підготовки до наступної реакції, або на видалення одного розчинника та заміну його іншим, або на виділення бажаного продукту, або на видалення домішок.

7. Використання відновлюваної сировини

Сировина повинна бути відновлюваною, коли це технічно та економічно доцільно, а не вичерпною.

Концепція виробництва всіх наших майбутніх видів палива, хімікатів та матеріалів із сировини, яка ніколи не вичерпується, є цікавою, але на перший погляд здається непрактичною. Людство зараз видобуває викопне паливо, вугілля, нафту та природний газ із землі та видобуває корисні копалини заради прибутку, доки вони не вичерпаються. Зокрема, наші запаси викопного палива для отримання хімічних речовин та матеріалів на основі вуглецю швидко виснажуються передбачуваним чином з очікуваним зростанням населення світу та розширенням енергоємних економік на кількох континентах. Вплив на здоров'я людини та навколишнє середовище є значним і ставить перед нашими вченими та лідерами серйозні виклики в наступні 50 років.

Чи можемо ми вирішити ці глобальні проблеми, використовуючи принцип зеленої хімії № 7? Так, теоретично це можливо. Наприклад, карбон у повітрі знаходиться у формі вуглекислого газу CO_2 та метану CH_4 . В природі щорічно утворюється приблизно 170 мільярдів тонн рослинної біомаси, з яких зараз використовується близько 3,5% для потреб людини. За оцінками, для повного створення біоекономіки потрібно близько 40 мільярдів тонн біомаси, або близько 25% річного виробництва. Технічна проблема використання такої відновлюваної сировини полягає в розробці низькоенергетичних, нетоксичних шляхів перетворення біомаси на корисні

хімічні речовини. В ідеалі, при використанні Принципу № 7, усі вуглецеві сліди за проектом повинні бути позитивними, щоб $C_{(вх\ddot{и}д)} \gg C_{(вих\ddot{и}д)}$. Це природним чином призводить до зменшення викидів газів, що спричиняють глобальне потепління, які впливають на нинішню зміну клімату.

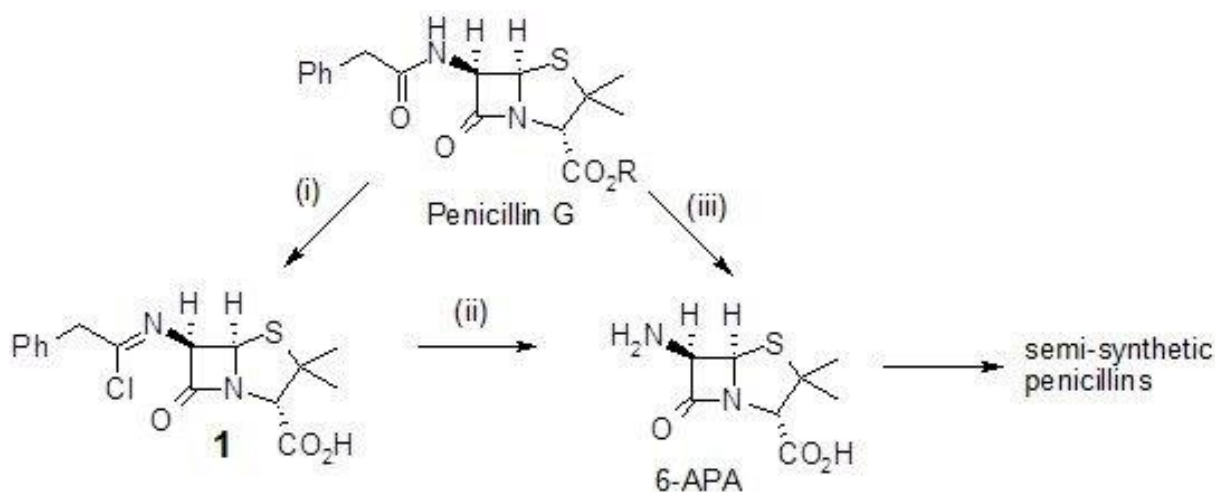
За останні 10 років було досягнуто значного прогресу в розробці палива, хімічних речовин та матеріалів з відновлюваної сировини. Наприклад, це біодизель з рослинних олій та водоростей, біоетанол та бутанол з цукрів та лігноцелюлози, пластмаси, полімерні матеріали з лігніну та рослинних олій.

8. Зменшення кількості похідних продуктів (дериватизація)

Непотрібну дериватизацію (використання блокуючих груп, захист/зняття захисту, тимчасову модифікацію фізичних/хімічних процесів) слід мінімізувати або, якщо можливо, уникати, оскільки такі кроки вимагають додаткових реагентів і можуть призвести до утворення відходів.

Один з ключових принципів зеленої хімії полягає у зменшенні використання дериватизації. Одним з способів досягнення мети цього принципу є використання ферментів. Прикладом використання ферментів для уникнення застосування захисних груп та процесів очищення є промисловий синтез напівсинтетичних антибіотиків, таких як ампіцилін та амоксицилін.

Спочатку пеніцилін G ($R=H$) переводять у його силіловий естер $[R=Si(Me)_3]$, котрий взаємодіє з PCl_5 із утворенням хлорімідату 1, подальший гідроліз якого дає бажаний 6-АПА, з якого в подальшому виробляють напівсинтетичні пеніциліни.

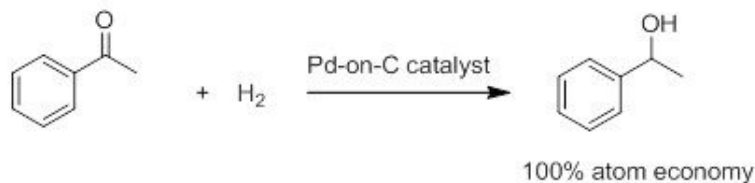
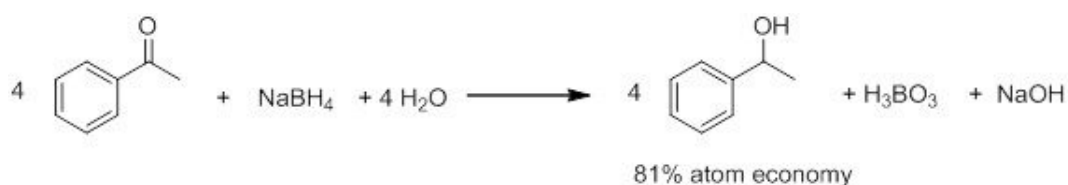


Цей синтез був значною мірою замінений новішим ферментативним процесом з використанням пенацилази. Цей синтез відбувається у воді за температури трохи вище кімнатної. Новий метод синтезу має низку переваг з екологічної точки зору, однією з яких є те, що силільна захисна група не потрібна.

9. Каталіз

Каталітичні реагенти (наскільки це можливо селективні) перевершують стехіометричні реагенти.

Основною метою зеленої хімії є мінімізація або, бажано, усунення відходів у виробництві хімічних речовин та суміжних продуктів. Це вимагає зміни парадигми в концепції ефективності органічного синтезу від тієї, яка зосереджена на хімічному виході, до тієї, яка надає значення мінімізації відходів. У чому причина відходів? Ключ полягає в концепції атомної економії: *«синтетичні методи повинні бути розроблені таким чином, щоб максимізувати включення всіх матеріалів, що використовуються в процесі, в кінцевий продукт»*. У схемі реакції ми порівнюємо, наприклад, відновлення кетону до відповідного вторинного спирту з використанням натрій боргідриду або молекулярного водню як відновника. Відновлення за допомогою першого має атомну економію 81 %, тоді як відновлення за допомогою другого є 100 % атомно-економічним, тобто все потрапляє в продукт і, в принципі, немає відходів.



Проте, водень за нормальних умов не реагує з кетонами. Для цього потрібен каталізатор, наприклад паладій нанесений на вугіллі. Дещо спрощуючи, каталізатор знижує енергію активації реакції, але при цьому не витрачається. Це означає, що, його можна використовувати в невеликих кількостях і регенерувати. Більше того, молекулярний водень також є найменш дорогим відновником, і з цієї причини каталітичне гідрування широко застосовується в нафтохімічній промисловості, де використання інших відновників зазвичай не є економічно вигідним. Однак лише в останні два десятиліття, після появи зеленої хімії, каталіз широко застосовується у фармацевтичній та тонкій хімічній промисловості з метою мінімізації кількості відходів, що утворюються внаслідок використання стехіометричних реагентів. Це передбачає використання всього спектру каталізу: гетерогенних, гомогенних органокаталізаторів і, останнім часом, ферментів. Останні особливо ефективні для каталізу високоселективних процесів зі складними субстратами за м'яких умов і, отже, знаходять широке застосування у фармацевтичній та суміжних галузях промисловості. Крім того, очікується, що вони відіграватимуть важливу роль у переході від хімічної промисловості, що базується на невідновлюваних викопних ресурсах, до більш стійкої біоекономіки, що використовує відновлювану біомасу як сировину.

10. Розкладність продуктів

Хімічні продукти повинні бути розроблені таким чином, щоб після завершення своєї функції вони розкладалися на нешкідливі продукти розпаду та не залишалися в навколишньому середовищі.

Принципи зеленої хімії 3, 4, 5 та 12 допомагають розробникам зменшувати небезпеку хімічних речовин. Однак Принцип 10 керує

розробкою продуктів, які розкладаються після завершення своєї комерційної функції, щоб зменшити ризик або ймовірність виникнення шкоди. Ризик є функцією небезпеки, властивій певній сполучі. Розкладання може усунути значний вплив, тим самим мінімізуючи ризик незалежно від небезпеки самої хімічної речовини.

Вплив стійких хімічних речовин може бути значним в результаті глобального розсіювання, що здійснюється завдяки таким властивостям, як леткість або сорбція, та розподілу в організмах на основі таких властивостей, як розчинність у жирах. Регуляторні органи встановили критерії (період напіврозпаду у воді, ґрунті, повітрі), які визначають стійкість у рамках, що використовуються для ідентифікації хімічних речовин як СБТ (стійкі, біоакумулятивні, токсичні).

Здатність до біодеградації, гідролізу та фотолізу можуть бути використані для поліпшення розкладу речовин. Методи прогнозування, які можуть допомогти у розробці молекулярної архітектури, що, як очікується, деградуватиме, включають емпіричні правила, що пов'язують структурні особливості з біорозкладністю або стійкістю, бази даних існуючих знань, моделі, що оцінюють біорозкладність та експериментальні випробування. Всі ці інструменти можна адаптувати до окремих хімічних секторів та конкретних цілей.

Розуміння очікуваних шляхів вивільнення та транспортування хімічної речовини впливає на вибір ефективної стратегії проектування. Наразі існують інструменти, що дозволяють реалізувати Принцип № 10, але прогрес у механістичному розумінні, що пов'язує молекулярні особливості з небезпеками та біорозкладністю, дозволить більш комплексно застосовувати зелену хімію для контролю небезпек та ризиків. Інструменти прогнозного прийняття рішень повинні забезпечувати впевненість щодо небезпек та ризиків таким чином, щоб це узгоджувалося з часом та масштабом рішень щодо розробки, і, найголовніше, при цьому все ще існує гнучкість для зміни молекулярного дизайну або рецептури продукту.

11. Аналіз у режимі реального часу для запобігання забрудненню

Аналітичні методології потребують подальшого розвитку, щоб забезпечити моніторинг та контроль у режимі реального часу під час процесу до утворення небезпечних речовин.

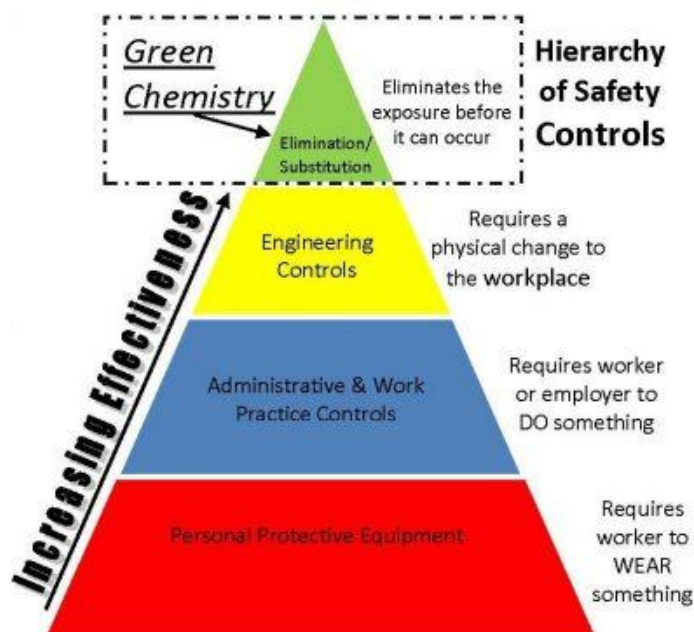
Більшість хіміків знайомі з лабораторним аналізом зі свого навчання. Але аналіз також може проводитися в потоковому режимі, онлайн або на потоковому режимі на хімічному заводі. Такий аналіз може виявити зміни температури процесу або рН до того, як реакція вийде з-під контролю, визначити отруєння каталізаторів, а інші шкідливі події виявити до того, як станеться серйозний інцидент.

Аналіз процесів має таке важливе значення, що Управління з контролю за продуктами харчування та лікарськими засобами США заохочує такий підхід до виробництва, проектування та контролю фармацевтичного виробництва. Хоча традиційні ролі аналітичної хімії також сприяють досягненню цілей зеленої хімії, ефективне застосування процесної аналітичної хімії безпосередньо сприяє безпечній та ефективній роботі хімічних заводів у всьому світі.

12. Безпечніша хімія для запобігання нещасним аваріям

Речовини та форма речовини, що використовуються в хімічному процесі, повинні бути обрані таким чином, щоб мінімізувати потенціал хімічних аварій, включаючи викиди, вибухи та пожежі.

Безпеку можна визначити як контроль розпізнаних небезпек для досягнення прийнятного рівня ризику. Принцип зеленої хімії № 12 відомий як «Принцип безпеки». Він може бути найбільш недооціненим з дванадцяти принципів, проте він є логічним результатом багатьох інших принципів, що практично неможливо досягти цілей Принципу № 12 без впровадження принаймні одного з інших. Оскільки сама суть зеленої хімії полягає в тому, щоб «...зменшити або усунути використання чи утворення небезпечних речовин», існує невід'ємний зв'язок з безпекою лабораторій. Хоча є кілька винятків, більшість Принципів зеленої хімії призведуть до сценарію, який також є безпечнішим.



Під егідою Агентства з охорони навколишнього середовища (EPA) основна увага «Зеленої хімії» приділяється підвищенню безпеки довкілля. Матеріали та процеси, безпечніші для довкілля, ймовірно, також будуть безпечнішими для широкої громадськості. Однак, ще однією групою населення, яка отримує користь від «зеленої» хімії, але про яку не часто згадують, є працівники. Працівник виробництва або лабораторії часто є першим працівником, який отримує користь від зниження небезпеки.

Питання здоров'я та безпеки працівників перебувають у компетенції Управління з охорони праці та здоров'я (OSHA). У нещодавньому прес-релізі OSHA представила систему управління хімічними речовинами, розроблену для підвищення безпеки працівників. Ієрархія засобів контролю безпеки, як зазначено в новому Інструментарії переходу OSHA до безпечніших хімічних речовин, ілюструє різницю між зосередженням на контрольній або небезпечній частині визначення безпеки. Традиційні моделі хімічної безпеки зосереджені переважно на контрольній складовій цього визначення. Графіка (адаптована з OSHA) показує, що найефективнішим засобом підвищення безпеки є усунення небезпечної складової. Оскільки усунення небезпек є основним принципом зеленої хімії, це поєднання ідей зеленої хімії як OSHA, так і EPA має мати синергетичний вплив на зниження небезпечних факторів.

II. ЗЕЛЕНА АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

Концепція зеленої аналітичної хімії (GAC) значно еволюціонувала від її першої появи в 1995 році до офіційної публікації дванадцяти принципів GAC у 2013 році. Спочатку GAC була запропонована як проста ідея хіміками, які прагнули інтегрувати сталий розвиток у сферу аналізу. З часом вона перетворилася на добре утверджену галузь інтересів із міцною основою фундаментальних теорій та численними практичними досягненнями. Однак інтеграція сталого розвитку в аналітичну хімію не була такою гладкою чи прямолінійною, як спочатку очікувалося.

На початку XX століття екологічний вплив та небезпека для здоров'я, пов'язані з аналітичною хімією, були значною мірою невизнаними. Лише ближче до кінця століття зростання кількості повідомлень про екологічну шкоду та нещасні випадки, пов'язані з безпекою в аналітичних роботах, підкреслило той факт, що сам аналітичний процес може бути таким же шкідливим, як і аналіз токсичних речовин. Хоча концепція сталого розвитку поступово проникла в усі галузі хімії з 1995 року, хіміки на ранніх стадіях в основному зосереджувалися на застосуванні принципів сталого розвитку до промислового хімічного виробництва, включаючи виробництво сировини та виробництво продукції. Отже, найдавніші концепції зеленої хімії, включаючи дванадцять принципів, представлених у 1998 році, були значною мірою спрямовані на синтетичну хімію. Однак, оскільки розуміння екологічних проблем поглиблювалося, широке використання токсичних реагентів та розчинників в аналітичних процесах, а також шкода, спричинена цими методами, спонукали хіміків визнати важливість екологізації аналітичної хімії. У відповідь на це почала зростати література, що досліджує принципи та методи GAC. Спираючись на роботу таких дослідників як Намєснік, Кальюранд та де ла Гуардія, Галушка та ін. переглянули та адаптували початкові дванадцять принципів, щоб краще відповідати потребам GAC у 2013 році. Сьогодні принципи та методи GAC є невід'ємною частиною розробки та застосування аналітичних методів, і хіміки все частіше включають їх у свою роботу, щоб відповідати сучасним вимогам охорони навколишнього середовища, екологічної стійкості та зеленої безпеки.

У сучасній аналітичній науці, особливо в галузі екологічного аналізу, вибір інструментів має вирішальне значення для розробки методу. Однак, оскільки аналітична хімія розширюється в більш різноманітні галузі,

використання звичайної мас-спектрометрії (МС) у таких галузях, як виявлення слідів вибухових речовин та наркотиків, моніторинг навколишнього середовища та клінічна діагностика в реальному часі, обмежене. Традиційні мас-спектрометри є великими, енергоємними та нерухомими, що вимагає спеціалізованих лабораторій для аналізу. Більше того, широке використання реагентів та тривалі процеси підготовки зразків ще більше обмежують їх застосування в аналізах на місці, в реальному часі та експрес-аналізах. Крім того, з точки зору GAC, традиційний процес мас-спектрометричного аналізу також суперечить пропаганді локального, простого, прямого, швидкого та нетоксичного захисту навколишнього середовища. Як наслідок, екологізація мас-спектрометрії спочатку була складною та повільною.

Однак, аналіз зразків у цих галузях вимагає більше, ніж просто мініатюрний мас-спектрометр. Додаткові технології, включаючи досягнення в мініатюрних джерелах іонів, нові інтерфейси джерел іонів та спрощені методи підготовки зразків, мають вирішальне значення для успішного застосування мініатюрної мас-спектрометрії (МС). Справжня революція відбулася з інтеграцією методів іонізації навколишнього середовища з мініатюрною МС. Іонізація навколишнього середовища дозволяє здійснювати пряму іонізацію зразків при атмосферному тиску, усуваючи необхідність складної підготовки зразків та полегшуючи аналіз газів, рідин та твердих поверхонь у режимі реального часу.

Поєднання мініатюрної мас-спектрометрії (МС) та іонізації навколишнього середовища ідеально узгоджується з принципами GAC (газової хімії) – дозволяє проводити прямий аналіз, вимагає меншої кількості зразків, працює в режимі реального часу, мінімізує або повністю виключає використання розчинників, сприяє мініатюризації, зменшує кількість відходів, економить енергію, а також підвищує зручність і швидкість. Це потужне поєднання швидко стає важливим інструментом у галузі GAC, привертаючи все більшу увагу хіміків. Ця стаття зосереджена на зелених аспектах мініатюрної МС, зокрема на значних перевагах зеленої хімії, що виникають внаслідок її поєднання з іонізацією навколишнього середовища, та досліджує відповідні застосування цього підходу.

GAC стала галуззю аналітичної хімії, яку не можна ігнорувати, і дванадцять принципів GAC дедалі частіше включаються хіміками як керівні принципи в розробці та застосуванні аналітичних методів. Ці принципи зберігають чотири з початкових дванадцяти принципів зеленої хімії:

1. Запобігання утворенню відходів;
2. Безпечніші розчинники та допоміжні речовини;
3. Проектування для енергоефективності;
4. Зменшення дериватизації.

Окрім цих чотирьох принципів, Галушка та ін. запровадили вісім нових принципів, спеціально розроблених для GAC, що призвело до створення комплексного набору з дванадцяти принципів, як показано на рис. 1.

Загалом, ці принципи екологізації наголошують на:

- (1) зменшенні споживання, будь-то реагентів, енергії чи зразків;
- (2) спрощенні процедур, таких як прямий аналіз, аналізи *in situ* або комплексна обробка зразків;
- (3) управлінні відходами, як з точки зору утворення, так і утилізації;
- (4) питаннях безпеки, включаючи підвищення безпеки дослідників, які ними користуються, та заміну токсичних реагентів екологічно чистими розчинниками тощо.

Різні команди розробили власні деконструкції цих принципів, що поглибило їхнє розуміння GAC, водночас забезпечивши чіткіший напрямок для екологізації аналітичних методів.

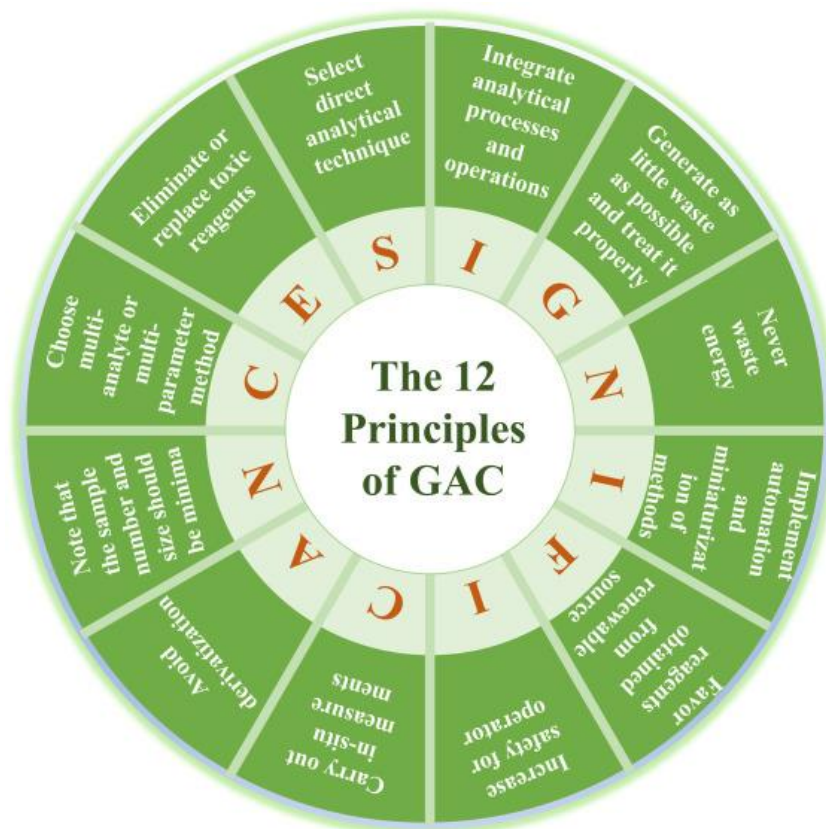


Рис. 1. 12 принципів GAC

Визначення того, чи відповідає аналітичний метод дванадцяти принципам GAC, є одним із важливих питань, що впливають на те, чи може GAC бути широко поширеним. Таким чином, встановлення розумних показників екологічної оцінки є важливим завданням у сфері GAC. Протягом останнього десятиліття такі показники були розроблені та продовжують розвиватися.

В аналітичних процедурах показники «зеленості» зазвичай призначені для оцінки впливу на навколишнє середовище методів, що використовуються для виявлення, кількісної оцінки або характеристики хімічних речовин. Термін «зеленість» стосується впливу в рамках критеріїв охорони навколишнього середовища, здоров'я та безпеки. Ці показники зосереджені на таких факторах, як вибір розчинника, мінімізація реагентів, скорочення відходів та енергоефективність, відповідно до 12 принципів зеленої аналітичної хімії (GAC). З іншого боку, в контексті хімічних процесів показники зеленості мають ширший фокус, охоплюючи такі аспекти, як ефективність реакції, атомна економія, використання відновлюваної сировини та оцінка життєвого циклу, відповідно до 12 принципів зеленої хімії. Щоб уникнути плутанини, рекомендується називати показники, пов'язані з GAC, інструментами метрик GAC, щоб відрізнити їх від інших показників зеленості.

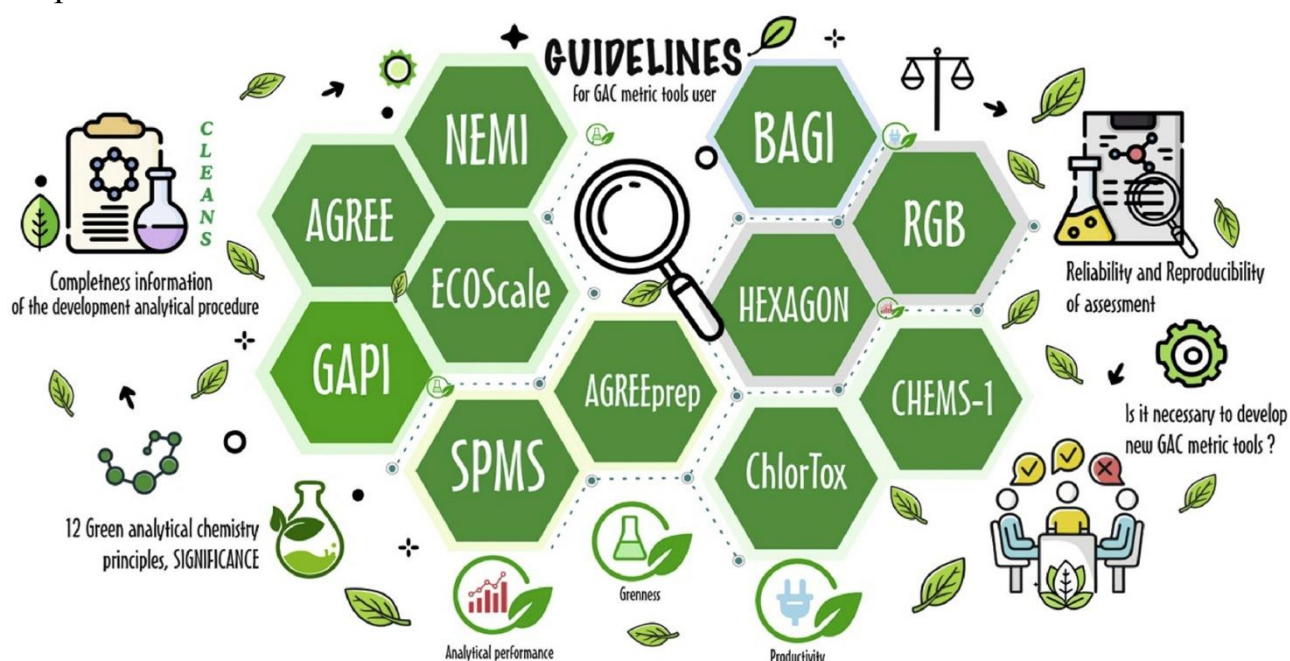


Рис. 2. Методи визначення «зеленості» методики

Одним із найстаріших інструментів GAC, представлених Кітом та ін. у 2007 році, є Національний індекс екологічних методів (NEMI). Він

представлений колом, розділеним на чотири частини, що стосуються використання стійких, біоаккумулятивних та токсичних реагентів, їхньої небезпечної природи, корозійної дії та відходів. Кожна секція може бути зеленою, що вказує на більш екологічний метод, або залишеною порожньою, що сигналізує про відсутність екологічності. Це простий, якісний інструмент, який надає фундаментальну інформацію про шкідливість процедури. П'ять років по тому Галушка та ін. запропонували ще один показник під назвою Аналітична екошкала (**AES**). Цей інструмент базується на штрафних балах, що призначаються за використання токсичних реагентів, утворення відходів та високе споживання енергії. Подібно до NEMI, AES характеризується своєю простотою; однак, він надає напівкількісну інформацію про шкідливий вплив аналітичного методу. Щоб більше зосередитися на екологічності реагентів та розчинників, що застосовуються в аналітичних процедурах, Тобішевський та Намешнік запропонували у 2015 році інструмент **CHEMS-1**. Ця модель використовує токсикологічні дані та дані про експозицію, що містяться в паспортах безпеки, для розрахунку значень небезпеки, пов'язаної з використанням розчинників. CHEMS-1 може бути особливо корисним, коли розчинники вибираються на ранніх стадіях розробки процедури.

Для проведення більш комплексної оцінки, враховуючи екологічність усієї аналітичної процедури від збору зразків до остаточної кількісної оцінки, Плотка-Василка представила інструмент «Індекс зеленої аналітичної процедури» (**GAPI**) у 2018 році. Щоб отримати результат щодо впливу методу на навколишнє середовище, необхідно використовувати програмне забезпечення, яке генерує піктограму з п'яти пентаграм та шкалу на основі зеленого, жовтого та червоного кольорів. Зелена, жовта та червона кольорові шкали використовуються в GAPI для позначення низького, середнього та високого впливу аналітичної процедури на навколишнє середовище відповідно. Як корисний напівкількісний показник «зеленості», GAPI є простим, охоплює багато аспектів аналітичного процесу та може бути використаний для оцінки «зеленості» всього аналітичного процесу, що робить його більш поширеним інструментом оцінки «зеленості».

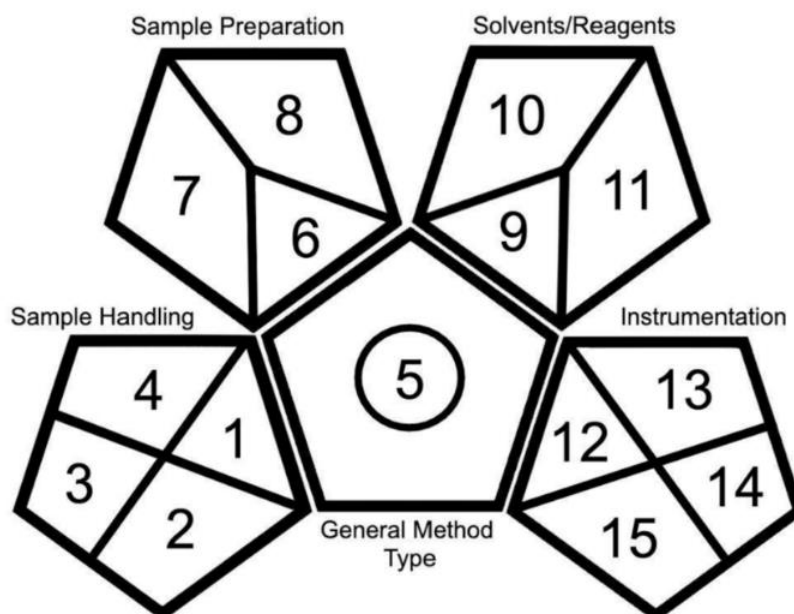


Рис. 3. Приклад оцінки методики за GAPI

Через рік було розроблено два складніших інструменти оцінки «зеленості». Один з них, модель **RGB**, запропонована Новаком та Косцельняком, призначена для оцінки аналітичних методів за допомогою кольорів: червоний для аналітичної продуктивності, зелений для відповідності принципам «зеленої» хімії та синій для практичної ефективності.

Таким чином, кінцевий результат враховує екологічні та якісні аспекти. Другий інструмент оцінки, під назвою «**Hexagon**», був запропонований Баллестер-Коде та ін. для оцінки аналітичних методів на основі таких критеріїв як аналітична продуктивність, сталий розвиток, вплив на навколишнє середовище та економічні витрати з використанням штрафних балів, які за припущеннями подібні до аналітичного екомасштабу. Однак результати візуалізуються на шестикутній піктограмі для легкого та швидкого порівняння, що пропонує орієнтир для вибору методів, що відповідають ГАС, одночасно балансує продуктивність, безпеку та економічну ефективність.

У 2020 році Пенья-Перейра та ін. розробили Аналітичний калькулятор зеленості (**AGREE**). Цей інструмент безпосередньо базується на 12 принципах ГАС, кожному з яких присвоюється певна вага. AGREE використовує кольорову шкалу – червоний, жовтий та зелений – для відображення рівня зеленості в даному методі. Використовуючи програмне забезпечення, генерується піктограма, схожа на годинник, яка відображає кінцевий бал аналітичного методу від 0 до 1. Кожному принципу можна

призначити різні ваги, а кінцева оцінка відображає загальну оцінку. AGREE може застосовуватися до різних аналітичних методів та адаптуватися для конкретних цілей оцінки, забезпечуючи цінний інструмент для оцінки існуючих аналітичних методів. Цей підхід є комплексним, гнучким, простим в інтерпретації, пропонуючи чіткі та інформативні результати.

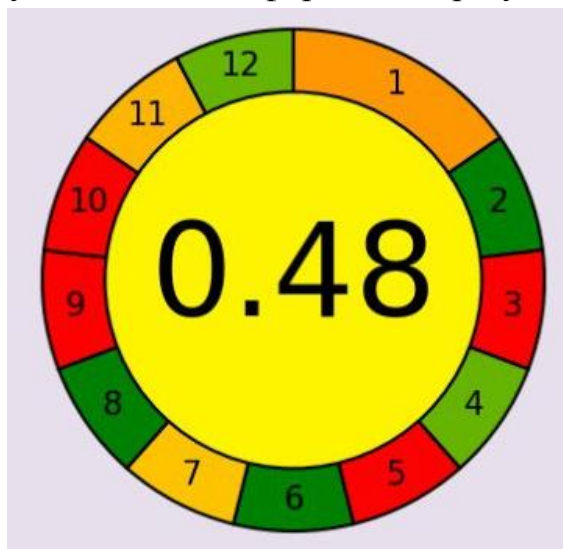


Рис. 4. Приклад оцінки методики за AGREE

Щоб звернути особливу увагу на етап підготовки зразків, який часто є найбільш ресурсомісткою частиною аналітичного процесу, програмне забезпечення **AGREEprep** було розроблено два роки тому. Цей інструмент оцінює вплив методів підготовки зразків на навколишнє середовище та сприяє більш сталим підходам.

Оскільки інтерес до інструментів для оцінки екологічності аналітичних методів зріс, у 2023 році було представлено три помітні інструменти. Один з них, інструмент «Метрика сталості підготовки зразків» (**SPMS**), представлений Гонсалесом-Мартіном та ін., призначений для оцінки екологічності методу екстракції. Цей показник оцінює дев'ять параметрів за чотирма категоріями – зразок, екстрагент, інформація про процедуру та споживання енергії з утворенням відходів. На основі графіка **SPMS** відображає результати екологічності для ключових параметрів підготовки та загальну оцінку цього етапу в рамках аналітичної процедури. Інший інструмент – індекс потреби, якості та сталості (**NQS**)– був запропонований Грудпаном та ін. Застосування індексу **NQS** вказує на те, що природні реагенти покращують аналітичні процедури, особливо з точки зору потреби та сталості. Як інструмент оцінки, індекс **NQS** може допомогти

в розробці аналітичних методів, що відповідають соціальним потребам, покращують аналітичну ефективність та сприяють глобальній сталості.

Іншим методом оцінки є шкала оцінки токсичності хлороформного еквіваленту (шкала **ChlorTox**), розроблена Новаком та ін. Вона забезпечує простий спосіб оцінки ризику шляхом вимірювання токсичності реагентів, що використовуються в аналітичному методі. Це виконується шляхом порівняння досліджуваної речовини з хлороформом як еталонною речовиною. Як і інструмент CHEMS-1, ChlorTox зосереджується виключно на шкідливості реагентів та розчинників.

Синій індекс ступеня застосовності (**BAGI**), запропонований Манусі та ін., розглядається як доповнення до «зеленої метрики» – нового метричного інструменту для оцінки корисності аналітичних методів, який запроваджено у 2023 році. Цей інструмент оцінює десять ключових атрибутів. Результати оцінки представлені візуально за допомогою піктограм астероїдів з відповідними балами. Для представлення кінцевого балу використовується безперервна синя шкала, де дискретні відтінки темно-синього, синього, світло-синього та білого кольорів вказують на високий, середній, низький рівень та невідповідність встановленим критеріям відповідно. Оцінюючи десять ключових атрибутів, таких як тип аналізу, пропускна здатність зразка, використання реагентів та автоматизація, програмне забезпечення BAGI генерує піктограму синього кольору разом з оцінкою в межах шкали від 25 до 100 балів, що дозволяє користувачам порівнювати різні методи та визначати їхні практичні сильні та слабкі сторони.

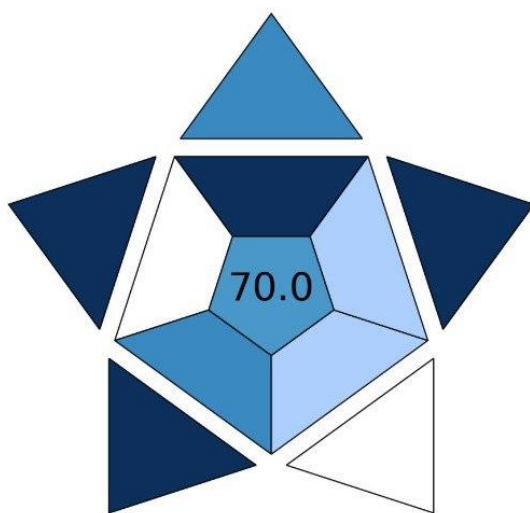


Рис. 5. Приклад оцінки методики за BAGI

Підготовка зелених зразків (ПЗЗ) є ключовим компонентом зеленої аналітичної хімії, що керується 10 принципами ПЗЗ, які наголошують на зменшенні використання розчинників, мінімізації відходів, підвищенні енергоефективності та пріоритеті безпечніших, сталих альтернатив. Однак часто виникає неоднозначність щодо ролі синтезу матеріалів в оцінках за допомогою метричних інструментів GAC. Синтез матеріалів загалом належить до ширшої сфери зеленої хімії, оскільки він зосереджений на розробці та виробництві матеріалів з мінімальним впливом на навколишнє середовище відповідно до таких принципів як атомна економіка, запобігання утворенню відходів та використання відновлюваної сировини.

Метричні інструменти, в першу чергу, оцінюють екологічність матеріалів, що використовуються в аналітичних процедурах, а не складність чи сталість процесу синтезу матеріалів. Наприклад, у метричному інструменті BAGI синтез матеріалів розглядається в розділі 7: Реагенти та матеріали, де розрізняється, чи матеріал синтезований, чи комерційно доступний. Аналогічно, метричний інструмент AGREE розглядає синтез матеріалів у розділі 10: Перевага реагентів, отриманих з відновлюваних джерел, класифікуючи, чи отримані вони з відновлюваних джерел, чи ні. Однак, при застосуванні метрик для оцінки аналітичних процедур обсяг використаних матеріалів та відходи, що утворюються під час процесу синтезу, зазвичай виключаються з розрахунку. Основною метою метрик GAC є екологічність самого аналітичного процесу, тоді як вплив синтезу матеріалів на навколишнє середовище розглядається в ширшому контексті зеленої хімії.

Дослідники дедалі частіше використовують метричні інструменти, демонструючи зростаючий ентузіазм щодо їх застосування в порівняльних дослідженнях. Ці інструменти успішно використовуються для порівняння визначення різних аналітів, що сприяє оцінці більш екологічних та сталих аналітичних практик. Зростаюча кількість публікацій використовує GAC та пов'язані з ним метричні інструменти для оцінки сталості та ефективності аналітичних процедур.

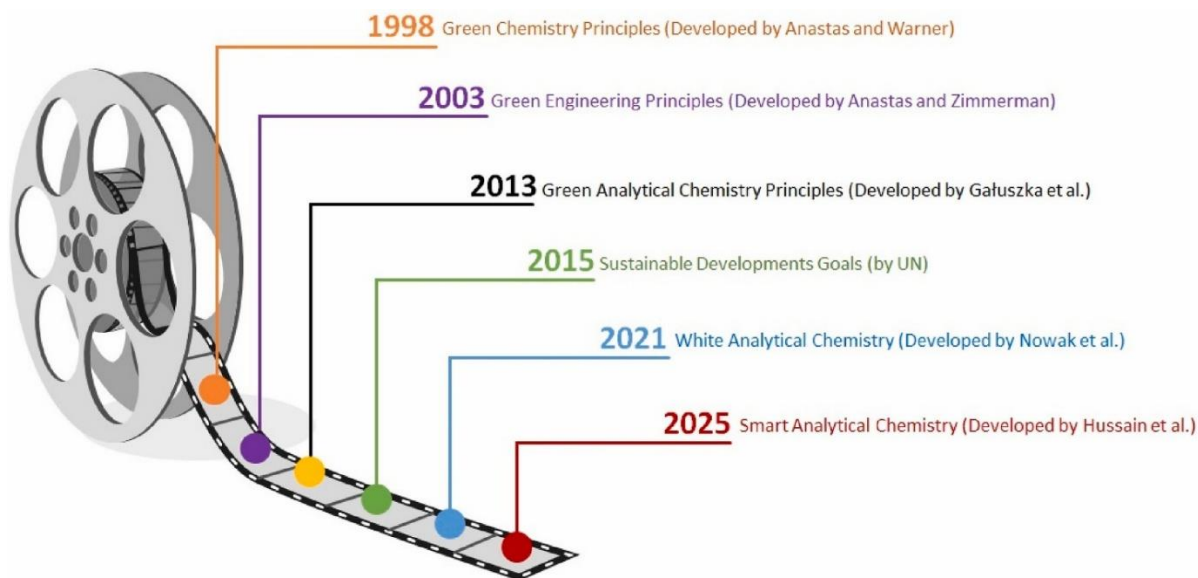
Незважаючи на розробку багатьох метричних інструментів, найчастіше в порівняльних дослідженнях використовуються Eco-Scale, GAPI, AGREE та BAGI. Це ставить питання про необхідність подальшого розвитку нового GAC та пов'язаних з ним метричних інструментів. Порівняльні дослідження показали, що повторні оцінки, проведені як оригінальними авторами, так і рецензентами, часто дають різні результати,

що викликає занепокоєння щодо відтворюваності оцінок. Крім того, в деяких дослідженнях ці інструменти застосовувалися неправильно або непрактичним чином, що ставить під сумнів їхню надійність.

Принципи GAC суттєво вплинули на розвиток аналітичних методів, що зменшують вплив на навколишнє середовище. Хоча екологічно чисті аналітичні методи не є універсально обов'язковими, зростаюче усвідомлення потенційних небезпек, пов'язаних з традиційними методами, спонукало до інтеграції більш стійких практик.

III. РОЗУМНА АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

Хуссейн та ін. запропонували новий підхід до «зеленої» хімії.



Розумна аналітична хімія – це новий та міждисциплінарний підхід, який поєднує ключові особливості та принципи зеленої аналітичної хімії, сталої аналітичної хімії, а також білої аналітичної хімії разом з низкою нових технологій, включаючи штучний інтелект, автоматизацію та мініатюрні платформи. Розумна аналітична хімія перетворює традиційні аналітичні методи та процеси на розумні, стійкі, ефективні, чутливі, портативні та потужні платформи, які відповідають сучасним науковим та промисловим потребам. Завдяки інтеграції екологічно чистих та стійких практик за допомогою передових підходів, заснованих на даних, Розумна аналітична хімія забезпечує значне покращення аналітичної продуктивності, зменшує споживання ресурсів та енергії, а також сприяє сталому розвитку в різних галузях науки (наприклад, моніторинг навколишнього середовища, безпека харчових продуктів, біомедичні діагностичні платформи та судова наука).

Сьогодні аналітична хімія використовує передові технології та нові методи для виконання робіт, що виходять за рамки класичних методів тестування. Цифрові лабораторні методи тепер дозволяють вченим використовувати сучасні прилади, які вимірюють хімічний склад за допомогою спектроскопічного, хроматографічного та електрохімічного обладнання. Сучасні технології обробки даних, що працюють разом з оновленими приладами, дозволяють вченим вимірювати та знаходити речовини з більшою точністю, ніж будь-коли раніше. Інтеграція технології

штучного інтелекту (ШІ) та машинного навчання (МН), підмножини технології ШІ, яка зосереджена на алгоритмах, що навчаються на даних, тепер допомагає вченим приймати кращі рішення, оскільки ці системи аналізують шаблони даних та автоматизують процеси.

Дослідники розробили три передові підходи до аналітичної хімії, зосереджені на сталому розвитку та екологічності. Науковий прогрес у *зеленій аналітичній хімії GAC* полягає в турботі про довкілля. Підходи на основі GAC економлять енергію та працюють з нешкідливими матеріалами для підтримки екологічно свідомої лабораторної роботи. Завдяки GAC екологічні робочі місця в усьому світі дотримуються кращих стандартів сталого розвитку.

З іншого боку, *Стійка Аналітична Хімія (SusAC)* демонструє ширшу, довгострокову перспективу, враховуючи весь життєвий цикл аналітичних процесів, включаючи використання ресурсів, економічну доцільність, а також соціальну відповідальність. *SusAC* прагне розробляти аналітичні методи, які є не тільки екологічно чистими, але й економічно доцільними та соціально корисними, забезпечуючи довгострокову стійкість.

SusAC став критичним підходом у сучасному аналізі, що поєднує наукові досягнення з екологічною відповідальністю. Ця парадигма інтегрує принципи зеленої та білої аналітичної хімії для мінімізації відходів, зменшення використання небезпечних реагентів та підвищення енергоефективності, зберігаючи при цьому аналітичну точність та чутливість. Нещодавні інновації, такі як методи екстракції без розчинників, мініатюрні аналітичні пристрої та біореагенти, значно зменшили екологічний слід аналітичних методів. Крім того, інтеграція штучного інтелекту та автоматизації дозволяє оптимізувати використання ресурсів та покращити відтворюваність.

З іншого боку, *Біла Аналітична Хімія (WAC)* – це цілісна структура, яка оцінює аналітичні методи на основі трьох ключових критеріїв: аналітична продуктивність (якість отриманих експериментальних даних), екологічний вплив (екологічна стійкість) та практична ефективність (легкість впровадження). Вона спрямована на балансування цих факторів для розробки ефективних, екологічно чистих та зручних аналітичних методів, що поєднують «зелену» хімію та практичні лабораторні потреби.

Концепція WAC як нова парадигма в аналітичній хімії являє собою трансформаційний підхід у галузі хімічного аналізу, зосереджений на гармонізації екологічної стійкості з аналітичною точністю. Цей підхід

інтегрує принципи SusAC в аналітичні протоколи, прагнучі зменшити вплив хімічних досліджень на навколишнє середовище, одночасно підвищуючи їхню ефективність.

Основні цілі концепції WAC включають скорочення використання небезпечних хімічних речовин, мінімізацію відходів, оптимізацію енергоспоживання, використання відновлюваних ресурсів та вдосконалення аналітичних робочих процесів. Ці принципи застосовні в широкому спектрі галузей, включаючи моніторинг навколишнього середовища, безпеку харчових продуктів, біологічні та біомедичні застосування. Концепція WAC базується на трьох основних принципах: червоному, синьому та зеленому, які спрямовують розробку аналітичних методологій, щоб забезпечити їхню наукову обґрунтованість, екологічну стійкість та операційну ефективність. Ключові особливості концепції WAC, що базується на червоному, синьому та зеленому принципах, показано на рис. 6.

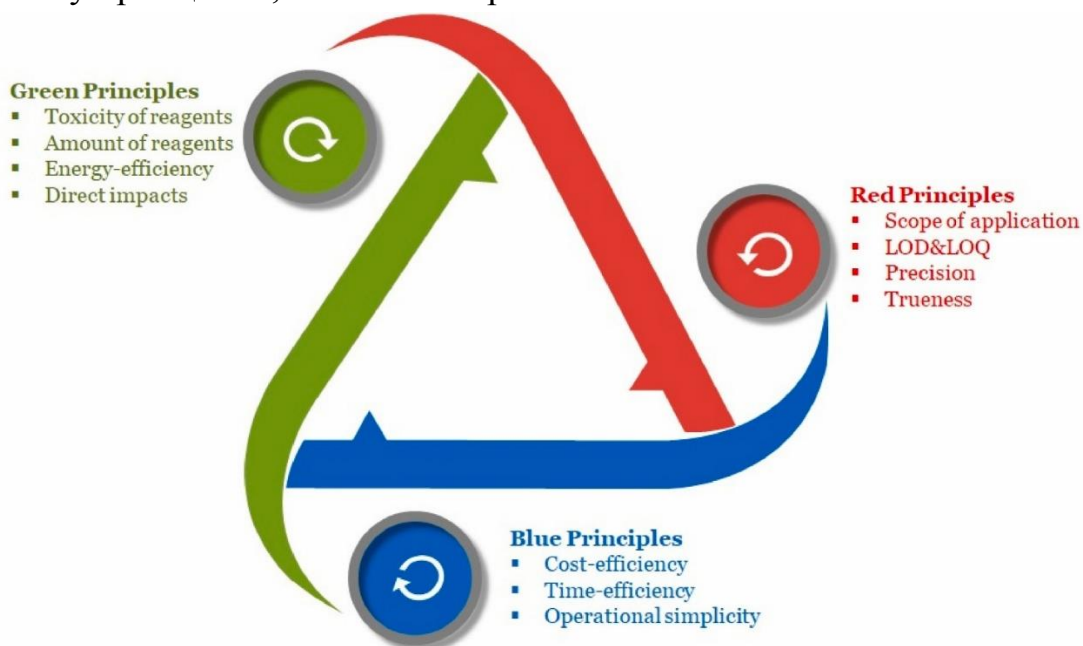


Рис. 6. Ключові особливості концепції WAC на основі принципів червоного, синього та зеленого кольорів

Розумна аналітична хімія (SAC) – це новий підхід, який інтегрує передові технології, такі як штучний інтелект, автоматизація та аналіз даних із екологічними та сталими принципами, щоб революціонізувати хімічний аналіз. Він забезпечує швидші, точніші та екологічніші підходи, оптимізуючи робочі процеси, зменшуючи споживання ресурсів, а також покращуючи прийняття рішень у сучасних аналітичних процесах. Підхід SAC досягає очікуваних цілей у своїй встановленій галузі. Завдяки

поєднанню штучного інтелекту та систем великих даних, SAC трансформує спосіб роботи хімії, використовуючи сучасні та історичні аналітичні методи. SAC виходить за рамки базової оцінки та переходить до налаштовуваних систем, які допомагають дослідникам приймати рішення, прогнозуючи результати на майбутнє. SAC працює над тим, щоб поєднати результати лабораторної науки з практичним застосуванням у світі. Ця ініціатива приносить мініатюрне та портативне випробувальне обладнання в польові області, де проводяться екологічні перевірки та тестування безпеки харчових продуктів разом із клінічними діагностичними послугами.

Таким чином, важливість зеленої хімії (та зеленої аналітичної хімії) полягає в її універсальності – від фундаментальних досліджень до промислового застосування. Вона вже сьогодні відкриває можливості для створення біорозкладних матеріалів, енергоефективних процесів та безпечних лікарських засобів. Однак її потенціал розкривається повністю лише за умови активної співпраці вчених, інженерів, підприємств та державних інституцій. Майбутнє цієї галузі залежить від того, наскільки швидко суспільство усвідомить необхідність переходу до більш відповідального використання хімічних технологій. Впровадження зелених принципів у освіту, промисловість та законодавство стане ключем до створення безпечного та екологічно збалансованого світу.

ПЕРЕЛІК ПИТАНЬ ДО ПІДСУМКОВОГО КОНТРОЛЮ

1. Що таке "зелена хімія" і яка її головна мета? Хто ввів термін "зелена хімія"?
2. Проаналізуйте вплив принципу "превентивності" на дизайн хімічних реакцій.
3. Чому важливо використовувати відновлювальні ресурси у хімічному виробництві?
4. Що таке "атомна економія" і чому вона важлива?
5. Як зелена хімія сприяє зниженню токсичності хімічних процесів?
6. Які типи розчинників є найбільш екологічно безпечними?
7. Які є виклики у впровадженні зеленої хімії в промисловість?
8. Як можна кількісно оцінити атомну економію процесу? Наведіть формулу.
9. В чому полягає різниця між атомною економією та виходом продукту реакції?
10. Як зелена хімія підходить до розробки альтернатив традиційним органічним розчинникам?
11. Поясніть роль біокаталізу у зеленій хімії.
12. Чим принцип "реалізації безпечної хімії" відрізняється від простого уникнення токсичних речовин?
13. Розкрийте поняття "життєвого циклу хімічного продукту" в контексті зеленої хімії.
14. Опишіть методи розрахунку Е-фактора та їх значення для оцінки чистоти процесів.
15. Як впровадження замкнутого циклу виробництва підтримується принципами зеленої хімії?
16. Порівняйте традиційні і "зелені" методи добування аніліну.
17. Які типи реакцій найчастіше використовують у зеленому органічному синтезі? Чому?
18. Як зелена хімія вирішує проблему стійких органічних забрудників (Persistent Organic Pollutants)?
19. Які термодинамічні та кінетичні міркування застосовуються при оптимізації "зелених" реакцій?
20. Поясніть екологічні переваги використання суперрозчинників, таких як надкритичний CO₂.
21. Як нанотехнології можуть бути інтегровані у зелену хімію для створення нових каталізаторів?

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Anastas P. T.; Warner J. C. *Green Chemistry: Theory and Practice*. New York: Oxford University Press, 1998. p. 30. By permission of Oxford University Press.
2. Petrovic P. V., Anastas P. T. *First Do No Harm: A Chemist's Guide to Molecular Design for Reduced Hazard*. United Square Singapore: Jenny Stanford Publishing, 2023. P. 263.
3. Martz P., Phan T. T., L'Haridon J., Beausoleil M. H., Lafaye K., Gérard Y., Gallardo C. Environmental profile of the production of fragrance ingredients used in cosmetic products: comparative analysis of results obtained by life cycle assessment and the green chemistry-based eco-design tool GREEN MOTION™. *Green Chemistry*. 2023. Vol. 25, issue 16, 6365-6382 pp. DOI: 10.1039/d2gc04860d
4. Semysim F. A., Hussain B. K., Hussien M. A., Azooz E. A., Snigur D. Assessing the Greenness and Environmental Friendliness of Analytical Methods: Modern Approaches and Recent Computational Programs. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*. 2024. DOI: 10.1080/10408347.2024.2304552
5. Pena-Pereira F.; Tobiszewski M.; Wojnowski W.; Psillakis E. A Tutorial on AGREEPrep an Analytical Greenness Metric for Sample Preparation. *Adv. Sample Prep.* 2022, Vol. 3, 100025. DOI: 10.1016/j.sampre.2022.100025
6. Wojnowski W., Tobiszewski M., Pena-Pereira F., Psillakis E. AGREEPrep – Analytical Greenness Metric for Sample Preparation. *TrAC Trends Anal. Chem.* 2022, Vol. 149, 116553. DOI: 10.1016/j.trac.2022.116553.
7. Anastas P. T. Green Chemistry: Thirty Years of Holding Up Our End of the Bargain. *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2021, Vol. 9, issue 48, 16005–16006 pp. DOI: 10.1021/acssuschemeng.1c07786
8. Hurst G. A.; Farmer T. J.; Jesper S. Green chemistry infographics for research-led instruction. *Sustainable Chemistry and Pharmacy*. 2025, Vol. 45, 102007. DOI: 10.1016/j.scp.2025.102007
9. Psillakis E., Pena-Pereira F. The twelve goals of circular analytical chemistry. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2024, Vol. 175, 117686. DOI: 10.1016/j.trac.2024.117686
10. Yahya L. A., Vakh C., Dushna O., Kalisz O., Bocian S., Tobiszewski M. Guidelines on the proper selection of greenness and related metric tools in analytical chemistry – a tutorial. *Analytica Chimica Acta*. 2025, Vol 1357, 344052. DOI: 10.1016/j.aca.2025.344052

11. Yin L., Yu L., Guo Y., Wang C., Ge Y., Zheng X., Zhang N., You J., Zhang Y., Shi M. Green analytical chemistry metrics for evaluating the greenness of analytical procedures. *Journal of Pharmaceutical Analysis*. 2024, Vol. 14, issue 11, 101013. DOI: 10.1016/j.jpha.2024.101013
12. Kaya S. I., Ozcelikay-Akyildiz G., Ozkan S. A. Green metrics and green analytical applications: A comprehensive outlook from developing countries to advanced applications. *Green Analytical Chemistry*. 2024, Vol. 11, 100159. DOI: 10.1016/j.greeac.2024.100159
13. Alqahtani A., Elbeltagi S. Advancing chemistry sustainably: From synthesis to benefits and applications of green synthesis. *Journal of Organometallic Chemistry*. 2025, Vol. 1027, 123508. DOI: 10.1016/j.jorganchem.2025.123508
14. Kannaiah K. P., Chanduluru H. K. Exploring sustainable analytical techniques using G score and future innovations in green analytical chemistry. *Journal of Cleaner Production*. 2023, Vol. 428, 139297. DOI: 10.1016/j.jclepro.2023.139297
15. Azooz E. A., Semysim F. A., Al-Muhanna E. H. B., Mogaddam M. R. A., Tuzen M. Chapter 9 - How to evaluate the greenness and whiteness of analytical procedures? *Green Analytical Chemistry*. 2025, 263-356 pp. DOI: 10.1016/j.teac.2023.e00202
16. Hussain C. M., Hussain G., Keçili R. Smart analytical chemistry: Integrating green, sustainable, white and AI-driven approaches in modern analysis. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2025, Vol. 191, 118295. DOI: 10.1016/j.trac.2025.118295

Навчальне видання

“ЗЕЛЕНА” АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

ЕЛЕКТРОННІ МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до практичних занять

**для здобувачів третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти
спеціальності ЕЗ Хімія, ОНП Хімія**

Електронне практичне видання

Укладачі:

Гузенко Олена Михайлівна

Снігур Денис Васильович

Демчук Ангеліна Валеріївна

В авторській редакції

Затв. авт. 02.09.2025. Шрифт Times New Roman.

Системні вимоги: операційна система сумісна з програмним забезпеченням
для читання файлів формату PDF.

Обсяг 1,2 МБ. Зам. № 2961.

Видавець і виготовлювач

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4215 від 22.11.2011 р.

вул. Університетська, 12, м. Одеса, 65082, Україна

Тел.: (048) 723 28 39, e-mail: druk@onu.edu.ua