

Review Paper / Derleme Makalesi
ATOM ECONOMY AND OTHER GREEN REACTION METRICS**Melike KOÇOĞLU KALKAN****Ankara Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, Beşevler-ANKARA***Received/Geliş: 07.09.2011 Revised/Düzelme: 02.12.2011 Accepted/Kabul: 12.12.2011****ABSTRACT**

A key goal must be synthetic efficiency in planning an organic synthesis. The prime focal point of synthetic efficiency is selectivity and the second point is the amount of reactants converted to products at the end of the reaction. However, in the investigation of the synthetic efficiency, the second point is frequently overlooked although it is feature for the atom economy. Atom economy is the factors that control a synthesis to get the highest yield and chemoselectivity. The ideal reaction would incorporate all of the atoms of the reactants and ideal processes include limited raw materials and decreased emissions and waste disposal. Due to the solution of the selectivity problem, most reactions have gained importance and economic mass conversion has not been investigated seriously. Following the introduction of the term atom economy in the early 1990's, most chemists have changed their synthetic plans and designs and developed both selective and atom economic alternative processes. The first aim is the development of synthetic methods requiring only catalytic quantities of "catalysts". For this purpose, transition metal complexes are powerful and convergent molecules for the synthesis with high atom economy. In addition, the limited raw materials and increased sensitivity for the environment requires the reinvestigation of the synthetic plans for complex organic reactions and this is also the subject of green chemistry. The applications of green chemistry are helpful in achieving the more effective use of limited raw materials, the formation of less side product and waste minimisation. However, atom economy concept is not sufficient alone to tell the efficacy or greenness of a chemical reaction. So, other reaction metrics have been offered.

Keywords: Atom economy, green chemistry, reaction metrics.

ATOM EKONOMİSİ VE DİĞER YEŞİL REAKSİYON ÖLÇÜMLERİ**ÖZET**

Bir organik sentezin plânlanmasında temel amaç, sentetik etkinlik olmalıdır. Sentetik etkinliğin birinci temel özelliği seçicilik (selektiflik), ikinci özelliği çıkış maddelerinin reaksiyon sonunda ne kadarının ürüne dönüştüğüdür. Fakat, sentetik etkinlik araştırılırken bu ikinci özellik, atom ekonomisi için önemli bir nitelik olmakla beraber, çoğunlukla göz ardı edilir. Atom ekonomisi, en yüksek verim ve ürün seçiciliği elde etmek için kimyasal sentezi yöneten faktörlerdir. İdeal reaksiyonda ürün, çıkış maddelerinin bütün atomlarını içerir; ideal proseslerde ise, belli miktarda çıkış maddelerini, azaltılmış kayıpları ve işe yaramayan atıkları içerir. Pek çok reaksiyon, seçicilik problemi çözüldüğünden dolayı önem kazanmıştır ve kütleli ekonomik dönüşümü ciddi olarak araştırılmıştır. Atom ekonomisi kavramı 90' lı yılların başında ortaya atıldıktan sonra pek çok kimyacı sentez plânlarını ve tasarımlarını değiştirmiş ve hem seçici ve hem de atom ekonomik olan alternatif prosesler geliştirmiştir. İlk amaç, "katalizörlerin" katalitik miktarına gereksinim olan sentetik yöntemlerin geliştirilmesidir. Bu amaçla, yüksek atom ekonomisine sahip sentezler için geçiş metali katalizörleri kullanılmaktadır. Ayrıca ham maddelerin sınırlı olması, çevreye karşı duyarlılığın artması kompleks organik reaksiyonlar için sentez tasarımlarının tekrar gözden geçirilmesini gerektirmektedir; bu ise aynı zamanda "yeşil kimya" nın konusudur. Yeşil kimya uygulamaları, sınırlı hammaddenin daha etkili kullanımını, daha az yan ürün oluşmasını ve atığın minimum olmasını sağlar. Fakat atom ekonomisi kavramı, bir kimyasal reaksiyonun etkinliğini veya ne kadar yeşil olduğunu anlatmak için tek başına yeterli değildir. Bu nedenle diğer reaksiyon ölçümleri önerilmiştir.

Anahtar Sözcükler: Atom ekonomisi, reaksiyon ölçümleri, yeşil kimya.

* mkocoglu@science.ankara.edu.tr, tel: (312) 212 67 20 / 1397

1. GİRİŞ

Organik sentezde temel amaç, başlangıç maddelerini hedeflenen maddeye dönüştürmede sentetik etkiliktir. Sentetik bir reaksiyonu tasarlarken birincil önemli özellik seçicilik (selektiflik) (kimyasal seçicilik, yer seçiciliği, stereo seçicilik) tir. İkinci önemli özellik, çıkış maddelerinin ne kadarının ürüne dönüştüğüdür ve çoğunlukla göz ardı edilir. Bazı reaksiyonlarda seçicilik problemini çözebilmek için ekonomik olmayan kütle kullanımı göz ardı edilmiştir. Bu sorun günümüze dek çözülememiştir. Fakat günümüzde ham madde kaynaklarının azalması ve kimyasal atıkların oluşması, çevreye karşı duyarlılığın artması, sosyal alanda olduğu gibi kimya alanında da yeni acil önlemler alınmasını zorunlu kılmıştır [1, 2].

Atom ekonomisi terimi yerine atom yararlılığı (Ing. Atom Utilization, AU) ve atom etkinliği (Ing. Atom Efficiency, AE) terimleri de kullanılmaktadır [3, 4]. 1991'de Trost tarafından atom ekonomisi kavramı ortaya atılmış ve en yaygın bilinen şeklini almıştır. Atom ekonomisi, bütün çıkış maddelerindeki atomların çoğunun üründe maksimum oranda yer almasıdır. İdeal reaksiyonda ürün, çıkış maddelerindeki tüm atomları içerir. Eğer ideal reaksiyon yürütülemiyorsa, yan ürünlerin miktarı çok az olmalı ve çevreye zarar vermemelidir. Atom ekonomisi, sınırlı hammaddenin daha etkili kullanımını, daha az yan ürün oluşmasını ve atığın olmasını sağlar. Yaklaşık iki yüzyıl kadar önce organik bileşiklerin sadece biyolojik proseslerle elde edilebilir olduğuna inanılırdı. Oysa ki günümüzde büyük kompleks moleküller sentezlenebilmektedir. Bu başarıyla birlikte gelecekte kimyasal sentezde büyük bir tehditle yüz yüzeyiz. Çünkü, günümüzde sentezlenen kimyasal ürünler için oluşturulan prosesler oldukça verimsizdir. Örneğin, yer değiştirme ve ayrılma reaksiyonları önüne geçilmez atıkların olduğu ve ekonomik olmayan klâsik reaksiyonların önemli türleridir. Atom ekonomisi kavramı bu verimsizliğin önemini vurgulamaktadır. Kimyasal ve farmasötik ürünlerin sentezinde her kilogram için 5-100 kat kimyasal atık oluşmaktadır [5]. Böyle düşük etkinlikteki sentetik prosesler, doğal kaynakları, çevreyi ve insan sağlığını korumada büyük tehdit oluşturmaktadır. Bu nedenle, kimya alanından sağlık hizmetlerine kadar uzanan, toplumun ihtiyaçlarına hizmet eden gerekli çok sayıda substratın üretimi sadece seçiciliğe göre değil atom ekonomisini arttırmaya yönelik de yapılmalıdır.

Kimyacıların önünde iki seçenek vardır: (i) Yeni atom ekonomik reaksiyonlar geliştirmek ve (ii) Atom ekonomik olmayan reaksiyonların daha atom ekonomik yeni yollarını geliştirmek. (ii) daha uzun vadeli, fakat üstünde sürekli çalışılacak bir konudur. Sentetik reaksiyonlarda pek çok etkin ara ürün koşulların zorluğu, ya da yüksek reaktiflikleri nedeniyle kolay bir şekilde katılmaz. Geçiş metal kompleksleri veya bileşikleri ile kataliz bu tür etkin ara ürünleri ılıman koşullarda oluşturmada ve katalizörlerde çevre dostu ligand yapılarla seçiciliği ayarlamaktadır. Bu nedenle, geçiş metali katalizi, atom ekonomisi konusunda yeni bir proses geliştirmekten çok, varolan prosesleri geliştirmek açısından temel rol oynamaktadır. Geçiş metali katalizli, yüksek atom ekonomisine sahip prosesler günümüzde oldukça ilgi çeken bir araştırma konusudur. Son yıllarda hem seçici ve hem de atom ekonomik olan alternatif prosesler geliştirilmiştir [6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15]. Hidroformilleme, Ziegler Natta polimerizasyonu, hidrosiyanürleme gibi yeni prosesler hem seçici hem de atom ekonomik proseslerin en iyi örneklerindedir.

Bir kimyasal reaksiyonla ilgili bilinen en eski ölçülebilir değer, % verimdir. Reaksiyon verimi, sadece istenilen ürünün miktarıyla ilgilenirken, atom ekonomisi, bütün kullanılan reaktifler ve istenmeyen yan ürünleri istenilen ürünle birlikte hesaba katar. Atom ekonomisi (kısaca AE), sadece stokiometrik eşitliğin kütleyle bağlı ifadesidir (1).

$$\% \text{ Atom ekonomisi} = \frac{\text{Hedef ürünün mol kütlesi (g/mol)}}{\text{Reaksiyonda kullanılan reaktiflerin mol kütleleri toplamı (g/mol)}} \times 100 \quad (1)$$

Çıkış maddesi karmaşık deđilse, tek basamaklı sentezde atom ekonomisinin alternatif bir yonteme göre önemi açıktır. Fakat, böyle reaksiyonlar oldukça sınırlıdır. Genelde sentezler birkaç basamaktan oluşmaktadır. Güvenilir sonuçlar almak için son sentez basamağında kullanılan çıkış maddelerine götüren sentez sırasını bütünleştirmek gerekir. Bir sentez zinciri için toplam verim, her bir basamağın verimi bir önceki basamağın verimiyle orantılanarak en son basamakta elde edilen deđerdir. Fakat bu işlem atom ekonomisi için uygulanamaz. Bu nedenle verim tek bir çıkış maddesinden ürün oluşmasına bađlıyken, atom ekonomisi bütün çıkış maddelerini içerir. Böylece ürün tüm reaksiyon dizisinde yer alan bütün çıkış maddelerine bađlı olmaktadır. Sonuç olarak, atom ekonomisi eşitliğinin paydasındaki her çıkış maddesi bundan önceki basamakların çıkış maddeleri ile yer deđiştirilmelidir. Bu ara ürünlerin stokiyometrik katsayılarını dikkate almak gerekir. Sentez basamaklarının sayısı, sentez dizisinin atom ekonomisinin belirlenmesini önleyebilir. Stokiyometrik katsayılar 1'e eşit deđilse olumsuz katkıda bulunur. Daha da kötüsü sentez tasarımında düşünülmesi ve kıyaslanması gereken birçok farklı dizi vardır. Bu amaçla, başarılı sonuç veren bir yöntem geliştirilmiştir [16].



reaksiyonunun atom ekonomisi,

$$\% AE = \frac{M_C}{M_A + M_B} \times 100 \quad (3)$$

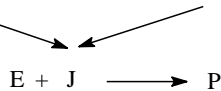
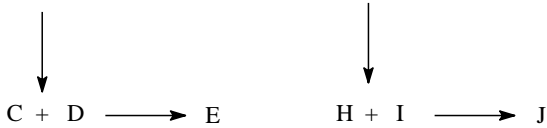
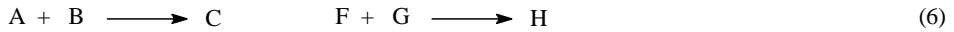
formülü ile hesaplanır. Aşağıdaki sentez zincirinin atom ekonomisi ise,



$$\% AE = \frac{M_G}{M_A + M_B + M_D + M_F} \times 100 \quad (5)$$

formülü ile hesaplanır.

İki veya daha fazla basamağa ayrılan prosesler için (6) atom ekonomisi hesaplanmasında çıkış maddelerinin hepsi hesaba katılır; fakat tekrar reaksiyona giren ürünler hesaba katılmaz (7).



$$\% AE = \frac{M_P}{(M_A + M_B + M_D + M_F + M_G + M_I)} \times 100 \quad (7)$$

Atom ekonomik bir reaksiyon aynı zamanda yeşil bir reaksiyondur. Çünkü, yeşil kimyanın temel amacı, çıkış maddelerinin kullanım etkinliğini arttırmak ve atık oluşumunu en aza indirmektir; diğer bir deyişle çevre dostu ürünleri ve prosesleri tasarlamaktır. Yeşil kimya, kimyasal ürünlerin uygulamalarında ve üretiminde atık maddelerden (tercihen yenilenebilir) etkin bir şekilde yararlanır; atıkları yok eder ve toksik ve / veya tehlikeli reaktif ve çözücülerin kullanımından kaçınır. Yeşil kimyanın 12 temel prensibinin hepsi kalitatif olduğu halde [17], atom ekonomisi miktar belirten ve kantitatif kıyaslama sağlayan bir ölçümdür. Bu nedenle atom ekonomisi (AE), son yıllarda organik kimyada oldukça ilgi çekmiştir. Stokiyometrik eşitlik nedeniyle ürünlerin çıkış maddelerine oranı % 100 e yakın olduğu zaman, reaksiyon yüksek sentetik etkinlik ve yüksek atom ekonomisine sahip olarak değerlendirilir. Yani, ürün çıkış maddelerindeki atomların tümünü veya çoğunu içerir. Çıkış maddeleri ziyan olmaz veya çok azı ziyan olur. Fakat katalizör, katkı maddesi ve çözücü gibi reaksiyon değişkenleri de göz önüne alınırsa, çıkış maddelerinin tamamlanmamış dönüşümü de olsa reaksiyon yine başarısız olacaktır.

Organik sentezde amaç, etkili ve çevre dostu veya yeşil kimyasal reaksiyonlar ve prosesler yapmaya çalışmaktır. Bunun için mümkün olduğu kadar kantitatif olarak kimyasal reaksiyonların yeşilliğini değerlendirme ve ölçme gereksinimi bulunmaktadır. Yeşil ölçümler olarak adlandırılan bu kavramlarla ilgili tartışmalar literatürde bulunabilir [18, 19].

2. REAKSİYON SINIFLARINA GÖRE ATOM EKONOMİSİ DEĞERLENDİRMESİ

Çok bileşenli reaksiyonlar- Hepsi oldukça atom ekonomik reaksiyonlardır.

C-C bağı oluşma reaksiyonları- Karbonlu ara ürünlerin birleşmesiyle mol kütlesi arttığı için atom ekonomisi de artar.

C-X bağı oluşma reaksiyonları- Karbonlu ve heteroatomlu ara ürünlerin birleşmesiyle mol kütlesi arttığı için atom ekonomisi de artar.

Kondenzasyon reaksiyonları- Su veya alkol gibi küçük moleküller ayrıldığı için oldukça atom ekonomiktir. Karbonlu ara ürünlerin birleşmesiyle molekül kütlesi arttığı için atom ekonomisi artar. Halkalaşma reaksiyonlarında halka büyüdükçe atom ekonomisi artar.

Yükseltgenme –İndirgenme reaksiyonları- Hepsi çok düşük atom ekonomisine sahiptir (katalitik hidrojenleme ve O₂ veya H₂O₂ ile yükseltgenme reaksiyonları hariç). İndirgeme ve yükseltgeme araçlarının sırasıyla yükseltgenmesi ve indirgenmesiyle sonuçlanan önemli atık yan ürünler oluşur. Yükseltgeme ve indirgeme araçlarının orijinal haline geri dönüşümü için bir başka yükseltgenme indirgenme çifti gereklidir.

Çevrilme reaksiyonları- Çıkış maddesinin çevrilme reaksiyonu her zaman % 100 atom ekonomisine sahiptir. Bazı çevrilme reaksiyonları reaksiyon süresince ara ürünlerin çevrilmesini içerir ve bu nedenle onların atom ekonomisi % 100 den daha az olur.

Yerdeğiştirme reaksiyonları- Ayrılan gruptan daha ağır bir grup girerse atom ekonomisi artar, aksi takdirde atom ekonomisi azalır.

Ayrıma reaksiyonları- Yüksek atom ekonomik reaksiyonların oranı düşüktür. Ayrılan grubun molekül kütlesi arttıkça atom ekonomisi azalır.

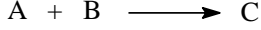
3. DİĞER YEŞİL REAKSİYON ÖLÇÜMLERİ

3.1. Stokiyometrik faktör (İng. Stoichiometric Factor, SF)

Stokiyometrik olmayan koşullarda bir veya daha fazla reaktifin aşırı kullanıldığı reaksiyon gidişini anlatmak için tanımlanan yeni bir ölçümdür [20, 21]. Stokiyometrik reaksiyonlarda SF = 1 dir. Stokiyometrik olmayan reaksiyonlarda SF > 1 dir.

3.2. Reaksiyon kütle etkinliđi (Ing. Reaction Mass Efficiency, RME)

Bu ölçüm kantitatifdir ve dört bağımsız faktöre bađlıdır : reaksiyon verimi, atom ekonomisi, aşırı reaktif kullanımını kapsayan stokiyoimetrik faktör ve çözücü, katalizör ve reaksiyon sonrasında ayırma, saflaştırma gibi işlemlerde kullanılan kimyasalların geri kazanma parametreleri. RME, üründe kalan çıkış maddelerinin kütle yüzdesidir [20, 21]. İki şekilde hesaplanabilir :



reaksiyonun % RME değeri,

$$\% \text{ RME} = \frac{M_C}{M_A + (M_B \times \frac{B}{A} \text{ mol oranı})} \times \text{Verim} \quad (8)$$

olarak hesaplanır. Daha basit olarak,

$$\% \text{ RME} = \frac{m_C}{m_A + m_B} \times 100 \quad (9)$$

dir.

3.3. Çevresel etki faktörü (Ing. Environmental Impact Factor, E)

Sheldon [3, 4, 22] tarafından önerilmiştir. Basit ve kolay anlaşılabilir bir ölçümdür ve ürünün kütlesi için üretilen atığın miktarını tanımlar (10). Bir kimyasal proses için hesaplanan E faktörü ne kadar büyüğe o kadar çok atık oluştuđu anlamına gelir. İdeal olan E faktörünün sıfır olmasıdır. Sheldon'un Çevresel etki faktörü E, oluşan atığı kullanılabilir duruma getirmek için yapılan işlemdir ve RME nin tersi bir ifadedir denilebilir. Atık madde ücretleri, katalizörleri, reaksiyon ve reaksiyon sonrası çözücülerini geri dönüşüm veya kullanılabilir hale getirmek için optimum koşullar değerlendirilir ve izomer ürünler veren reaksiyonların işlemleri de değerlendirilir. Kimya endüstrisinde bađlı israfı gösterir. İlaç endüstrisinde bu ölçüm kullanılır; fakat endüstride kullanımı toplam atığın nasıl tanımlandığı konusundaki eksiklik nedeniyle kullanımı zordur [23].

$$E \text{ Faktörü} = \frac{\text{Toplam atık kütlesi}}{\text{Ürün kütlesi}} \quad (10)$$

3.4. Etkin kütle verimi (Ing. Effective Mass Yield, EMY)

Bu terim Hudlicky ve arkadaşları [24] tarafından önerilmiştir. İstenilen ürünün kütlesinin yararı olmayan bütün reaktiflerin kütlesine yüzde oranı olarak tanımlanır (11).

$$\% \text{ Etkin kütle verimi} = \frac{\text{Ürünlerin kütlesi}}{\text{Yararı olmayan reaktiflerin kütlesi}} \times 100 \quad (11)$$

Bu ölçüm toksik olmayan maddeden elde edilen ürünün kütlesine göre verimi tanımlar. Çıkış maddelerinin zehirliliđinin (toksikite) tanımı oldukça önemlidir ve verim tanımlamalarında sıklıkla işe karıştırılmaz. Bu ölçüm bir reaksiyondaki yan ürünlerin, reaktiflerin ve çözücülerin (çevresel riski olmadığı bilinen su, düşük derişimdeki tuzlu su, seyreltik etanol gibi) zararsızlığını tanımlar. Bu tanım anlaşılamadığından dolayı rađbet görmemektedir. Zehirlilik bilgisi, sınırlı kompleks reaktiflerle çalışılırken uygulanabilirliđi azalır.

3.5. Kütle yoğunluğu (Ing. Mass Intensity, MI)

Kütle yoğunluğu, reaksiyon stokiyometrisini, çözücüyü ve reaksiyonda kullanılan bütün maddeleri hesaba katar ve temel bir ifadedir (12).

$$MI = \frac{\text{Proseste kullanılan toplam kütle}}{\text{Ürünün kütlesi}} \quad (12)$$

İdeal durumda toplam kütle, proses veya proses basamağında çıkış maddeleri, çözücü, katalizör gibi su hariç kullanılan her şeyi içerir. Toplam kütle, ayrıca asit, baz, tuz ve organik çözücü yıkamaları ve ekstraksiyon, kristallendirme veya çözücü değişimi için kullanılan organik çözücülerdeki tüm kütleleri de içerir. Su, birçok proseste kütle bilgilerini karıştırdığından kütle hesaplamalarının dışında tutulur. Çevresel etki faktörü ile kütle yoğunluğu arasındaki ilişki şu şekildedir :

$$E \text{ Faktörü} = MI - 1 \quad (13)$$

Kütle yoğunluğu, atom ekonomisi ve etkin kütle verimine benzer şekilde yüzde şeklinde kullanılırsa % kütle verimliliği hesaplanmış olur (14).

$$\begin{aligned} \text{Kütle verimliliği} &= \frac{1}{MI} \times 100 \quad (14) \\ &= \frac{\text{Ürünün kütlesi}}{\text{Proseste kullanılan toplam kütle}} \times 100 \end{aligned}$$

Otuzsekiz kimyasal proses için atom ekonomisi ve kütle verimliliği değerleri hesaplanmış ve Çizelge 1’ de bu değerler kıyaslanmıştır (ortalama basamak sayısı: 7) [25].

Çizelge 1.

	Tüm prosesin ortalaması (%)	Aralık (%)
Atom ekonomisi	43	21-86
Kütle verimliliği	1,5	0,1-7,7

Burada görüldüğü gibi çok basamaklı sentezde % 43 atom ekonomisi ile yedi basamaklı kompleks ilaç sentezi, kimyacılar göre mantıklı değildir. Bu proses için ortalama kütle verimliliği sadece % 1,5’ tur. Sonuçta, ilaç yapımında kullanılan toplam kütlelerin % 98,5’u atık demektir. Prosesin bir basamağında atom ekonomisi % 95 olsa bile bu prosesin toplam ortalama kütle yoğunluğunu önemli ölçüde arttırmaya yetmez. Proseste kütlelerin yoğunluğu atom ekonomisi veya reaksiyon kütle etkinliği ile hesaplanmadığından, atom ekonomisi çok güçlü ve değerli bir ölçüm veya endüstride kullanılacak en iyi ölçüm olmayabilir.

3.6. Karbon etkinliği (Ing. Carbon Efficiency, CE)

Karbon etkinliği hesabında, çıkış maddelerinin stokiyometrisi ve ürünler yer alır. Karbon etkinliği, son ürünün yapısına katılan çıkış maddelerindeki karbonun yüzdesi olarak tanımlanır (15).

$$\% \text{ Karbon etkinliği} = \frac{\text{Üründeki karbon kütlesi}}{\text{Çıkış maddelerinde bulunan toplam karbon kütlesi}} \times 100 \quad (15)$$

A + B \longrightarrow Ürün + Yan ürün reaksiyonu için karbon etkinliği,

$$\% CE = \frac{\text{Ürünün mol sayısı} \times \text{Üründeki karbon sayısı}}{(\text{n}_A \times \text{A daki karbon sayısı}) + (\text{n}_B \times \text{B' deki karbon sayısı})} \times 100 \quad (16)$$

olarak hesaplanır.

Atom ekonomisi (AE), çevresel etki faktörü (E) ve reaksiyon kütle etkinliği (RME) ölçümleri özellikle ilaç endüstrisinde çok kullanılmaktadır.

3.7. Çevresel Bölüm (Ing. Environmental Quotient, EQ)

E faktörü bir kimyasal proseste oluşan atığın miktarıyla ilgilendir. Fakat asıl önemli olan şey atığın miktarı değil çevreye etkisidir. Bu nedenle çevresel bölüm (EQ) terimi ortaya atılmıştır. EQ değeri, hakemlerce belirlenen Q değeri ile E faktörü değerinin toplanmasıyla elde edilir [3, 4, 26]. NaCl için Q değeri 1 dir ve ağır metal tuzlarının Q değeri, toksisitesi ve geri dönüşüm kolaylığına bağlı olarak 100 ile 1000 arasında değişmektedir. Kimyasal proseslerin çevresel etkisinin kantitatif olarak değerlendirilmesi açısından EQ değeri önemlidir.

4. SONUÇLAR

Yukarıda anlatılan bütün ölçümler değerlendirilir ve kıyaslanırsa aşağıdaki sonuçlar elde edilir.

(i) Verim, kimyacıların çok kullandığı bir ölçüm olmakla birlikte, reaksiyon etkinliğini değerlendirmek için günümüzde yeterli değildir. Sadece hedeflenen ürün miktarıyla ilgilendir. Fakat ekonomik açıdan çok iyi bir ölçümdür.

(ii) Atom ekonomisi (AE), hedeflenen ürünle birlikte kullanılan tüm reaktifleri ve yan ürünleri hesaba katar. Atom ekonomisi, proses tasarlanırken veya diğer ölçümlerle birlikte değerlendirildiği zaman kullanışlı bir ölçümdür, fakat tek başına kullanışlı değildir.

(iii) Çevresel etki faktörü (E) ise bir kimyasal proseste oluşan atığın miktarıyla ilgilendir.

(iv) Çevresel bölüm (EQ), bir kimyasal proseste oluşan atığın çevreye verdiği zararla ilgilendir ve bu zararı kantitatif olarak değerlendirmeyi sağlar.

(v) Kütle yoğunluğu (MI), kütle verimliliği olarak da ifade edilebilir ve daha kolay anlaşılır görülmektedir.

(vi) Reaksiyon kütle etkinliği (RME), atık oluşumunu engelleyen ve kimyasalların etkin bir şekilde kullanımını sağlayan kullanışlı bir ölçüm olarak görülmektedir. Aslında kimyasal ve teknolojik yeniliklerde kullanılabilirliğini sürdürmesi daha olası görünmektedir. Basit, kantitatif, kolay kullanılan ve anlaşılabilir bir ölçümdür. Son çalışmalarda reaksiyon yararlılığını değerlendirmek için reaksiyon kütle etkinliğinin atom ekonomisinden daha kullanışlı ve daha iyi olduğu söylenmektedir [27].

Bu reaksiyon ölçümleri, hepsi bilinmesine ve bazen kullanılmasına rağmen ayrı ayrı ve bağımsız olarak değerlendirilir. Bir reaksiyonun yeşil olma derecesi için hangisinin en iyi olduğu ise hala devam eden tartışmadır.

Acknowledgments / Teşekkür

Değerli katkılarından dolayı hocam Prof. Dr. Ender ERDİK'e teşekkürlerimi sunarım.

REFERENCES / KAYNAKLAR

- [1] Jun Li, C., Trost, B. M., "Green chemistry for chemical synthesis", Pnas, 105, 36, 13197-13202, 2008.
- [2] Sheldon, R. A., "Why green chemistry and sustainability of resources are essential to our future"; J. Environ. Monit., 10, 406-407, 2008.
- [3] Sheldon, R. A., "Atom utilisation, E factors and the catalytic solution", C. R. Acad. Sci. Paris, S erie IIc, Chimie : Chemistry, 3, 541-551, 2000.
- [4] Sheldon, R. A., "Catalysis: The Key to Waste Minimization", J. Chem. Tech. Biotechnol., 68, 381-388, 1997.
- [5] Tucker, J. L., "Green Chemistry, a Pharmaceutical Perspective", Organic Process Research & Development, 10, 2, 315-319, 2006.
- [6] Trost, B. M., "The atom economy: a search for synthetic efficiency", Science, 254, 5037, 1471-7, 1991.
- [7] Trost, B. M., Zhi, L., "Atom economy. A simple palladium-catalyzed addition of pronucleophiles with dienes", Tetrahedron Letters, 33, 14, 1831-4, 1992.
- [8] Trost, B. M., "Atom economy - a challenge for organic synthesis: homogeneous catalysis leads the way", Angewandte Chemie, International Edition in English, 34, 3, 259-81, 1995.
- [9] Hall, H. K. Jr., "Atom economy and monomer synthesis", Chemtech, 27, 6, 20-25, 1997.
- [10] Trost, B. M., "When Is a Proton Not a Proton?", Chemistry – A European Journal, 4, 12, 2405-2412, 1998.
- [11] Trost, B. M., Jonasson, C., Wuchrer, M., "Atom economy. Aldol-type products by vanadium-catalyzed additions of allenic alcohols and aldehydes", Journal of the American Chemical Society, 123, 50, 12736-7, 2001.
- [12] Trost, B. M., "On Inventing Reactions for Atom Economy", Accounts of Chemical Research, 35, 9, 695-705, 2002.
- [13] Trost, B. M., Toste, F. D., "Atom economy. Palladium-catalyzed formation of coumarins by addition of phenols and alkynoates via a net C-H insertion", Journal of the American Chemical Society, 125, 15, 4518-26, 2003.
- [14] Trost, B. M., Frederiksen, M. U., Rudd, M. T., "Ruthenium-catalyzed reactions--a treasure trove of atom-economic transformations", Angewandte Chemie, 44, 41, 6630-66, 2005.
- [15] Kalidindi, S. B., Sanyal, U., Jagirdar, B. R., "Metal Nanoparticles via the Atom-Economy Green Approach", Inorganic Chemistry, 49, 9, 3965-3967, 2010.
- [16] Eissen, M., Mazur, R., Quebbemann, H. G. ve Pennemann, K. H., "Atom economy and yield of synthesis sequences", Helvetica Chimica Acta, 87, 2, 524-535, 2004.
- [17] Anastas, P. T., Warner, J. C., "Green Chemistry: Theory and Practice"; Oxford University Pres., Oxford, 1998.
- [18] Curzons, A. D., Constable, D. J. C., Mortimer, D. N. et.al., "So you think your process is green, how do you know?—Using principles of sustainability to determine what is green—a corporate perspective", Green Chemistry, 3, 1–6, 2001.
- [19] Andraos, J., Sayed, M., "On the Use of "Green" Metrics in the Undergraduate Organic Chemistry Lecture and Lab To Assess the Mass Efficiency of Organic Reactions" Journal of Chemical Education 84 (6), 1004-1010, 2007.
- [20] Andraos, J., "Unification of Reaction Metrics for Green Chemistry: Applications to Reaction Analysis", Organic Process Research & Development, 9, 2, 149-163, 2005.
- [21] Andraos, J., "Unification of Reaction Metrics for Green Chemistry II: Evaluation of Named Organic Reactions and Application to Reaction Discovery", Organic Process Research & Development, 9, 4, 404-431, 2005.

- [22] Sheldon, R. A., “Organic synthesis; past, present and future”, *Chemistry and Industry*, 903–906, 1992.
- [23] Sheldon, R. A., “E factors, green chemistry and catalysis: an odyssey”, *Chemical Communications*, 29, 3352-65, 2008.
- [24] Hudlicky, T., Frey, D. A., Koroniak, L. et.al., “Toward a “reagent-free” synthesis”, *Green Chemistry*, 1, 57–59, 1999.
- [25] Constable, D. J. C., Curzons, A. D., Cunningham, V. L., “Metrics to ‘green’ chemistry— which are the best?”, *Green Chemistry*, 4, 521–527, 2002.
- [26] Sheldon, R. A., “The E Factor: fifteen years on”, *Green Chemistry*, 9, 1273-1283, 2007.
- [27] Anderson, N. G., “Practical Process Research and Development”; Academic Press, San Diego, 2000.