

Piotr Zwoliński

Studenckie Koło Naukowe Zrównoważonego Rozwoju WIDMO  
Uniwersytet Śląski w Katowicach

## CHEMIA DLA ZRÓWNOWAŻONEGO ROZWOJU – WYBRANE PROBLEMY

### Streszczenie

W artykule przedstawiono wizję chemii jako dziedziny zasłużonej na rzecz ekorozwoju. Omówiono niektóre powody pejoratywnego postrzegania chemii przez społeczeństwo. Wskazano powiązania chemii z trzema składowymi zrównoważonego rozwoju przy uwzględnieniu relacji pomiędzy nimi. Nakreślono filozofię i cele współczesnych badań naukowych w zakresie chemii. Przeanalizowano postulaty „zielonej chemii”, zwracając uwagę na szanse oraz trudności w ich skutecznej realizacji. Dokonano subiektywnego przeglądu pozytywnych przykładów na podstawie doniesień literaturowych i doświadczeń autora. Odnotowano przyjazne środowisku efekty pracy polskich uczonych.

### Wprowadzenie

Na wniosek IUPAC<sup>1</sup> wsparty przez UNESCO<sup>2</sup> 63. Zgromadzenie Ogólne ONZ<sup>3</sup> przyjęło rezolucję proklamującą 2011 Międzynarodowym Rokiem Chemii. Uroczyste obchody odbywają się pod hasłem „Chemia – nasze życie, nasza przyszłość” i są częścią Dekady Edukacji na rzecz Zrównoważonego Rozwoju<sup>4</sup>. Mają one na celu podkreślenie znaczenia chemii jako twórczej nauki kluczowej dla poprawy jakości życia ludzi oraz rozwiązywania globalnych problemów cywilizacyjnych, takich jak utrzymanie zasobów Ziemi [1]. Niniejszy artykuł stanowi próbę wykazania słuszności tez stawianych przez organizatorów IYC 2011, w szczególności tych dotyczących wagi osiągnięć chemików sprzyjających ochronie środowiska przyrodniczego.



International Year of  
**CHEMISTRY**  
**2011**

**Rysunek 1. Logo Międzynarodowego Roku Chemii (IYC 2011)**

Źródło: <http://www.chemistry2011.org/participate/marketing-materials/>

---

Korespondencyjne adresy e-mail: piotr.zwolinski@o2.pl, widmo@us.edu.pl

<sup>1</sup> Międzynarodowa Unia Chemii Czystej i Stosowanej (*International Union of Pure and Applied Chemistry*; IUPAC).

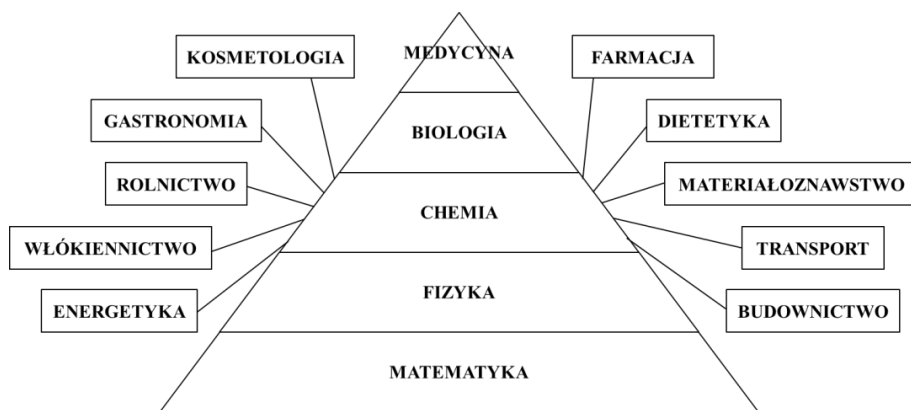
<sup>2</sup> Organizacja Narodów Zjednoczonych do Spraw Oświaty, Nauki i Kultury (*United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization*; UNESCO) – organizacja wyspecjalizowana ONZ.

<sup>3</sup> Organizacja Narodów Zjednoczonych (*United Nations*; UN; ONZ).

<sup>4</sup> Szeroka inicjatywa edukacyjna ONZ realizowana w latach 2005 – 2014 [2].

## Wizerunek chemii

Opinia publiczna postrzega chemię negatywnie. Powszechnie uważa się ją za dziedzinę nieekologiczną, przynoszącą szkodę społeczeństwu i naturze. Upatruje się w niej przyczyn chorób oraz skażeń, utożsamiając słowo „chemia” głównie z zagrożeniem toksynami i wypadkami. Sytuacja ma charakter ponadnarodowy. Symptomatycznym przejawem braku popularności chemii jest częste obecnie w zagranicznych uczelniach wyższych nazywanie kierunku studiów *molecular sciences*<sup>5</sup> zamiast *chemistry*.



Rysunek 2. Piramida nauk i wybrane dziedziny pokrewne chemii

Źródło: opracowanie własne w nawiązaniu do [3,4]

Genezę jednoznacznie niekorzystnego obrazu chemii dobrze wyjaśnia analiza wzajemnych zależności między dyscyplinami badawczymi. W myśl piramidy nauk Turnera<sup>6</sup> (rysunek 2.), chemia czerpie z dokonań fizyki, sama będąc zaś *sui generis* bazą dla biologii i medycyny [3]. Wiele doniosłych odkryć, cennych wynalazków przypisuje się tym dwu ostatnim dziedzinom, a także farmacji, kosmetologii, dietetyce, inżynierii materiałowej i budowlanej, pomijając całkowicie wkład pracy chemików – nierzadko kluczowy. Chemii nie łączy się z codziennymi udogodnieniami, natomiast tworzy się jej wizerunek przez pryzmat nośnych medialnie skrajności [4].

## Chemia a rozwój zrównoważony

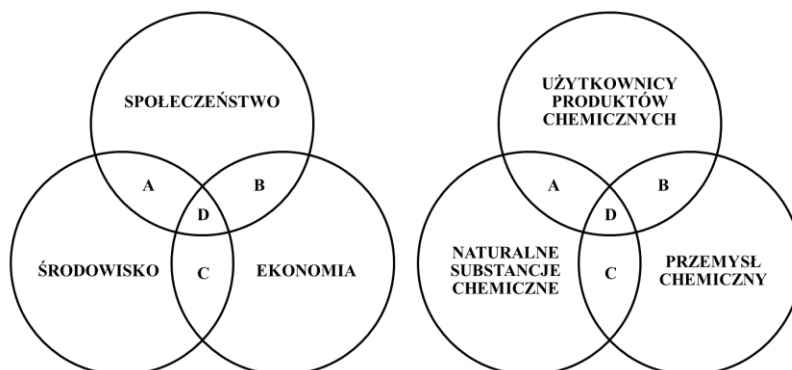
Paradygmat zrównoważonego rozwoju<sup>7</sup> propaguje dążenie do harmonii polegającej na symultanicznych konsensusach pośród trzech komponentów: społeczeństwa, środowiska i ekonomii [5]. Na rysunku 3. znajduje się zwyczajowe przedstawienie graficzne idei ZR (po lewej) oraz analogiczny schemat odwołujący

<sup>5</sup> Tłumaczone jako *nauki o molekułach*.

<sup>6</sup> Frederick Turner – profesor nauk humanistycznych w University of Texas at Dallas.

<sup>7</sup> Polskie piśmiennictwo terminu „zrównoważony rozwój” (ZR; „ekorozwój”) używa niejednokrotnie w węższym znaczeniu, akcentując wyłącznie kwestie ochrony środowiska.

się do tematyki chemicznej (po prawej). Elementy składowe przemianowano, konkretyzując ich powiązanie z chemią.



**Rysunek 3. Wizualizacja zrównoważonego rozwoju**

Zródło: opracowanie własne w nawiązaniu do [5]

W przyrodzie pierwiastki chemiczne występują w formie wolnej i związanej. Środowisko dostarcza licznych substancji – niektóre wykorzystywane są przez ludzi bez wcześniejszego przetworzenia, inne stanowią surowce dla fabrycznych procesów produkcyjnych. Przemysł chemiczny i sprofilowane branże pochodne nie tylko pozyskują z natury wyjściowe substraty, lecz ponadto starają się powielić obserwowane w niej przemiany<sup>8</sup>.

Obszary na rysunku 3. oznaczone literami A, B, C symbolizują relacje bilateralne. W tabeli 1. podano znamiona sytuacji zrównoważenia i niezrównoważenia.

**Tabela 1. Przykładowe cechy sytuacji zrównoważenia i niezrównoważenia**

Pole	Sytuacja zrównoważenia	Sytuacja niezrównoważenia
<b>A</b>	- wysoka świadomość ekologiczna, - segregowanie odpadów dla recyklingu, - racjonalna konsumpcja	- mała wiedza środowiskowa, - ignorancja ekologiczna, - nadmierny konsumpcjonizm
<b>B</b>	- sprawiedliwość społeczna, - produkcja wysokogatunkowych artykułów, - powszechność zdobyczy cywilizacyjnych,	- duże dysproporcje w społeczeństwie, - niska jakość wytwarzanych produktów, - nierówny dostęp do osiągnięć nauki,
<b>C</b>	- technologie przyjazne środowisku, - korzystanie z surowców odnawialnych, - recykling	- przestarzałe, nieekologiczne technologie, - gospodarka rabunkowa, - zanieczyszczanie środowiska

Zródło: opracowanie własne

Obszary oznaczone literą D w przypadku optymalnym symbolizują pełne zrównoważenie, czyli rozwój gospodarczy zaspokajający w sposób dostateczny potrzeby wszystkich ludzi przy należytej dbałości o stan przyrody gwarantującej podobne szanse następnym generacjom [6]. Urzeczywistnieniu tego założenia sprzyja opracowywanie i wdrażanie technologii redukujących dzisiejszy ślad

<sup>8</sup> Chemii odmawia się niekiedy aspektu przyrodniczego, podczas gdy eksploruje ona na poziomie dużych szczegółów zjawiska naturalne – zarówno dotyczące się świata ożywionego, jak i nieożywionego, co łączy z holistyczną odmianą etyki środowiskowej.

ekologiczny<sup>9</sup> oraz ilość emitowanych zanieczyszczeń. Prócz tego, pożądane jest wprowadzanie na rynek lepszych substytutów dla produktów, które charakteryzują się znaczną uciążliwością środowiskową w okresie eksploatacji, jak również po nim.

**Tabela 2. Program Innowacyjna Gospodarka (2007 – 2013) – wybrane projekty z chemii**

Nazwa beneficjenta	Tytuł projektu
Apeiron Synthesis Sp. z o.o.	Opracowanie i uruchomienie produkcji wysokoaktywnych katalizatorów metatezy olefin do zastosowań w przemyśle chemicznym i farmaceutycznym.
Blirt SA	Innowacyjne związki o wysoce selektywnej toksyczności jako potencjalne leki o przełomowym znaczeniu dla rynku chemioterapeutyków przeciwnowotworowych.
Celon Pharma Sp. z o.o.	Wdrożenie innowacyjnej technologii wytwarzania nowoczesnego produktu leczniczego w energooszczędnym procesie bezpośredniego tabletkowania.
Global Pollena SA Fabryka Chemii Gospodarczej	Poszerzenie oferty Global Pollena SA o innowacyjne produkty do płukania tkanin.
Greinplast Sp. z o.o.	Wdrożenie innowacyjnych technologii produkcji wyrobów chemii budowlanej.
Profarb I Sp. z o.o.	Ekologiczne materiały polimerowe do zastosowań w budownictwie i przemyśle chemicznym.
Instytut Biopolimerów i Włókien Chemicznych	Nowoczesne technologie dla włókiennictwa. Szansa dla Polski.
Instytut Chemicznej Przeróbki Węgla	Inteligentna koksownia spełniająca wymagania najlepszej dostępnej techniki.
Instytut Chemii Bioorganicznej PAN	Opracowanie innowacyjnej technologii syntezy fragmentów RNA oraz konstrukcji mikromacierzy RNA.
Instytut Chemii i Techniki Jądrowej	Analiza możliwości pozyskiwania uranu dla energetyki jądrowej z zasobów krajowych.
Instytut Chemii Nieorganicznej	Odpady nieorganiczne przemysłu chemicznego – foresight technologiczny.
Instytut Chemii Organicznej PAN	Cukry jako surowce odnawialne w syntezie produktów o wysokiej wartości dodanej.
Instytut Chemii Przemysłowej im. prof. Ignacego Mościckiego	Synteza kwasu akrylowego i estrów akrylowych w oparciu o surowce odnawialne, w tym o frakcję glicerynową z produkcji estrów metylowych kwasów tłuszczowych.
Instytut Ciężkiej Syntezy Organicznej „Blachownia”	Nowa generacja technologii epichlorohydryny z wykorzystaniem biogliceryny jako surowca.
Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN	Opracowanie technologii otrzymywania nanostrukturalnych katalizatorów tlenkowych do oczyszczania powietrza z toksycznych lotnych związków organicznych.
Instytut Nafty i Gazu	Biodegradowalny środek smarowy dla kolejnictwa.
Kamitec Sp. z o.o.	Wdrożenie innowacyjnej technologii katalitycznego recyklingu odpadowych tworzyw sztucznych.
Laminex Sp. z o.o.	Badanie i wdrożenie do produkcji wyrobów z tworzyw sztucznych wytworzonych z wykorzystaniem surowców odpadowych.
Mennica - Metale Szlachetne SA	Wdrożenie innowacyjnej technologii produkcji siatek katalitycznych dla przemysłu chemicznego.

Źródło: opracowanie własne na podstawie [10]

<sup>9</sup> Ślad ekologiczny (odcisk ekologiczny; *ecological footprint*) – wskaźnik oddziaływania człowieka na naturę poprzez ocenę, jak wielki obszar biologicznie produktywnego łądu i morza jest niezbędny do utrzymania danego wzorca konsumpcji [7].

Przedsiębiorstwa coraz chętniej modernizują się, adaptując bardziej ekologiczne rozwiązania, aby budować wizerunek zgodny z koncepcją społecznej odpowiedzialności biznesu<sup>10</sup>. Pozytywne zmiany limituje kondycja finansowa firmy, dlatego ważnym bodźcem w Polsce na przestrzeni ostatnich kilku lat stały się środki z Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego. Realizowany głównie z nich Program Operacyjny Innowacyjna Gospodarka wspiera unowocześnianie zakładów przemysłowych i prowadzenie badań naukowych w dyscyplinach technicznych [9]. W tabeli 2. zestawiono ciekawsze projekty z chemii w ramach PO IG. Spora część tytułów świadczy ewidentnie o proekologicznym zorientowaniu.

Niepomijalnym stymulantem progresu w polityce środowiskowej firm jest legislacja. Akty prawne, poza jakościowym i ilościowym regulowaniem poziomu uwalnianych zanieczyszczeń [11,12], zobowiązują przedsiębiorców do minimalizowania opakowań i ich odzysku [13,14] oraz ograniczania masy generowanych odpadów<sup>11</sup> [15]. Z uwagi na członkostwo Polski w Unii Europejskiej, krajowe ustawy i przepisy niższej rangi *de facto* implementują normy wspólnotowe. Warto wśród nich wymienić rozporządzenia REACH<sup>12</sup> (o bezpiecznym stosowaniu chemikaliów) i CLP<sup>13</sup> (wdrażające system GHS<sup>14</sup>) oraz dyrektywę IPPC<sup>15</sup>, która promuje używanie w przemyśle najlepszych dostępnych technik<sup>16</sup>, prezentowanych w specjalnych publikacjach [16-19].

Postępowanie indywidualnych ludzi także niewątpliwie warunkuje stopień zrównoważenia. Decyzje klienckie oraz aktywność obywatelska mają wpływ na sferę biznesu oraz władze samorządowe i centralne. Jednak krytyczną percepcję przekazów medialnych – pierwszego czynnika opiniotwórczego – umożliwiała dopiero podstawowa wiedza przyrodnicza, w tym chemiczna. Niestety, dostrzegalny notorycznie brak sceptycyzmu wobec komunikatów telewizyjnych, prasowych czy radiowych<sup>17</sup> powoduje nieufność w stosunku do nauki, a podatność na reklamę i niskie przekonanie o potrzebie codziennej dyscypliny ekologicznej skutkują nieracjonalną konsumpcją produktów chemicznych. Egzemplifikują ją: lekomania, nadużywanie środków czystości, kosmetyków i chemii gospodarczej, nieumiejętne korzystanie z pestycydów i nawozów sztucznych<sup>18</sup>, nabywanie zbyt dużej liczby artykułów polimerowych (również opakowań) i szybkie niesegregacyjne

---

<sup>10</sup> Społeczna odpowiedzialność biznesu (*Corporate Social Responsibility*; CSR) odnosi się do transparentnych praktyk biznesowych, które oparte są na wartościach etycznych, pozostają w zgodzie z wymogami prawa oraz wyróżniają się poszanowaniem ludzi, wspólnot i środowiska [8].

<sup>11</sup> Ustawa o odpadach nie stosuje się m.in. do: ścieków, odchodów i zwłok zwierząt, odpadów promieniotwórczych, gazów i pyłów wprowadzanych do powietrza [15] – traktują o nich inne zapisy.

<sup>12</sup> Rejestracja, ewaluacja, autoryzacja i ograniczanie chemikaliów (*Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals*; REACH).

<sup>13</sup> Klasyfikacja, oznakowanie i pakowanie (*Classification, Labelling and Packaging*; CLP).

<sup>14</sup> Globalnie zharmonizowany system klasyfikacji i oznakowania chemikaliów (*Globally Harmonized System of Classification and Labeling of Chemicals*; GHS).

<sup>15</sup> Zintegrowane zapobieganie i zmniejszanie zanieczyszczeń (*Integrated Pollution Prevention and Control*; IPPC).

<sup>16</sup> Najlepsze dostępne techniki (*Best Available Techniques*; BAT).

<sup>17</sup> Tendencyjność formułowanych wiadomości zwykle nie wynika ze złej woli dziennikarzy, lecz ich niewystarczających kwalifikacji odnośnie do zagadnień ścisłych.

<sup>18</sup> Rolnictwo jest dziś czterokrotnie bardziej wydajne niż przed wprowadzeniem środków ochrony roślin i nawozów sztucznych, zatem postulaty o rezygnacji z tych substancji nie wydają się realne [20].

pozbywanie się ich<sup>19</sup>. Za ujemne efekty takich działań społeczeństwo tradycyjnie obwinia chemię. Niebagatelną funkcję ma tutaj do spełnienia ciągła edukacja.

Chemia jako dziedzina naukowa nie daje się wpisać *expressis verbis* w jeden z okręgów na rysunku 3. Przynosi ona przemysłowi rozwiązania aplikacyjne, społeczeństwu zaś praktyczne informacje o świecie. Dodatkowo, opracowywanie i publikowanie tanich metod syntezy związków o cennych właściwościach potencjalnie pozwala zmniejszyć dysproporcje pomiędzy krajami Globalnej Północy i Południa<sup>20</sup>. Błędem jest identyfikowanie chemii ze strefą ekonomii, gdyż jej reguły okrawają finansowanie badań. Co więcej, zdarzało się, że – mimo wyraźnych ostrzeżeń uczonych – koncerny nie zaprzestawały masowej produkcji szkodliwych substancji, np. tetraetylołowiu  $Pb(C_2H_5)_4$  dodawanego do benzyn w charakterze środka przeciwstukowego [22]. Abstrahując od przypadków nieuczciwych zachowań podyktowanych żądzą zysku, uwypuklić trzeba ważką rolę bliskiej kooperacji nauki z biznesem, intensyfikującej rozkwit i transfer nowości korespondujących z teraźniejszymi problemami. Świetny przykład stanowi historia technologii otrzymywania kwasu octowego w trakcie karbonylowania metanolu:



Rozwijali ją kolejno chemicy pracujący dla trzech firm: BASF, Monsanto<sup>21</sup> i BP Chemical. Jako indywiduum aktywnego katalitycznie<sup>22</sup>, koniecznego dla zajścia reakcji opisanej ogólnym równaniem (1), używali oni połączenia kompleksowego, zawierającego po dwa ligandy jodkowe  $I^-$  i karbonylkowe  $CO$ , opartego na kationie centralnym – odpowiednio – kobaltu, rodu i irydu [25]. W takiej sekwencji modyfikacji optymalizowano proces, czyniąc go coraz bardziej ekologicznym dzięki sukcesywnemu obniżaniu wymaganej temperatury i ciśnienia. Realizuje on założenia składające się na filozofię zielonej chemii [26].

## Zielona chemia

W latach dziewięćdziesiątych XX wieku Paul Anastas<sup>23</sup> i John Warner<sup>24</sup> ogłosili koncepcję zielonej chemii, określanej czasem mianem chemii zrównoważonej, stawiającej za cel nadrzędny zmniejszenie lub wyeliminowanie negatywnych skutków dla środowiska [27]. Dwanaście zasad krystalizuje proekologiczne kierunki dążeń współczesnych chemików oraz definiuje kompleksowe kryterium ewaluacji działalności związanej z chemią. Postulaty

---

<sup>19</sup> Istotnymi zaletami ekologicznymi tworzyw sztucznych są niska energochłonność procesu produkcyjnego i łatwość ponownego przerobu.

<sup>20</sup> Niektórzy działacze organizacji humanitarnych odradzają posługiwanie się terminem „Trzeci Świat” ze względu na jego nieaktualność i wartościujący wydźwięk [21].

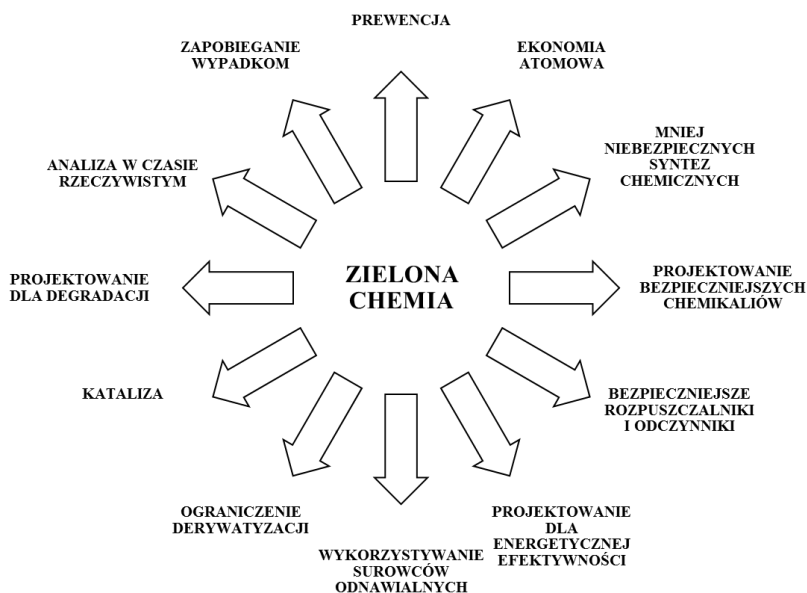
<sup>21</sup> Koncern Monsanto Company jest obecnie kojarzony, także w Polsce, głównie z kontrowersjami dotyczącymi jego funkcjonowania na rynku organizmów modyfikowanych genetycznie [23].

<sup>22</sup> Kataliza jest zwiększeniem szybkości reakcji chemicznej ze względu na udział substancji zwanej katalizatorem. W przeciwieństwie do innych odczynników, które uczestniczą w reakcji chemicznej, katalizator nie zużywa się [24].

<sup>23</sup> Paul T. Anastas – doradca naukowy Agencji Ochrony Środowiska USA; asystent – administrator ds. badań i rozwoju nominowany przez prezydenta Baracka Obamę; dyrektor Centrum Zielonej Chemii i Zielonej Inżynierii w Yale University.

<sup>24</sup> John C. Warner – kierownik, dyrektor ds. technologii i prezes zarządu Warner Babcock Institute for Green Chemistry; redaktor naczelny czasopisma Green Chemistry Letters and Reviews.

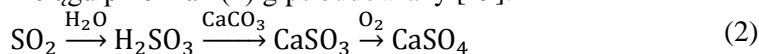
zielonej chemii pierwotnie odnoszą się przede wszystkim do technologii, jednakże wskazują one trafnie kwestie zasadnicze w chemii i stąd mogą być podstawą dalece szerszej dyskusji. Rysunek 4. eksponuje hasłowe wersje wszystkich reguł.



**Rysunek 4. Zasady zielonej chemii**

Źródło: opracowanie własne na podstawie [27]

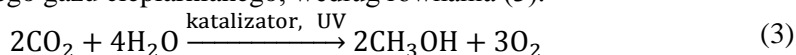
Prewencja w ogólności ma opierać się na unikaniu wytwarzania odpadów. Preferowane są zatem syntezy bez produktów ubocznych, w wyniku których dostaje się wyłącznie substancje użyteczne – jedną albo kilka (możliwych do sprawnego rozdzielania). Powstające w toku licznych procesów przemysłowych gazy odlotowe, odpady ciekłe i stałe<sup>25</sup> cechuje niefunkcjonalność oraz w konsekwencji uciążliwość środowiskowa tylko, jeżeli nie zostaną one zagospodarowane. Zaleca się sprzężanie technologii ze sobą w ten sposób, aby odpad pierwszej służył jako surowiec drugiej. Właśnie w tym duchu utrzymany jest projekt Konsorcjum „Zielona Chemia” pod przewodnictwem naukowców z Uniwersytetu Przyrodniczego w Poznaniu [28]. Polega on na opracowaniu technologii mikrobiologicznej konwersji odpadowej gliceryny z produkcji estrów metylowych (tzw. biodiesla) do propano-1,3-diolu, erytritolu, kwasu bursztynowego i fumarowego – związków o zastosowaniach ukazanych na rysunku 5. *Casus* Elektrowni Jaworzno III uwidacznia wagę chemii w czynieniu sektora energetycznego ekologiczniejszym. Niebezpieczny tlenek siarki(IV) SO<sub>2</sub> – rezultat spalania ziasarczonego węgla kamiennego – pochłania się, uzyskując w prostym ciągu przemian (2) gips budowlany [29]:



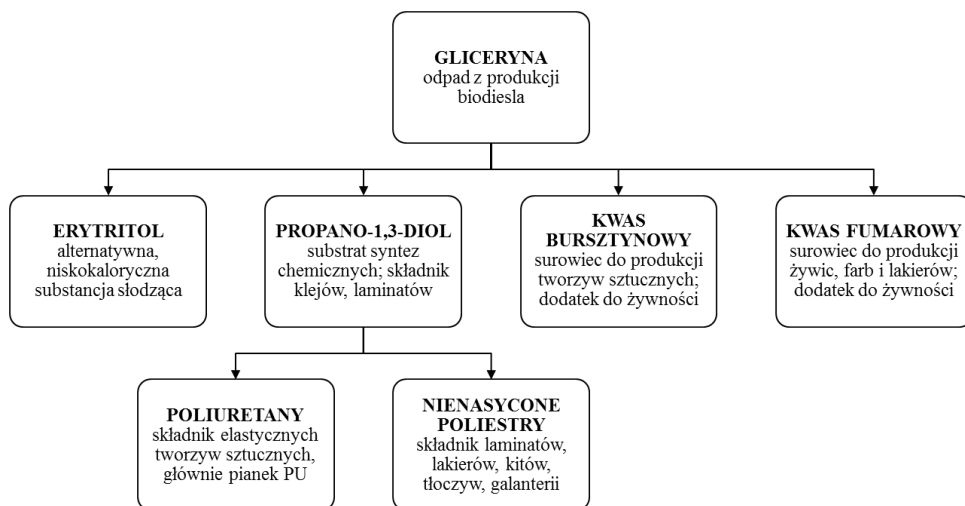
Spore emocje budzi „sztuczna fotosynteza” Dobiesława Nazimka, pracownika Uniwersytetu Marii Curie – Skłodowskiej w Lublinie [30]. Pozwala ona w zamyśle

<sup>25</sup> Podział odpadów materialnych na podstawie stanu skupienia. Odpad niematerialny to ciepło.

na produkcję metanolu  $\text{CH}_3\text{OH}$  z wody i tlenku węgla(IV), głównego antropogenicznego gazu cieplarnianego, według równania (3):



Wyizolowany metanol zamierza się przekształcać w benzynę dzięki zreferowanej już w latach siedemdziesiątych ubiegłego wieku syntezie *methanol to gasoline* [31].



**Rysunek 5. Schemat ideowy projektu Konsorcjum Naukowego „Zielona Chemia”**

Źródło: opracowanie własne na podstawie [28]

Sprowadzanie badań w zakresie chemii do ustawicznego powiększania zbioru znanych molekuł<sup>26</sup> implikuje zarzut bezrefleksyjnego generowania odpadów. W rzeczywistości, wiadomość o uzyskaniu nowej cząsteczki rzadko spotyka się dzisiaj w kręgach chemików z dużym zainteresowaniem<sup>27,28</sup>. Odrzucając mentalne anachronizmy, powtarzają oni za zmarłym w 2005 roku Hammondem<sup>29</sup>: *Najbardziej fundamentalnym i trwałym celem syntezy nie jest produkcja nowych związków, ale produkcja właściwości* [32,35]. Znajdowanie pożądanych cech ma żmudny przebieg, będąc długim łańcuchem epizodów preparatyczno – metrologicznych. Ilości substancji, wytwarzanych po kolei w laboratorium, są niewielkie – łączy się to z intencjonalną konstrukcją urządzeń pomiarowych, lecz również z ekonomią i ekologią. Postępowanie poznawcze próbuje się uefektywniać za sprawą modelowania molekularnego, tj. rozmaitych obliczeń bazujących na strategiach

<sup>26</sup> Zwanego faktyczną przestrzenią chemiczną (*Factual Chemical Space*; FCS) obok wirtualnej przestrzeni chemicznej (*Virtual Chemical Space*; VCS) [32].

<sup>27</sup> Szerokim echem odbijają się natomiast informacje o opracowaniu nowej metody syntetycznej, lepszej alternatywy starych procedur bądź szansy na otrzymywanie nieosiągalnych dotąd struktur, co jest wydarzeniem nie tak częstym.

<sup>28</sup> Nowego związku chemicznego nawet nie obejmuje ochrona patentowa, chyba że w zgłoszeniu poda się jego konkretne zastosowanie [33,34].

<sup>29</sup> George S. Hammond – profesor chemii w Iowa State University i California Institute of Technology; autor ważnej w chemii organicznej hipotezy, tzw. postulatu Hammonda.



matematyki statystycznej<sup>30</sup> i chemii teoretycznej<sup>31</sup> [37]. W obrębie chemoinformatyki, rozumianej przez wykorzystywanie metod informatycznych do rozwiązywania problemów chemicznych, na uwagę zasługują badania QSAR<sup>32</sup> [38]. Ich istotę stanowi poszukiwanie korelacji pomiędzy deskryptorami molekularnymi<sup>33</sup>, opisującymi określone przymioty strukturalne lub fizykochemiczne, a aktywnością biologiczną, by na gruncie formułowanych zależności funkcyjnych typować związki jako potencjalne substancje lecznicze [32]. Wśród technik chemii kwantowej niesłabnącą popularnością cieszą się kalkulacje DFT<sup>34</sup> (oraz TDDFT<sup>35</sup>). W oparciu o przewidywany rozkład gęstości elektronowej stanu podstawowego (i jego zmiany w czasie przejść elektronowych) dla zadanej cząsteczki, prognozują one geometrię, energie i długości wiązań, reaktywność, właściwości elektryczne, magnetyczne oraz optyczne (absorpcyjne i emisyjne), sygnalizując przydatność aplikacyjną [39]. Choć chemia *in silico*<sup>36</sup> bywa nieraz zawodna<sup>37</sup>, można upatrywać w niej przyszłości zielonej chemii na polu R&D<sup>38</sup>, ponieważ szkodzi środowisku infinitezymalnie.

Do pryncypialnej zasady prewencji przystają dalsze. Wykonanie reakcji na wybranym fragmencie molekuly rodzi czasami konieczność uprzedniego zabezpieczenia innego przed naruszeniem – za pośrednictwem adekwatnych grup blokujących. Rekomenduje się ograniczanie takich zabiegów derywatyzacji, finalnie odpadotwórczych, faworyzując drogi syntetyczne obchodzące się bez nich. Ekonomia atomowa promuje wkomponowywanie w produkt maksymalnego odsetka atomów wziętych do procesu. Substraty powinny więc reagować z dobrą wydajnością, najlepiej w jednoetapowej<sup>39</sup> addycji (np. równanie 1) albo izomeryzacji<sup>40</sup>. Bacząc na całość masy surowcowej, dezawuuje się używanie rozpuszczalników (poza ewentualnymi wyjątkami takimi jak woda), a także katalizatorów w ilościach obfitych, proporcjonalnych względem reagentów (czyli stechiometrycznych). Syntezy szybkie, proste (ale o dużych możliwościach), odpowiadające powyższemu wytycznym kwalifikuje się do nurtu *click chemistry*<sup>41</sup> –

<sup>30</sup> Statystyczną analizą złożonych danych chemicznych zajmuje się chemometria [32].

<sup>31</sup> Na trzech polskich chemików najczęściej cytowanych w latach 1965 – 2001, dwaj to teoretycy: Włodzimierz Kołos i Andrzej Sadlej [36]. Chemia teoretyczna w Polsce przedstawia wysoki poziom, gdyż jej uprawianie wymaga relatywnie mniejszych nakładów finansowych.

<sup>32</sup> Ilościowe zależności struktura – aktywność (*Quantitative Structure – Activity Relationships*; QSAR).

<sup>33</sup> *Exempli gratia*, deskryptorem molekularnym jest lipofilowość [32]:

$$\log P = \log \frac{c_o}{c_w}$$

gdzie:  $P$  – współczynnik podziału między n-oktanol i wodę,  $c_o$ ,  $c_w$  – stężenia rozważanego związku, odpowiednio, w fazie n-oktanolu i fazie wodnej.

<sup>34</sup> Teoria funkcjonałów gęstości (*Density Functional Theory*; DFT).

<sup>35</sup> Teoria funkcjonałów gęstości zależnych od czasu (*Time – Dependent DFT*; TDDFT).

<sup>36</sup> *In silico* („w krzemie”) – termin ukuty przez analogię do *in vivo* i *in vitro*, odnoszący się do operacji wykonywanych za pomocą komputera.

<sup>37</sup> Sildenafil, aktualnie stosowany głównie w leczeniu zaburzeń erekcji jako Viagra™, zaprojektowano w założeniu dla terapii nadciśnienia tętniczego i dławicy piersiowej [40].

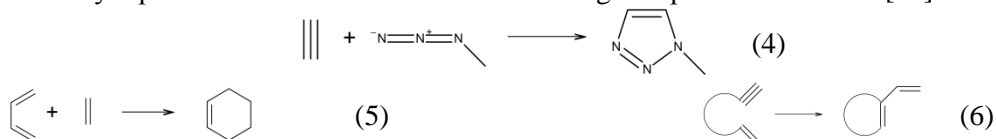
<sup>38</sup> Badania i rozwój (*Research and Development*; R&D).

<sup>39</sup> Jeśli synteza ma dziesięć etapów o doskonałych wydajnościach równych 90%, jej wydajność całkowita wynosi zaledwie  $0,9^{10} \approx 35\%$ .

<sup>40</sup> Izomeryzacja – transformacja polegająca *de facto* na reorganizacji atomów, dająca produkt o odmiennym ich połączeniu lub ułożeniu przestrzennym (przy identycznym składzie) [24].

<sup>41</sup> Reakcje chemiczne jak kliknięcie (myszą komputerową).

reprezentują go niektóre praktyczne warianty [35]: 1,3-dipolarnej cykloaddycji azydów do alkinów (równanie 4), cykloaddycji Dielsa – Aldera (równanie 5) czy wewnątrzcząsteczkowego enynowego typu metatezy (równanie 6), pozostającej centralnym przedmiotem badań m.in. warszawskiego zespołu Karola Greli [41].



Kolejne własności idealnych syntez to: niewrażliwość na wilgoć i powietrze atmosferyczne, dostępność oraz nietoksyczność wyjściowych odczynników, egzotermiczność (zachodzenie nie z pobieraniem ciepła, lecz jego wydzielaniem). Szereg udoskonaleń, w tym zmniejszanie energochłonności i poprawę selektywności (uprzywilejowywanie jednej reakcji z kilku prawdopodobnych w danym układzie, aby dostawać wybiórczo chciany związek), wprowadza się w życie dzięki znacznemu rozwojowi katalizy. Ponadto, pozwala ona dzisiaj na masową produkcję skomplikowanych substancji występujących w przyrodzie – za dokonania na tej niwie uhonorowano Nagrodą Nobla w 2010 R. F. Hecka, E. Negishi, A. Suzuki [42]. Paradoksem jest demonizowanie sztucznych wyrobów w imię ochrony środowiska, ponieważ ich użytkowanie likwiduje potrzebę niepokojenia zwierząt i nadwątlenia dziko rosnących roślin dla pozyskania małych ilości leku bądź aromatu. Stosowanie syntetycznych odpowiedników urealnia zatem 7. Milenijny Cel ONZ (o zachowaniu zasobów Ziemi) [43], natomiast obawy o ich ustępowaniu w czymś naturalnym wzorcom są bezzasadne – mowa bowiem o zbiorach identycznych cząsteczek, ew. różniących się subtelnie składem izotopowym z powodu bazy chemii organicznej: ropy naftowej, gazu ziemnego i węgla<sup>42</sup>. Ograniczoność pokładów (oraz inne wady) skłania do podejmowania prób zastępowania tych surowców odnawialnymi substytutami, np. opracowano biotechnologiczną syntezę kwasu adypinowego (do otrzymywania nylonu 66) z glukozy zamiast kancerogenego benzenu (składnika ropy naftowej) [44]. Woda jako zasób odnawialny stanie się zaś być może źródłem wodoru – tzw. „paliwa przyszłości”, za czym przemawia odkrycie z 2011 na temat wysokiej skuteczności elektrolizy wody przy udziale powszechnych w naturze siarczków molibdenu [45].

## Zakończenie

Chemicy, będąc grupą bezpośrednio narażoną na swoje nie najlepsze pomysły, stale poszukują rozwiązań zgodnych z polityką zrównoważonego rozwoju. Coraz częściej uciekają się do narzędzi znanych w naukach o zarządzaniu. Wytyczne cele oceniają przez pryzmat kryterium SMART<sup>43</sup> – biorąc pod uwagę postulat mierzalności, posługują się zdefiniowanymi ilościowo parametrami ekonomii atomowej [47]. Sporządzają również analizę SWOT<sup>44</sup>, np. dla zagadnienia cieczy jonowych [48] – potencjalnej alternatywy tradycyjnych rozpuszczalników.

<sup>42</sup> Obecne w przyrodzie ślady promieniotwórczego izotopu węgla C-14 w tych wiekowych materiałach zdążyły już całkowicie ulec rozpadowi.

<sup>43</sup> Akronim od słów: *Specific, Measurable, Achievable, Relevant, Time – bound* [46].

<sup>44</sup> Akronim od słów: *Strengths, Weaknesses, Opportunities, Threats* [48].

## Literatura

- [1] The International Year of Chemistry 2011 [online], [dostęp: 12 maja 2011], Dostępny w Internecie: <http://www.chemistry2011.org/>.
- [2] The UN Decade of Education for Sustainable Development [online], [dostęp: 12 maja 2011], Dostępny w Internecie: <http://www.desd.org/>.
- [3] Lederman L., Teresi D., The god particle: if the universe is the answer, what is the question?, Mariner Books, New York 2006, 12 – 13.
- [4] Waldner R., *Chimia* 1996, 50 (5), 189 – 190.
- [5] Adams W. M., The Future of Sustainability: Re – thinking Environment and Development in the Twenty – first Century. Report of the IUCN Renowned Thinkers Meeting, 29 – 31 January 2006.
- [6] United Nations, Report of the World Commission on Environment and Development. General Assembly Resolution 42/187, 11 December 1987.
- [7] Wackernagel M., Rees W., Our Ecological Footprint. Reducing Human Impact on the Earth, New Society Publishers, Gabriola Island 1996.
- [8] Rionda Z. L., Baird V., Kramer C., Wofford D., What is Corporate Social Responsibility?, Catalyst Consortium, Washington 2002.
- [9] Portal Funduszy Europejskich. Program Innowacyjna Gospodarka [online], [dostęp: 13 maja 2011], Dostępny w Internecie: <http://www.poig.gov.pl/>.
- [10] Lista beneficjentów Programu Innowacyjna Gospodarka [online], [dostęp: 13 maja 2011], Dostępny w Internecie: [http://www.poig.gov.pl/Strony/lista\\_beneficjentow\\_POIG.aspx/](http://www.poig.gov.pl/Strony/lista_beneficjentow_POIG.aspx/).
- [11] Ustawa z dnia 27 kwietnia 2001 r. Prawo ochrony środowiska (Dz.U. 2001 nr 62 poz. 627).
- [12] Ustawa z dnia 18 lipca 2001 r. Prawo wodne (Dz.U. 2005 nr 239 poz. 2019).
- [13] Ustawa z dnia 11 maja 2001 r. o opakowaniach i odpadach opakowaniowych (Dz.U. 2001 nr 63 poz. 638).
- [14] Ustawa z dnia 11 maja 2001 r. o obowiązkach przedsiębiorców w zakresie gospodarowania niektórymi odpadami oraz o opłacie produktowej i opłacie depozytowej (Dz.U. 2001 nr 63 poz. 639).
- [15] Ustawa z dnia 27 kwietnia 2001 r. o odpadach (Dz.U. 2001 nr 62 poz. 628).
- [16] Regulation (EC) No 1907/2006 of the European Parliament and of the Council of 18 December 2006 concerning the Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals.
- [17] Regulation (EC) No 1272/2008 of the European Parliament and of the Council of 16 December 2008 on classification, labelling and packaging of substances and mixtures.
- [18] Directive 2008/1/EC of the European Parliament and of the Council of 15 January 2008 concerning integrated pollution prevention and control.
- [19] Lipińska – Łuczyn E., Najlepsze Dostępne Techniki (BAT). Wytyczne dla Branży Chemicznej w Polsce: Wielkotonażowe Chemikalia Organiczne, Ministerstwo Środowiska, Warszawa 2005.
- [20] Emsley J., Piękni, zdrowi, witalni..., przeł. A. E. Eichler, P. J. Szvajcer, CiS, Warszawa 2006.
- [21] Wojtalik M., Rozwój i prawo do rozwoju, Materiały opracowane w ramach projektu „Prawa człowieka – perspektywa globalna. Scenariusze zajęć dla dzieci i młodzieży”, Polska Akcja Humanitarna, 2009.
- [22] Seyferth D., The Rise and Fall of Tetraethyllead 2, *Organometallics* 2003, 22, 5154 – 5178.
- [23] Robin M. – M., Świat według Monsanto, Stowarzyszenie Obywatele Obywatelom, 2010.
- [24] IUPAC. Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the “Gold Book”), Compiled by A. D. McNaught and A. Wilkinson, Blackwell Scientific Publications, Oxford 1997.
- [25] Sunley G. J., Watson D. J., High productivity methanol carbonylation catalysis using iridium. The Cativa™ process for the manufacture of acetic acid, *Catalysis Today* 2000, 58, 293 – 307.
- [26] Loch J. A., Crabtree R. H., Rapid screening and combinatorial methods in homogeneous organometallic catalysis, *Pure Appl. Chem.* 2001, Vol. 73, No. 1, 119 – 128.
- [27] Anastas P. T., Warner J. C., Green Chemistry: Theory and Practice, Oxford University Press, New York 1998.
- [28] Konsorcjum Naukowe „Zielona Chemia” [online], [dostęp: 15 maja 2011], Dostępny w Internecie: <http://zielonachemia.org.pl/>.
- [29] Instalacja Odsiarczania Spalin [online], [dostęp: 15 maja 2011], Dostępny w Internecie: <http://www.pl.ej3.pkesa.com/content/instalacja-odsiarczania-spalin/>.
- [30] Nieśpiał T., Benzyna z dwutlenku węgla to nie science fiction, *Rzeczpospolita* 2009, 8363, 3 – 4.

- [31] Nazimek D., Zespolecie technologii MTG (methanol to gasoline) z nowymi procesami wytwarzania metanolu jako sposób na pozyskiwanie paliw syntetycznych, *Biuletyn Polskiego Stowarzyszenia Wodoru i Ogniw Paliwowych* 2010, 5, 71 – 83.
- [32] Polański J., Bąk A., Podstawy chemoinformatyki leków, Oficyna Wydawnicza Waclaw Walasek & Uniwersytet Śląski, Katowice 2010.
- [33] Ustawa z dnia 30 czerwca 2000 r. Prawo własności przemysłowej (Dz.U. 2003 nr 119 poz. 1117).
- [34] Wytyczne Prezesa Urzędu Patentowego RP, w zakresie interpretacji wybranych przepisów ustawy z dnia 30 czerwca 2000 r. – Prawo własności przemysłowej (Dz.U. z 2003 r. Nr 119, poz. 1117, z późn. zm.) oraz przepisów wykonawczych.
- [35] Kolb H. C., Finn M. G., Sharpless K. B., Click chemistry: diverse chemical function from a few good reactions, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2001, 40, 2004 – 2021.
- [36] Pilc A., Najczęściej cytowani naukowcy oraz prace naukowe w Polsce, raport za lata 1965 – 2001 na podstawie bazy Science Citation Index, dotyczącej wszystkich światowych publikacji, *Zagadnienia Naukoznawstwa* 2002, 32 (1-2), 65 – 82.
- [37] Molnet.eu: ...aby modelowało się lepiej [online], [dostęp: 16 maja 2011], Dostępny w Internecie: <http://www.molnet.eu/>.
- [38] Gasteiger J., Chemoinformatics: a new field with a long tradition, *Anal. Bioanal. Chem.* 2006, 384, 57 – 64.
- [39] Jaworska M., Musiał M., Pluta T., Wybrane zagadnienia chemii kwantowej, Drukarnia GS Sp. z o.o. & Uniwersytet Śląski, Katowice 2009.
- [40] Terrett N. K., Bell A. S., Brown D., Ellis P., Sildenafil (Viagra™), a potent and selective inhibitor of type 5 cGMP phosphodiesterase with utility for the treatment of male erectile dysfunction, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 1996, 6, 1819 – 1824.
- [41] Gawin R., Czarnecka P., Grela K., Ruthenium catalysts bearing chelating carboxylate ligands: application to metathesis reactions in water, *Tetrahedron* 2010, 66, 1051 – 1056.
- [42] The Nobel Prize in Chemistry 2010 [online], [dostęp: 18 maja 2011], Dostępny w Internecie: [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/2010/](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2010/).
- [43] UN Millennium Development Goals [online], [dostęp: 18 maja 2011], Dostępny w Internecie: <http://www.un.org/millenniumgoals/>.
- [44] Niu W., Draths K. M., Frost J. W., Benzene-Free Synthesis of Adipic Acid, *Biotechnology Progress* 2002, 18, 201 – 211.
- [45] Merki D., Fierro S., Vrabel H., Hu X., Amorphous molybdenum sulfide films as catalysts for electrochemical hydrogen production in water, *Chem. Sci.* 2011, 2, 1262 – 1267.
- [46] Doran G. T., There's a S.M.A.R.T. way to write management's goals and objectives, *Management Review* 1981, 70, 35 – 36.
- [47] Sheldon R. A., Atom efficiency and catalysis in organic synthesis, *Pure Appl. Chem.* 2000, 72, 1233 – 1246.
- [48] Deetlefs M., Seddon K. R., The Green Synthesis of Ionic Liquids, *Handbook of Green Chemistry*, 2010, 1 – 38.

Równania (4-6) napisano przy użyciu programu Accelrys Draw 4.0 firmy Accelrys, Inc.