

**СЕКЦІЯ 14.****ХІМІЯ, ХІМІЧНА ТА БІОІНЖЕНЕРІЯ**

**Варава Іванна Дмитрівна**, здобувач вищої освіти природничого факультету,  
*Житомирський державний університет ім. Івана Франка, Україна*

**Науковий керівник: Віленський Володимир Олексійович**, доктор хімічних наук,  
професор кафедри хімії природничого факультету  
*Житомирський державний університет ім. Івана Франка, Україна*

## **ЗАВДАННЯ І ОСОБЛИВОСТІ РЕАКЦІЙ ЗЕЛЕНОГО СИНТЕЗУ В СУЧАСНОМУ ТРЕНДІ З ОХОРОНИ ОТОЧУЮЧОГО СЕРЕДОВИЩА. ДОСЯГНЕННЯ, ПРОБЛЕМИ ТА ПРОПОЗИЦІЇ**

Сучасна хімічна промисловість формує значне екологічне навантаження — як через викиди токсичних речовин, так і через надмірне споживання невідновлюваної сировини та енергії [1]. Домінуюча до недавнього часу логіка «спочатку виробити, потім нейтралізувати відходи» виявилася економічно неефективною: витрати на очищення інколи досягають десятків відсотків операційного бюджету підприємств. Впровадження вимог REACH, RoHS і TSCA поставило перед галуззю завдання не замінювати окремі небезпечні компоненти, а переглядати саму архітектуру технологічних рішень [3]. У цьому контексті зелена хімія, основи якої заклали П. Анастас і Дж. Варнер у праці 1998 року, постає не як альтернатива, а як нова операційна норма [2].

Система з 12 принципів, розроблена Анастасом і Варнером, охоплює увесь ланцюг прийняття рішень у хімічному виробництві — від вибору вихідних речовин до організації відходів [2, 3]. Серед пріоритетів — запобігання утворенню відходів ще на стадії проєктування синтезу, максимальне включення атомів реагентів у цільовий продукт (atom economy), мінімізація допоміжних стадій та скорочення використання легких органічних розчинників. Практичним підтвердженням продуктивності цих ідей стало присудження Нобелівської премії з хімії у 2021 р. Б. Лісту та Д. Макміллану за розробку органокаталізу, що відкрив шлях до стереоселективного синтезу без застосування перехідних металів [4]. На рівні міжнародної політики принципи зеленої хімії закріплені в Європейському зеленому курсі (2019) як інструмент досягнення кліматичної нейтральності ЄС до 2050 р. [5].

Трансформація хімічних процесів відповідно до екологічних принципів спирається на різноманітні технологічні рішення. Органокаталітичні та гетерогенні каталітичні системи дозволяють знижувати температури реакцій, повторно задіювати каталізатор і уникати важкометалічних реагентів [3, 4]. Фото- і металафотокаталіз відкривають доступ до перетворень C–H- та C–C-зв'язків в умовах видимого світла, що виключає потребу у стехіометричних окисниках [6]. Мікрохвильова активація реакційних сумішей (MAOS) суттєво прискорює синтез — часом у кілька разів — і водночас підвищує відтворюваність та знижує питомих енергоспоживання [6].

Технологія безперервного потокового синтезу (continuous flow) забезпечує стабільне підтримання параметрів процесу і суттєво підвищує безпеку поводження з реакційноздатними речовинами: показник E-фактор у потоковому режимі не перевищує 5 кг/кг, тоді як у класичному реакторі він може досягати 97 кг/кг [6]. Механохімічний підхід принципово усуває розчинник із синтетичної схеми, використовуючи механічну енергію для активації реагентів [6]. Ферментативний катализ і технології спрямованої еволюції дозволяють отримувати енантімерно чисті продукти у водному середовищі за кімнатних умов [7]. Як альтернатива органічним розчинникам застосовуються вода (у режимі «on water»), надкритичний CO<sub>2</sub> та міцелярні системи на основі біорозкладних сурфактантів [6]. Електросинтез замінює хімічні окисники електричним струмом, перетворюючи електрон на екологічно нейтральний реагент [6]. Перспективним напрямом є також інтеграція методів машинного навчання та концепції self-driving labs, що уможливають безперервне вдосконалення синтетичних маршрутів без участі людини-оператора [10].

Для об'єктивного порівняння різних синтетичних підходів у зеленій хімії застосовують систему кількісних показників [8]. Atom economy (AE), запропонована Тростом у 1991 р., відображає частку молярної маси цільового продукту відносно сумарної маси всіх реагентів; для реакцій приєднання вона дорівнює 100%, що робить цей показник зручним орієнтиром на стадії вибору маршруту синтезу [1]. E-фактор, введений Шелдоном, кількісно описує масу відходів у розрахунку на одиницю маси отриманого продукту: для базових хімічних виробництв він становить 0,1–1, для тонкого органічного синтезу — 5–50, а у фармацевтиці може сягати 25–100 кг/кг [9]. Залежно від того, які саме відходи враховуються, розрізняють варіанти sEF, cEF та iEF [9]. Показник Process Mass Intensity (PMI) розраховується як відношення сумарної маси всіх задіяних матеріалів до маси продукту і пов'язаний із E-фактором формулою:  $PMI = E\text{-factor} + 1$ ; медіанне значення для 28 активних фармацевтичних інгредієнтів (API) у 2008 р. становило 58 [9].

Найбільш показовим прикладом є виробничий синтез ситагліптину (Januvia) компанією Merck у партнерстві з Codexis: трансаміназа, адаптована через спрямовану еволюцію, забезпечила енантімерний надлишок  $\geq 99,95\%$ , дозволила відмовитися від важких металів і органічних розчинників, а E-фактор знизився майже п'ятикратно — з 86 до 17 кг/кг [7]. Паралельне вдосконалення виробництва прегабаліну (Lyrica, Pfizer) за рахунок ферментативного каталізу (Lipolase) скоротило кількість технологічних стадій з п'яти до трьох і зменшило масу відходів у п'ять разів; обидва проекти отримали премію Presidential Green Chemistry Challenge від US EPA [7]. Аналіз сукупних результатів галузі свідчить: перехід на «зелені» технології забезпечує зниження E-фактора в діапазоні від 2 до 19 разів, скорочення кількості синтетичних стадій на 10–13 і зменшення витрат на сировину та утилізацію відходів на 15–20% [8, 9]. Процес Power-to-Methanol у рамках технологій CCU досягає конверсії CO<sub>2</sub> близько 70%, а провідні хімічні та фармацевтичні компанії (Merck, Pfizer, BASF) повертають інвестиції в модернізацію впродовж 3–5 років [5, 7].

Вітчизняна хімічна промисловість значною мірою зберігає технологічну базу, закладену в другій половині ХХ ст.: багатостадійні схеми із застосуванням стехіометричних реагентів, значний знос обладнання та обмежена доступність сучасних катализаторів. Разом із тим у більшості освітніх програм з хімії інструментарій зеленої хімії залишається факультативним, а не ключовим блоком

підготовки [3]. Долучення України у 2024 р. до міжнародної мережі Global GreenChem Innovation and Network Programme та проведення першої тематичної конференції і хакатону свідчать про формування профільної спільноти [10].

До пріоритетних стратегічних кроків належать: запровадження LCA-критеріїв у процедури державних закупівель і промислового проектування; введення показників АЕ, Е-фактора і РМІ як обов'язкових компетентностей у стандарти вищої хімічної освіти; формування механізмів вуглецевого ціноутворення для стимулювання досліджень у галузі екологічного синтезу; підтримка CAPEX-модернізації підприємств із чіткими КРІ зниження РМІ; розширення функціональності UA-REACH і її інтеграція з аналогічними європейськими платформами [5, 8, 10].

Узагальнені результати впровадження «зелених» технологій: зниження Е-фактора у 2–19 разів, скорочення кількості стадій синтезу на 10–13, зменшення витрат на сировину та поводження з відходами на 15–20% [8, 9]. Процес Power-to-Methanol (CCU) забезпечує ~70% конверсії CO<sub>2</sub> [5]; інвестиції провідних компаній (Merck, Pfizer, BASF) окупаються протягом 3–5 років [7].

Хімічна галузь України значною мірою спирається на технології 1960–1980-х рр. із застарілими багатостадійними процесами та стехіометричними реагентами. Водночас євроінтеграційний курс і регуляторна гармонізація створюють зовнішні стимули для змін [10]. У 2024 р. КМУ ухвалив постанови № 847 (адаптація REACH) та № 539 (адаптація CLP), запроваджується платформа UA-REACH із базами GHS/CLP і паспортами безпеки (SDS) [10].

Серед перешкод – зношеність обладнання, обмежений доступ до сучасних технологій і кадровий дефіцит: у більшості освітніх програм метрики зеленої хімії представлені фрагментарно [3]. У 2024 р. Україна долучилася до Global GreenChem Innovation and Network Programme та провела першу конференцію «Green Chemistry Alternatives: The Path to a Sustainable Future» [10].

Ключові стратегічні напрями: (1) інтеграція LCA-стандартів у державні закупівлі та промислове проектування; (2) обов'язкове включення метрик АЕ/Е-factor/РМІ до навчальних програм хімічних спеціальностей; (3) впровадження carbon pricing; (4) фінансові механізми підтримки CAPEX-модернізації; (5) розширення UA-REACH і міжнародна співпраця [5, 8, 10].

Метрики АЕ, Е-фактор і РМІ у поєднанні з LCA дозволяють кількісно порівнювати синтетичні маршрути та систематично їх вдосконалювати [8, 9]. Промислові приклади підтверджують реальну ефективність «зелених» підходів: зниження Е-фактора у 2–19 разів, скорочення стадій, підвищення стереоселективності [7].

### Список використаних джерел:

1. Trost B. M. The Atom Economy – A Search for Synthetic Efficiency. *Science*. 1991. Vol. 254, no. 5037. P. 1471–1477. DOI: 10.1126/science.1962206.
2. Anastas P. T., Warner J. C. *Green Chemistry: Theory and Practice*. Oxford : Oxford University Press, 1998. 152 p.
3. 12 Principles of Green Chemistry / American Chemical Society, Green Chemistry Institute. URL: <https://www.acs.org/green-chemistry-sustainability/principles/12-principles-of-green-chemistry.html> (дата звернення: 10.04.2026).
4. The Nobel Prize in Chemistry 2021. Press release / NobelPrize.org. URL: <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2021/press-release> (дата звернення: 16.03.2026).
5. The European Green Deal: Communication from the Commission. Brussels : European Commission, 2019. 24 p. URL: <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX:52019DC0640> (дата звернення: 15.04.2026).

6. Rogers L., Jensen K. F. Continuous Manufacturing – the Green Chemistry Promise? *Green Chemistry*. 2019. Vol. 21, no. 13. P. 3481–3498. DOI: 10.1039/C9GC00773C.
7. Savile C. K. et al. Biocatalytic Asymmetric Synthesis of Chiral Amines from Ketones Applied to Sitagliptin Manufacture. *Science*. 2010. Vol. 329, no. 5989. P. 305–309. DOI: 10.1126/science.1188934.
8. Sheldon R. A. The E-Factor 25 Years on: The Rise of Green Chemistry and Sustainability. *Green Chemistry*. 2017. Vol. 19, no. 1. P. 18–43. DOI: 10.1039/C6GC02157C.
9. Sheldon R. A. The E Factor at 30: A Passion for Pollution Prevention. *Green Chemistry*. 2023. Vol. 25, no. 5. P. 1704–1728. DOI: 10.1039/D2GC04747B.
10. Постанова Кабінету Міністрів України № 847 від 23.07.2024 «Про затвердження плану заходів з адаптації законодавства у сфері обігу хімічних речовин (REACH)» та № 539 від 17.05.2024 (адаптація CLP). URL: <https://www.kmu.gov.ua> (дата звернення: 15.04.2026).