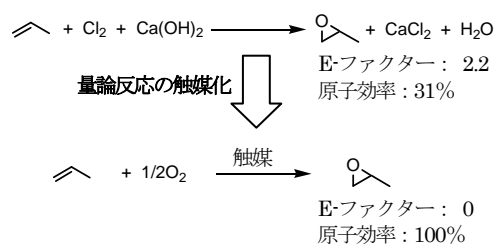


ディビジョン番号	18
ディビジョン名	環境・安全化学・グリーンケミストリー・サステイナブルテクノロジー

大項目	2. グリーンケミストリー
中項目	2-1. 新規反応
小項目	2-1-1. E-ファクターと原子効率

概要（200字以内）

プロセスのグリーン度を評価するE-ファクターと原子効率について簡単に述べた。現在、プロセスのグリーン化をはかるために、種々な効率的な触媒の開発が精力的に行われており、今後さらなる発展が期待される。

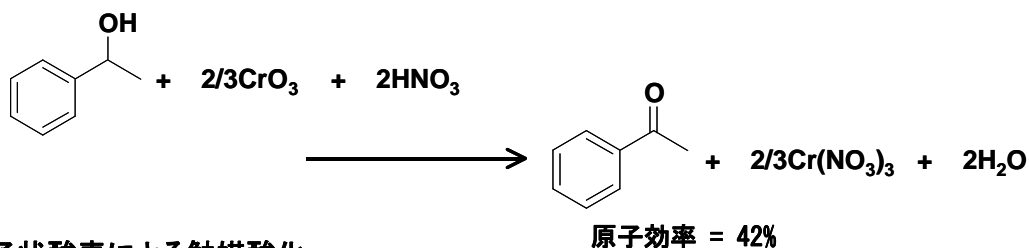


現状と最前線

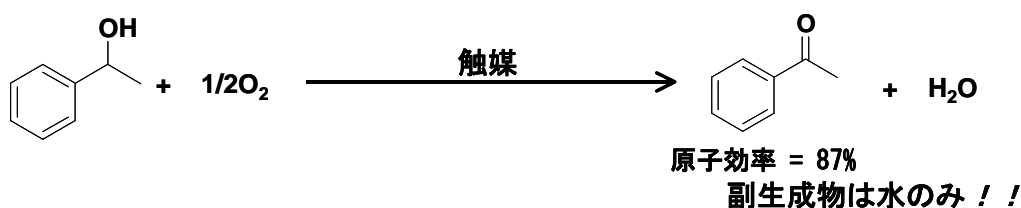
化学製品の製造において目的とする化合物に対する副生成物の重量比を E-ファクターとして定義する。この E-ファクターが大きいほど、目的生成物を作るのに多くの副生成物が生じていることを意味する。ファインケミカルや医農薬品などの多くは、化学量論的な酸・塩基反応や酸化・還元反応を繰り返すにより合成されており、このことがファインケミカルや医農薬品製造における E-ファクターを大きくしている主要因である。ファインケミカルや医農薬品は石油精製、基礎化成品に比べて、生産量が少ないからといって見過ごすわけにはいかず、近年グリーンケミストリーの理念に基づいた問題解決が考えられるようになっている。上述したような化学量論反応プロセスを触媒反応プロセスに置き換えることによりグリーンな製造プロセスを構築できる。例えば、イブプロフェン合成を化学量論反応を含む多数のステップから、触媒反応を主とする 3 ステップへ短縮したものは、上述した問題を解決した最もわかりやすい例であろう。理論上の E-ファクターを比較すると新法の E-ファクターは旧法の約 1/5 となる。

原子効率とは、プロセス全体を化学反応式で書いたとき、その右辺の全原子量に占める目的生成物の原子量の割合として定義される。E-ファクターとほぼ同義な考え方で、原子効率が 100% に近づくほど効率のよいプロセスといえる。例えば、アルコールの酸化反応は従来クロム酸などの量論酸化剤が用いられてきたが、最近では、分子状酸素を酸化剤とする優れた触媒反

6価クロムによる量論酸化



分子状酸素による触媒酸化



応系が開発されている。図に示すようにクロム酸を用いた系では、原子効率は40%程度、有害なクロム化合物が副生するのに対し、触媒的酸素酸化反応では、理論上原子効率は約90%となる。また、このとき副生物は水のみである。また、クロロヒドリン法によるエポキシド製造と過酸化水素や酸素を酸化剤とするオレフィンの触媒的エポキシ化反応を比較しても触媒法の原子効率が圧倒的に高いことは明らかである。

付加反応、転位反応、異性化反応などは原子効率の高い反応で、副生成物はなく、理論上の原子効率は100%となる。これらの反応をうまくプロセスに組み込めば、プロセス全体の原子効率は向上する。一方、脱離反応、置換反応、分解反応などは原子効率が低い反応である。しかしながら、工業的なフェノール製造に用いられるクメンヒドロペルオキシドの酸触媒による分解反応では、目的のフェノール以外にアセトンが副生し、原子効率は62%となるが、アセトンの需要があるため。実際には62%よりも原子効率の高い反応と考えることができる。

将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題
高効率な触媒の開発
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
量論反応の完全触媒化

キーワード

E-ファクター・原子効率・グリーンプロセス

(執筆者：水野 哲孝)