

国家自然科学基金资助出版 “十一五”国家重点图书出版项目

绿色化学化工丛书

绿

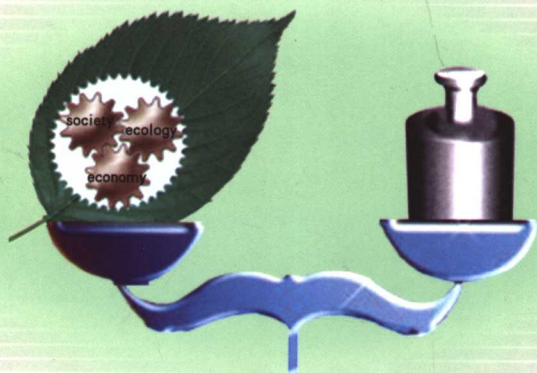
色

化学的评估准则

Green

Assessment Principles  
for Green Chemistry

单永奎 编著



中国石化出版社

[HTTP://WWW.SINOPEC-PRESS.COM](http://www.sinopec-press.com)

“十一五”国家重点图书出版项目  
国家自然科学基金资助出版

绿色化学化工丛书

# 绿色化学的评估准则

单永奎 编著

中国石化出版社

## 内 容 提 要

本书在可持续发展科学思想指导下,以宏观与微观、理论与实践相结合的方式,对绿色化学评估问题进行了广泛的讨论。重点介绍绿色化学评估的现状,科学基础,基本原理及其方法学。对化学原料、化学反应过程和化学品的绿色程度评估进行了系统的描述。兼顾生态环境、经济发展与社会进步三方面,探索绿色化学评估的可能性及准则。因袭现有的金融财政核算和指标统计表述的方法,寻求绿色化学评估方法的可操作性和规则。

本书对于从事绿色化学、化学化工、环境保护、化学反应工艺与工程设计研究、化工新技术开发以及相关行业标准研究的科技人员具有重要的参考价值。并可作为高等院校相关专业的教师、研究生和大学学生的参考书。

### 图书在版编目(CIP)数据

绿色化学的评估准则/单永奎编著.

—北京:中国石化出版社,2006

(绿色化学化工丛书)

ISBN 7-80229-084-8

I.绿… II.单… III.化学工业-无污染技术  
IV.X78

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第 059492 号

### 中国石化出版社出版发行

地址:北京市东城区安定门外大街 58 号

邮编:100011 电话:(010)84271850

读者服务部电话:(010)84289974

<http://www.sinopec-press.com>

E-mail:press@sinopec.com.cn

北京精美实华图文制作中心排版

河北天普润印刷厂印刷

全国各地新华书店经销

\*

787×1092 毫米 16 开本 12.75 印张 4 插页 234 千字

2006 年 7 月第 1 版 2006 年 7 月第 1 次印刷

定价:35.00 元

发展绿色化学  
造福全人类

张存浩

〇〇年十月

宣传绿色化学化工  
推动化学工业可持续  
发展

闵恩泽  
二〇〇四年  
十月二十一日

闵恩泽院士题词

化学是人类财富  
的创造者  
也是环境污染  
的清除者

朱清时  
2004年12月6日

朱清时院士题词

## 《绿色化学化工丛书》顾问

张存浩 中国科学院院士  
闵恩泽 中国科学院院士 中国工程院院士  
朱清时 中国科学院院士

## 《绿色化学化工丛书》编写委员会

**主任：**何鸣元(中国科学院院士)  
梁文平(国家自然科学基金委员会化学科学部  
副主任)

**副主任：**王子康 余远斌

**成员** (按姓氏笔画排序):

马淳安	王 东	邓友全	江焕峰	刘昌俊
纪红兵	任小锋	李成岳	李天铎	李朝军
余远斌	何鸣元	张义正	张锁江	单永奎
郭庆祥	胡常伟	赵 刚	梁文平	麻生明
黄 峰	韩布兴			

## 《绿色化学化工丛书》编辑部

**主任：**王子康  
**副主任：**余远斌 赵 怡  
**高级编辑：**何重金

## 序 一

1987年联合国环境与发展委员会主席、挪威首相 Mrs. Gro Harlem Bruntland 夫人发表了名为“我们共同的未来”的报告，对“可持续发展 (Sustainable Development)”作出以下定义：

“Sustainable development is development that meets the needs of the present without compromising the ability of future generations to meet their own needs.”

亦即，可持续发展所定义的应是这样一种发展，它既满足当代人的需要，又不对后代人满足其需要的能力构成危害。

可持续发展的思想和观念，曾被称为是人类一个世纪以来最深刻的警醒，目前已广为世界各国接受。这一观念的形成，应首先归功于著名的环境运动先驱者、生物学家 Rachel Carson。她于 1962 年出版了随即引起轩然大波的著作《SILENT SPRING》，描绘了农药污染世界并使生态环境毁灭，造成“鸟语不再，惟余空山”的可怕景象，引发了人类对于发展观念的争论。Carson 一度备受主要来自化学工业界对她的学术观点乃至人身的攻击和诋毁。正因如此，她对人类社会的贡献不但被载入史册，而且更受到人们永远的怀念。

由此可见，可持续发展观念形成的根源可溯及化学与化工。化学工作者对此自应有更深切的体念。近年来，人们把绿色化学的观念进一步发展成为“绿色与可持续化学”(Green and Sustainable Chemistry)，以强调化学化工不仅涉及环境，而且直接与可持续发展的多个方面相关。可持续发展观念是以经济、资源、环境、社会等要素的一体化为其特征。绿色与可持续化学作为可持续发展的工具之一，其定义可以取自 1998 年国际经济合作与发展组织(OECD)以“Sustainable Chemistry”为主题的研讨会：



“Within the broad framework of Sustainable Development, we should strive to maximise resource efficiency through activities such as energy and non-renewable resource conservation, risk minimisation, pollution prevention, minimisation of waste at all stages of a product life-cycle, and the development of products that are durable and can be re-used and recycled. Sustainable Chemistry strives to accomplish these ends through the design, manufacture and use of efficient and effective, more environmentally benign chemical products and processes.”

从这一目前已得到人们认可的定义可以看到，在可持续发展大框架之内的绿色化学化工，无疑对经济、资源、环境，乃至构筑循环经济这一良性经济发展模式，都具有重要的意义。

希望《绿色化学化工丛书》的出版，能在其中贡献一份绵薄的力量。  
是以为序。

何鸣元

2004年11月18日

## 序 二

绿色化学又称环境无害化学、环境友好化学或者清洁化学。绿色化学是化学家通过对化学规律的进一步认识，发展新的技术，避免和减少那些对人类健康、社区安全、生态环境有毒有害的原料、催化剂、溶剂和试剂的使用和有害的产物、副产物等的产生。绿色化学的理想是实现生态环境与化学和化工生产的协调发展。其主要特征在于采用“原子经济”反应，即原料中的每一原子进入产品，不产生任何废物和副产品，实现废物的“零排放”；也不采用有毒、有害的原料、催化剂和溶剂，并生产环境友好的产品。从科学的观点看，绿色化学的要求将导致化学学科基础性的变革。

绿色化学与环境治理是不同的概念。环境治理强调对已被污染的环境进行治理，使之恢复到被污染前的面目，而绿色化学则强调从源头上阻止污染物生成的新策略，即所谓污染预防。应该看到，绿色化学是一个发展的概念，它是从源头减少污染开始逐渐趋于完全无污染的发展过程。真正实现完全绿色化学要经历长期的、深入的研究工作。

绿色化学是化学化工发展的新阶段，它利用近代科学和技术的巨大进展和最新成就，在继续生产人类社会所需要的大量新物质、新产品的同时，又满足在生产过程中充分利用原料并确保生产出的物质不污染环境。因此，绿色化学是发展生态经济和工业的关键，是实现可持续发展战略的重要组成部分。

绿色化学是国际科学研究的热点和前沿，是我国基础科学发展的优先领域。它是经济和社会可持续发展战略的重要组成部分，是解决21世纪环境和资源问题的根本出路之一。国家自然科学基金委员会化学科学部一贯高度重视绿色化学的研究和发展，1997年国家自然科学

基金委员会与中国石油化工集团公司联合资助了“九五”重大基础研究项目“环境友好石油化工催化化学与化学反应工程”；1999年国家自然科学基金委员会设立了“用金属有机化学研究绿色化学中的基本问题”的重点项目；同年12月国家自然科学基金委员会召开了《绿色化学的基本科学问题》的九华论坛会；2000年把绿色化学作为“十五”优先资助领域。近年来国家自然科学基金在该领域的支持不断增强，基础研究的队伍逐步壮大，取得了一批重要成果，受到了广大科技界和社会各界的关注。

为了增加科技界和公众对绿色化学化工最新进展的了解，促进绿色化学化工的发展，国家自然科学基金委员会化学科学部与中国石化出版社共同组织国内在绿色化学化工领域从事研究的有关专家，编著出版《绿色化学化工丛书》。希望该丛书的出版对我国的经济社会、资源能源的可持续发展和人类活动与环境协调发展做出贡献。

国家自然科学基金委员会化学科学部  
梁文平

2004年11月8日

# 前 言

近十几年来，人们十分关注并热烈地讨论如何改变人类的生活方式和行为来减少对生态环境的影响，促进经济可持续发展，进一步提高人类的生活质量。在化学领域中，其相关的内容就是绿色化学。其中备受关注的论题之一，就是怎样能够知道你所实施的化学反应、研发的化工工艺、化工生产过程及所生产的化学品是绿色的。对此应如何判断或者如何评价呢？显然，这是一个非常复杂、非常棘手的问题，难以用简单的定义来评判是否是绿色的。从目前整个人类在绿色化学方面积累的基础知识来看，确实还没有形成一个统一的评判标准，本书只是基于绿色化学的基本原理，集中地对绿色化学的评估准则进行系统的探讨。

对于一个事物的准确界定一般需要有明确的宏观关照和具体的基本科学概念。例如，判断什么是导电材料，什么是超导材料，什么是无机化学，什么是有机化学……，只要根据它们是否具有某一物理功能或者根据所研究对象的化学组成就可以做出判断，但对于某一化学现象或过程是否是绿色的判断，则不可能这样简单明了。判断一个化学过程是不是绿色，首先，要从生态环境保护方面考虑，比如是否排放出破坏生态系统的污染物；其次，要从人类健康保健方面考虑，考察其是否使用和产生有毒有害物质；再次，要从经济发展的角度考虑，核算产品的质量密度、能量密度、原料资源利用的合理性及整体的经济效益等；第四，还要考虑到该过程对社会文明和人类生活质量提高的影响。显然，如此面面俱到，绿色化学评估研究必将拘泥于一些数据的统计、计算、比较等细微末节之中，似乎少些提纲挈领式的理论分析。另一方面，绿色化学评估研究的内容是动态的，评估的定性或定量标准是相对的、变化的，是伴随着科学技术的发展和社会的进步而时刻变化着的。今天被定义或界定为“绿色”的化学过程或现象，在若干年之后可能被认为是“非绿色”的。这表明绿色化学的评估准则承载着社会、时代和科学技术发展水平的信息，对这方面的研究既要关注宏观的历史，又要对现实的具体事物予以周密的考察和辨析。此外，绿色化学评估研究的另一个显著特点是多学科交叉性，它不仅与化学、化学工程、环境科学密切相关，还与数学、物理学、生物学、医学、材料学、信息学、金融学等密不可分。综上所述，绿色化学评估研究是一个多元化的动态的系统工程。

本书将对已有的相关资料、研究成果做详细而准确的介绍与分析；系统地介

绍绿色化学评估的基本原理和方法等，并尽力对已有的绿色化学过程或现象做详尽的辨析与讨论，探究其内在的规律性和特殊性，致力于对某些独特见解予以清晰明确的阐述，使它们超脱于诸多琐碎事务的考据之中，力求达到纲举目张的效果。愿本书的出版能对绿色化学的教学、科学研究、技术开发和人类生活质量的提高起到促进和推动的作用。

作者涉足绿色化学评估完全出于何鸣元院士的推荐和指引，并且自始至终得到了他的关怀和指导，谨向他致以最诚挚的谢意。在本书撰写过程中，赖克强、顾颖颖、华春艳、李疆、孔爱国、杨昕、米万宝、侯亚伟、甘灰芳、王一蕾、施沈一等从不同方面给予了支持，在此向他们一并致谢。

依据目前绿色化学发展的广度深度来看，说绿色化学评估是一门博大精深的科学，可能缺乏科学考证，但言其为浩瀚繁杂，却不足为过。相比之下，本人所学，乃沧海一粟，九牛一毛。撰写本书，实为蚍蜉撼树，常有望洋兴叹之感。因而书中遗憾、不足、甚至误谬绝非少有。竭诚盼望广大读者给予指正，特别是久历相关领域之士，尤希赐示，先此敬谢。

单永奎

2006年4月于上海

# 目 录

## 第一章 绪 论

1.1 绿色化学评估研究的对象 .....	( 1 )
1.2 绿色化学评估的作用与意义 .....	( 1 )
1.3 绿色化学评估的科学基础 .....	( 2 )
1.3.1 理论基础 .....	( 2 )
1.3.2 评估指标或评估的功能单位 .....	( 6 )
1.3.3 评估的方法 .....	( 11 )
1.4 绿色化学评估的发展与现状 .....	( 16 )
参考文献 .....	( 17 )

## 第二章 绿色化学评估的基本原则

2.1 绿色化学的 12 条基本原则 .....	( 19 )
2.1.1 废物的预防 .....	( 19 )
2.1.2 化学反应的原子经济性 .....	( 20 )
2.1.3 无毒无害的化学合成 .....	( 21 )
2.1.4 安全化学品的设计 .....	( 21 )
2.1.5 无毒无害的辅助材料 .....	( 22 )
2.1.6 能量利用效率的设计 .....	( 22 )
2.1.7 利用可再生资源 .....	( 23 )
2.1.8 衍生作用的限制 .....	( 24 )
2.1.9 催化剂的使用 .....	( 24 )
2.1.10 化学品的降解 .....	( 26 )
2.1.11 预防污染的实时监测 .....	( 26 )
2.1.12 化学事故隐患的消除 .....	( 27 )
2.1.13 绿色化学的 12 条附加原则 .....	( 27 )
2.2 绿色化学工程技术的 12 条原则 .....	( 29 )
2.2.1 要尽力保证所有输入和输出的能量与材料尽 可能无内在固有危险 .....	( 29 )
2.2.2 污染防止优于污染形成后的处理 .....	( 30 )

❖ ..... ❖

2.2.3	产品分离与纯化的设计要尽量减少能量与材料的消耗	(31)
2.2.4	质量、能量、空间和时间效率的最大化	(31)
2.2.5	强化输出的牵引, 不要输入的推动	(32)
2.2.6	保留复杂性	(32)
2.2.7	强调耐久性而不是永久性	(33)
2.2.8	满足需要, 使过量最小化	(33)
2.2.9	减少物质的多样性	(34)
2.2.10	当地物质流和能源流的整合	(34)
2.2.11	商品后期设计	(35)
2.2.12	使用可再生而非耗竭材料	(35)
2.2.13	绿色化学工程技术的9条附加原则(Sandestin原则)	(36)
2.3	《21世纪议程》和《里约热内卢环境与发展宣言》	(36)
2.3.1	《21世纪议程》	(37)
2.3.2	《里约热内卢环境与发展宣言》	(38)
2.4	《中国21世纪议程》	(41)
	参考文献	(45)

### 第三章 绿色化学评估的方法学

3.1	绿色化学评估方法学概述	(48)
3.2	化学品生命周期评价	(52)
3.2.1	评价的目的与范围确定	(52)
3.2.2	生命周期清单分析	(55)
3.2.3	生命周期影响评价	(61)
3.2.4	生命周期解释	(68)
3.2.5	生命周期评价的局限性	(70)
3.3	绿色化学的设计评估	(71)
3.3.1	环境工具箱的设计	(72)
3.3.2	绿色化学方案的设计	(73)
3.3.3	绿色化学的评估	(75)
3.4	可持续性的模糊逻辑评估	(77)
3.4.1	模糊逻辑的特征和可用性	(79)
3.4.2	语言变量	(80)
3.4.3	语言价值	(82)
3.4.4	语言规则和模糊算子	(84)
3.4.5	去模糊过程	(85)

3.4.6 讨论与评述 .....	( 86 )
3.5 可持续发展评估的综合模型 .....	( 86 )
3.5.1 综合指数模型的建立 .....	( 88 )
3.5.2 指标指数的标准化 .....	( 89 )
3.5.3 指标指数的权重 .....	( 90 )
3.5.4 综合可持续发展指数的核算 .....	( 91 )
3.5.5 可持续发展指数的效用及其相关的决策 .....	( 92 )
3.6 评估辅助材料(中国产品生命周期影响评价参数) .....	( 92 )
3.6.1 中国环境影响标准化基准的确定 .....	( 92 )
3.6.2 确定中国环境影响权重 .....	( 99 )
参考文献 .....	( 104 )

## 第四章 化学原料的评估

4.1 作为原料资源的属性 .....	( 108 )
4.1.1 自然资源的多样性和有限性 .....	( 109 )
4.1.2 自然资源的价值和价格属性 .....	( 109 )
4.1.3 自然资源的共有性 .....	( 110 )
4.1.4 自然资源的脆弱性 .....	( 110 )
4.2 所用原料对生态环境和人类健康的影响 .....	( 110 )
4.2.1 矿产资源开采对土地资源的破坏 .....	( 111 )
4.2.2 矿产资源开采对水资源的破坏 .....	( 111 )
4.2.3 矿产资源开采对植被资源的破坏 .....	( 111 )
4.2.4 矿业废气、废水及废渣污染对人体健康的危害和 生态环境的破坏 .....	( 111 )
4.2.5 原料的毒性 .....	( 112 )
4.2.6 原料选择的顺应效果 .....	( 113 )
4.2.7 原料的生态环境功能 .....	( 113 )
4.3 化学原料对经济效益的影响 .....	( 113 )
4.4 化学原料对社会的影响 .....	( 116 )
4.5 选择化学原料的优化策略 .....	( 117 )
4.5.1 选择无毒无害的清洁原料 .....	( 118 )
4.5.2 以废弃物作原料 .....	( 118 )
4.5.3 选用可循环使用的物质作原料 .....	( 119 )
4.5.4 利用可再生资源作原料 .....	( 119 )
4.5.5 以消耗性资源作原料 .....	( 120 )



4.5.6 采用低耗能原料 .....	(120)
4.6 原料资源可持续利用能力的定量评估 .....	(121)
4.6.1 原料资源利用的可持续性 .....	(122)
4.6.2 关于枯竭时间和丰度因子的确定 .....	(126)
4.6.3 环境协调能力 .....	(127)
4.6.4 确定总可持续能力 .....	(128)
参考文献 .....	(128)

## 第五章 化学反应过程的评估

5.1 反应类型的评估 .....	(131)
5.1.1 重排反应 .....	(132)
5.1.2 加成反应 .....	(132)
5.1.3 取代反应 .....	(132)
5.1.4 消除反应 .....	(133)
5.1.5 周环反应 .....	(134)
5.1.6 氧化-还原反应 .....	(135)
5.2 反应介质的评估 .....	(136)
5.2.1 无溶剂(无介质) .....	(137)
5.2.2 使用可密闭循环的介质 .....	(137)
5.2.3 以水作为介质 .....	(137)
5.2.4 以超临界流体作为介质 .....	(138)
5.2.5 以离子液体作为介质 .....	(140)
5.2.6 以普通有机溶剂作为介质 .....	(140)
5.3 催化剂及助剂的评估 .....	(141)
5.3.1 光催化 .....	(142)
5.3.2 电催化及光电催化 .....	(143)
5.3.3 生物催化 .....	(144)
5.3.4 化学催化 .....	(145)
5.4 能量消耗的评估 .....	(146)
5.5 物质消耗的评估 .....	(147)
5.6 环境影响的评估 .....	(149)
5.7 经济效益的评估 .....	(151)
5.7.1 市场经济成本 .....	(152)
5.7.2 生态环境成本 .....	(152)
5.7.3 社会成本 .....	(154)