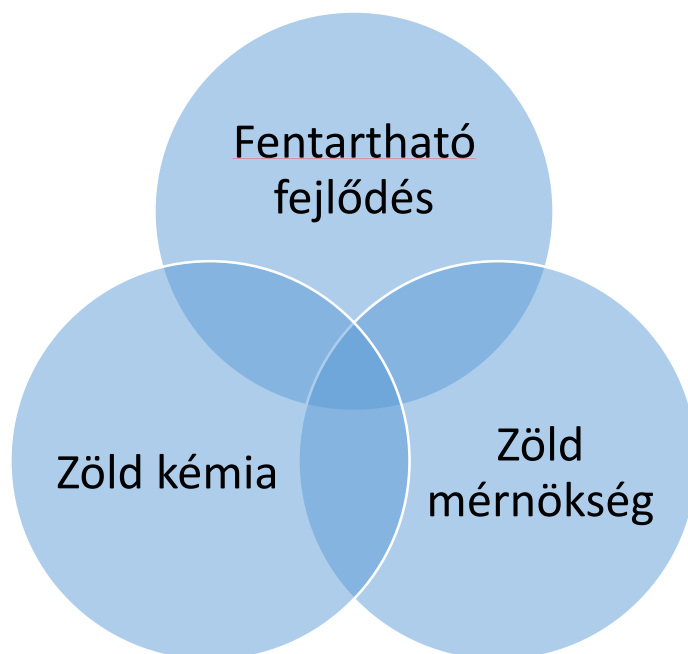


Környezetbarát eljárások kurzus

Mi a környezetbarát? - A zöld kémia mérőszámai

óravázlat

A vegyipar és kapcsolódó iparágak közismerten jelentős negatív hatással vannak a környezetre, az élővilágra és az emberi egészségre egyaránt. A közvetlen hatások mellett az áttételes hatások, az alapanyagok kinyerése, az energiaigény biztosítása mind fontos a környezetre gyakorolt hatás megítélése szempontjából. A környezetbarát, környezetkímélő, fenntartható és hasonló fogalmak nehezen definiálhatóak. Az első ábrán a fenntartható fejlődés – zöld kémia – zöld mérnökség egymáshoz való viszonyát ábrázoltuk szemantikusan.



1. ábra. A fenntartható fejlődés, a zöld kémia és a zöld mérnökség különböző, de összefüggő fogalmak

A fenntartható fejlődés (angolul: sustainable development) a jelenlegi gazdasági rendszernek, amely a folyamatos fejlődés hiányában összeomlana, az a formája, amely biztosítja, hogy a következő generáció legalább annyi erőforrással és lehetőséggel rendelkezzen, mint a jelenlegi. Ez Magyarország stratégiai érdeke éppen úgy, mint a világ bármely más országának. Erőforrás alatt azonban nem csak alapanyagok, energiaforrást, környezeti erőforrásokat, pl ivóvíz értünk, hanem társadalmi, emberi és gazdasági erőforrásokat és lehetőségeket is. (NFFH 2012) Éppen ezért a környezetközpontú szemléletmód a fenntartható fejlődésnek csak egy, de fontos szelete. A fenntartható fejlődés gyakorlati megvalósításához az ENSZ 17 konkrét célt fogalmazott meg, amelyek elérhetőek az alábbi linken: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/>. Javasolom, hogy az oldalt keressék fel, és ne hagyják ki a „Lazy person’s guide to saveing the world” részt sem: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/be-the-change/>

A zöld kémia (angolul: green chemistry) alapelveit Anastas fogalmazta meg a híres 12 pontjában (Anastas, P. T.; Warner, J. C. Green Chemistry: Theory and Practice, Oxford University Press: New York, 1998, p.30.). A pontok kibővítése eredményeképpen sokszor hallani 24 vagy még több pontról. A zöld kémia alapvetően szintetikus szempontból közelíti meg a kérdéskört, ezért az alapelvek elsősorban kémiai reakciók tervezésekor, kialakításakor alkalmazhatóak, bár tartalmaz teljes gyártástechnológiára is vonatkoztatható elveket is (1, 11, 12 pontok).

A zöld mérnökség fogalmát (angolul: green engineering) az EPA (Environmental Protection Agency) definíciója alapján lehet legjobban megérteni: „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* and *minimizing the risk* to human health and the environment.” Szabad fordításban: A zöld mérnökség a folyamatok, eljárások olyan tervezése, megvalósítása és használata, amely technológiailag megvalósítható és gazdaságos, miközben csökkenti a szennyezés keletkezését a kibocsátási helyen és minimalizálja az emberi egészségre és a környezetre gyakorolt kockázatot. A könnyebb alkalmazhatóság érdekében ennek a fontosabb lépéseit is pontokba foglalták (Abraham, M.; Nguyen, N. “Green engineering: Defining principles” – Results from the Sandestin conference. Environmental Progress 2004, 22, 233-236. DOI: 10.1002/ep.670220410). Ezekben a pontokban már felfedezhető az életciklus elemzés és az eredendően biztonságosabb üzemek kialakításának igénye is. A környezet védelme annál hatékonyabb minél korábbi fázisban figyelembe vesszük a fejlesztés során.

A fenti elveknek megfelelően megfigyelhető mind a szakmai mind a szélesebb közönségnek szóló leírásokban, bármilyen reakcióról, eljárásról, technológiáról legyen is szó, hogy azok mind környezetbarátok. Ma már annak, ha egy cég, mára, termék környezetkímélő komoly reklámértéke is van. Éppen ezért rendkívül fontos, hogy a környezetre gyakorolt hatást számszerűsíteni tudjuk és valós adatokon alapuló döntést hozzunk mérnöki javaslatok kidolgozása során.

Egy-egy termék különféle helyen és módon történő előállításának a környezeti hatásait legpontosabban az életciklus elemzés segítségével lehet felmérni. Az életciklus-elemzés (Life Cycle Assessment, LCA) egy folyamat, termék illetve szolgáltatás teljes életútja során vizsgálja a környezetre gyakorolt potenciális hatásokat. Az életút vizsgálata a „bölcstől a sírig” elméletre alapul: a termékhez szükséges nyersanyag kitermelésétől a termék gyártásán keresztül a termék használatáig és a használat után keletkező termékből keletkező hulladék hasznosításáig vagy kezeléséig terjedő szakaszokat vizsgálja. Folyamat, illetve szolgáltatás esetén az anyag- és energiafelhasználásnak, illetve magának a folyamatnak a környezeti hatásait vizsgálja az LCA. Az életciklus elemzést megfelelő szabványok szerint végzik, és fontosabb esetben külső szervezetek akkreditálják. Négy fő lépése van: a határok kijelölése, a leltár analízis, a hatásbecslés valamint az értékelés és értelmezés. Az életciklus elemzés elvégzése bonyolult, időigényes és éppen ezért drága.

Egy mérnök számára mindig alapvető fontosságú kell, hogy legyen a számszerűsíthetőség. Igaz ez a környezetre gyakorolt hatás szempontjából is. Különböző szintézis utak, eljárások, technológiák összehasonlítása fontos és szükséges nem csak a profitabilitásuk, gazdaságosságuk, beruházási költségük, de környezetre gyakorolt hatásuk szerint is. Ehhez azonban gyorsan és viszonylag könnyen alkalmazható módszerekre van szükség.

A környezeti faktor (angolul: environmental factor, Sheldon féle E faktor) az anyagmérlegből könnyen számítható akár reakciók, akár teljes üzemek esetén is. Ez az előnye, a könnyű számíthatóság, a hátránya azonban, hogy semmiféle információt sem ad a hulladék minőségétől és ezért a környezeti hatásairól. Jellemző E faktor értékek a főbb vegyipari iparágak esetén az 1. táblázatban látható. Egyértelmű, hogy a feldolgozási lépésszám növekedésével az egységnyi termékre jutó hulladék mennyisége nő.

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

1. táblázat. Jellemző környezeti faktor értékek a főbb vegyipari ágazatok esetén.

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

A környezetre gyakorolt hatást jobban figyelembe lehet venni a környezeti hatástényező (angolul: environmental quotient, EQ-faktor) segítségével. Itt a számlálóban minden hulladékot a környezetre gyakorolt káros hatását jellemző Q tényezővel szorzunk meg, majd ezt osztjuk a termék tömegével. A módszer hátránya, hogy minden hulladékáram összetételét ismernünk kell, ami jelentős munkáigénnyel és költséggel járó analitikai munka, valamint a bizonytalansága is nagy. Továbbá a Q tényező értéke megállapodáson alapul, és mint ilyen szubjektív (víz 0, NaCl 1, nehézfém sók 100-1000 között).

Reakcióutak összevetésekor hasznos az atomhatékonyság avagy atomszelektivitás számítása (M a moltiplicitás).

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

Az atomhatékonyságot a reakcióút sztöchiometriailag rendezett egyenlet alapján lehet számítani. Alapvetően meghatározza a reakció típusa. Az alkalmazott védőcsoportok az atomhatékonyságot csökkentik, így a zöld kémia 2. és 8. pontjainak számszerűsítésére alkalmas.

Gyakorlati kémiai szintézisek során az olcsóbb reagenseket gyakran feleslegben alkalmazzák. Így a reakciósebesség növelhető, illetve egyensúlyi reakció esetén az egyensúlyt el lehet tolni a terméképződés felé. A felesleg mértékét a sztöchiometriai tényezővel lehet értékelni (m tömeg).

$$SF = 1 + \frac{\sum m_{\text{reagens, feleslegben}}}{\sum m_{\text{reagens, sztöchiometriai}}} = 1 + \frac{AE \cdot \sum m_{\text{reagens, feleslegben}}}{\sum m_{\text{termék, elméleti}}}$$

Teljes reakcióút esetében a tömegre vonatkoztatott reakcióhatékonysága (RME) lehetővé teszi, hogy nem csak elméleti hanem valós mérési adatok alapján is számításokat végezhessünk. Ekkor a számos méret függő tényezőt egyben tartalmazó a tömegvisszanyerési hatásfokot (MRP), a konverziót (X), az atomhatékonyságot szorozzuk össze és osztjuk el a sztöchiometriai tényezővel. Az MRP-ben a felhasznált katalizátor tömeg (c), a felhasznált oldószer tömeg (s) és egyéb segédanyagok tömege (ω) is szerepel. Legtöbbször az ω és s értékek olyan nagyok, hogy a többi elhanyagolhatóvá válik, különösen igaz egy a gyógyszeripar esetén.

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

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

Teljes technológia értékelésére, valamint az összehasonlító eredménye vezetőséggel való megismertetésére leginkább a ún. intenzitás tényezők alkalmasak. Az intenzitás tényezőket régebben a magyar szaknyelv fajlagosoknak is nevezte. Az intenzitás tényezők egységnyi termék mennyiségre vonatkoztatott jellemzők, pl. energiaintenzitás, oldószerintenzitás vagy akár fajlagos költség. Ezek számítása feltétlenül szükséges különböző technológiai megoldások összehasonlításánál. Hátrányuk, hogy bizonyos szempontból való összehasonlítást tesznek lehetővé.

Az adott termék előállításához szükséges fajlagos anyag és energia felhasználás összevontan a fajlagos költség, a szén-dioxid ekvivalens és az etanol ekvivalens tartalmazza.

A fajlagos költség értelemszerűen az egységnyi termékmennyiség (előírt minőségben történő) előállításának az ára, ami tartalmazza az alapanyag, a gyártási folyamat és a kapcsolódó környezet- és egészségvédelmi intézkedések költségét is. Az előnye, hogy gazdasági szakemberekkel való egyeztetés során kiválóan használható, hátránya azonban, hogy jelentősen függ nem műszaki kérdésektől pl. világpiacon olajár, ami a technológiai megoldások környezetvédelmi szempontú összehasonlításában nehézkessé teszi.

A szén-dioxid ekvivalens azt adja meg, hogy egységnyi termék előállítása mennyi szén-dioxid kibocsátást eredményez. A paraméter jól használható, mert az energiaigényt figyelembe lehet venni az előállításkor keletkező szén-dioxidként, és az alapanyagokat is a korábbi lépések szén-dioxid ekvivalenseivel. A módszer további előnye, hogy mivel a nagy szén-dioxid kibocsátók már ma is szén-dioxid kvótával rendelkeznek, és komoly anyagi következményei vannak a kibocsátási mennyiség túllépésének, a döntéshozók is ismerik a szén-dioxid kibocsátás jelentőségét.

Az 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. A szén-dioxid ekvivalensnél szakmai szempontból talán könnyebben kezelhető (energiaigény átszámolható az azt biztosító bioetanol tömegre) és a reakcióutakat is figyelembe lehet venni, nem csak a szénatomszámot, mint a szén-dioxid ekvivalensnél. Egyelőre sokkal kevésbé elterjedt, mint a szén-dioxid ekvivalens.