
“绿色”努力后，化学家仍难以摆脱危险溶剂

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/42291.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

“绿色”努力后，化学家仍难以摆脱危险溶剂。 一项针对过去40年间专利中所列130万条化学反应的分析显示，尽管化学界倡导采用更安全、更具可持续性的替代溶剂近30年了，但化学家仍在大量使用危险性溶剂。这项近日发表于《应用化学》的调查，是同类研究中规模最大、覆盖最全面的一次。

溶剂是化学反应里必不可少的液体，用于溶解反应物质，也被用来萃取、纯化反应产物。一些常用溶剂如二氯甲烷等具有健康风险，或是存在其他危险属性，例如许多溶剂属于易燃物。几乎全部传统溶剂都来源于石油或天然气，会留下显著的环境足迹。

该调查中很大一部分专利涉及药物研发早期的探索性研究。数据显示，1976年专利记录的反应中，约60%使用危险性溶剂；到2016年，这一比例上升至70%以上。结果令人失望，但并不意外。论文通讯作者、英国约克大学的Helen Sneddon说。



旋转蒸发仪用于从反应产物中脱除化学溶剂。图片来源：Forance/Alamy

美国加州大学圣巴巴拉分校的Bruce Lipshutz表示，研究结果进一步说明化学领域迫切需要摆脱石油基溶剂。我们必须做出改变。

结果有点让人泄气，我们本以为已经看到进展。美国化学会绿色化学研究所的David Leahy说，希望药物化学课题组和高校科研团队看到这项研究之后，能够反思自己的溶剂选择。

这项研究依托一份源自美国专利商标局的公开数据库——1976年至2016年美国专利化学反应集，专利中的化学名称、化学结构被转换为计算机可读格式。论文作者、瑞士洛桑联邦理工学院的Maarten Dobbelaere介绍：这几乎是可用于此类调查的唯一一套大规模开源化学反应库。

Dobbelaere开发了一套名为Rxn?INSIGHT的人工智能系统，该系统可以解析化学数据库，回答研究人员合成新分子所需试剂、催化剂、溶剂的相关查询。Sneddon与Dobbelaere利用这套系统，在经过标注的专利数据库中追踪了500多种不同化学反应的溶剂使用情况。

研究不仅证实二氯甲烷这类危险溶剂依旧深受化学家青睐，还发现当法规限制某一种有毒溶剂的使用时，化学家往往会换成另一种危险溶剂，而非选用更加绿色安全的替代品。除此之外，三氟乙酸的使用量大幅增长。三氟乙酸是许多合成工艺的关键原料，按照部分定义，它属于永久化学物质，是持久性全氟和多氟烷基物质（PFAS）的一员，如今在环境样本中检出频率越来越高。

Leahy表示，在药物研发早期阶段，化学家的目标往往是尽快合成大量不同分子，因此选择溶剂时会直接沿用文献先例。对于发现性化学家来说，几乎没有动力在更环保的条件下合成这些分子

。

这项研究存在局限，并未涵盖某些进展领域。所用数据库截止到2016年，无法体现此后发生的变化，同时数据库没有统计溶剂实际消耗量。如今实验室反应装置趋于小型化、微量化，可能已经降低了溶剂的总体消耗。Sneddon表示，专利大多记录的是实验室早期研究，而放大到工业生产阶段时，二氯甲烷这类危险溶剂常常会被淘汰。

很多化学反应其实已经存在更绿色的替代方案。Lipshutz指出，不少经典有机反应完全可以在水相中完成，合成化学家应当多多借鉴生物体内的化学反应，因为生物以水作为反应溶剂。归根结底，大自然完成了全部与生命相关的化学反应，造就了人类与万千生灵，全程没有用到一滴石油。

。

研究结果还给使用人工智能做反应规划的研究者敲响了警钟。大模型往往基于已发表文献（包括专利）训练，给出的溶剂建议很容易复刻过去并不理想的选择。

Sneddon补充说，想要真正普及绿色溶剂，化学教育必须发生根本性转变，本科阶段就要教会学生依据绿色化学原则挑选溶剂。Lipshutz表示认同：现在就应当大力推行绿色化学教学。（来源：中国科学报王方）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/anie.1677569>

作者：Helen Sneddon 来源：《应用化学》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发