

Nachhaltigkeit per Internet

NOP – Ein neues organisch-chemisches Grundpraktikum

JOHANNES RANKE | BURKHARD KÖNIG | ACHIM DIEHLMANN | GÜNTER KREISEL |
MATTHIAS NÜCHTER | REINHOLD STÖRMANN | HENNING HOPF

Das Internet bietet ein enormes Potenzial, die Verfügbarkeit von qualitativ hochwertigen Versuchsvorschriften zu erhöhen. Das NOP will diese Möglichkeiten nutzen und außerdem eine ganzheitlichere Sicht der Chemie vermitteln.

Entsprechend der langen und erfolgreichen Tradition der Organischen Chemie an deutschen Hochschulen liegen für die Grundausbildung in diesem Fach mehrere qualitativ hochwertige und umfassende Praktikumsanleitungen vor. Hier sind in erster Linie das „Organikum“ [1], die Bücher von Eicher und Tietze [2,3] und die leider vergriffenen Bücher von Hünig, Märkl und Sauer [4,5] zu nennen. Warum wird mit dem Neuen und nachhaltigeren Organisch-chemischen Praktikum (NOP, sprich en - oh - pe) ein weiteres Produkt geschaffen, das auf diesen Anwendungsbereich ausgerichtet ist?

Die Gründe, die uns zur Etablierung des Verbundprojektes veranlasst haben, lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Ein zukunftsweisender, verantwortungsvoller Umgang mit Chemikalien [6] muss Anfängern von Ausbildungsbeginn an beibringen, eventuelle Neben- und Spätfolgen ihres Tuns rational einzuschätzen und Alternativen zu prüfen.
- Im Kontext von „Nachhaltigkeit“ und „Green Chemistry“ werden zur Zeit wichtige Konzepte und Anwendungen entwickelt, von denen einiges für die Grundausbildung genutzt werden kann [7,8].
- Die kostenlose Bereitstellung sowohl von Praktikumsanleitungen als auch von Begleit- und Hintergrundinformationen im Internet ermöglicht eine flexible, auch graduelle oder partielle Anpassung des NOP für die Grundausbildung in Organischer Chemie durch die verantwortlichen Lehrenden an verschiedenen Bildungsstätten (Gymnasien, Berufsschulen, Fachhochschulen, Universitäten).

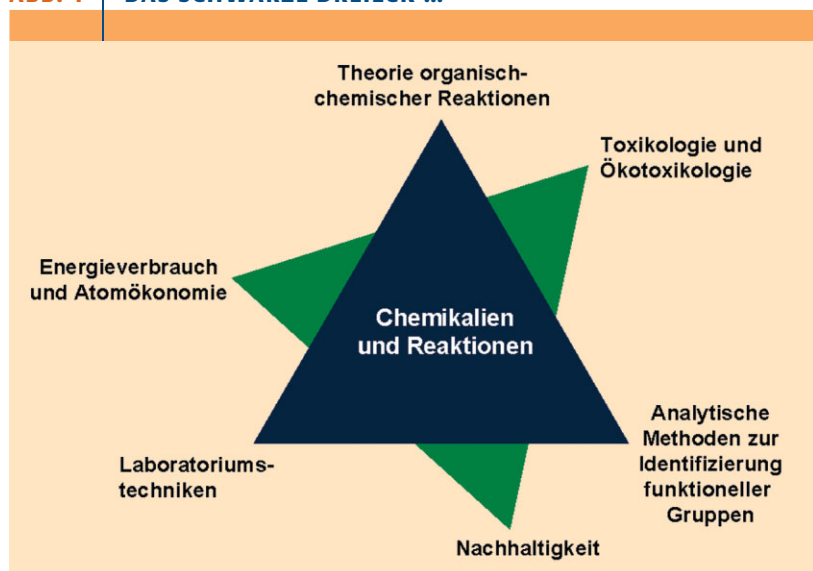
Im Konzept des NOP werden die klassischen Elemente *Laboriumstechniken*, *Theorie organisch-chemischer Reaktionen* und *Analytische Methoden zur Identifizierung funktioneller Gruppen* durch die Elemente *Energieverbrauch und Atomökonomie*, *Toxikologie und Ökotoxikologie* sowie *Nachhaltigkeit* erweitert (Abbildung 1).

Bei einer solchen Horizonterweiterung besteht auch die Gefahr der Überfrachtung. Doch muss sich unserer Meinung nach der Syntheschemiker mit den letztgenannten Problemen früher oder später ohnehin auseinandersetzen, eine frühe Konfrontation kann deshalb nicht schaden. So kann mit dem NOP durch eine ganzheitlichere Begleitung und Vertiefung der praktischen Labortätigkeit eine deutliche Verbesserung der Ausbildung erreicht werden. Die Herausforderung liegt somit nicht zuletzt auf der Seite der Lehrenden, die wir ermutigen und darin unterstützen wollen, sowohl Freude und Faszination an der organischen Synthese zu vermitteln, als auch Fragen nach „Risiken und Nebenwirkungen“ auf befriedigende Weise zu beantworten.

Ein Spektrum von Versuchsvorschriften

Nur wenn die gesamte Breite organisch-chemischer Reaktionen und organischer Stoffklassen im NOP durch Ver-

ABB. 1 | DAS SCHWARZE DREIECK ...



... stellt die klassischen Elemente der praktischen Ausbildung in der organisch-chemischen Synthese dar. Das grüne Dreieck symbolisiert die Elemente, die im NOP zusätzlich thematisiert werden, und die integral mit der praktischen Ausbildung verbunden werden.

LEHRMATERIAL IM NETZ

Seit Mitte März 2003 ist unter der Internet-Adresse www.oc-praktikum.de ein erstes Angebot des NOP-Projektes allgemein abrufbar. Im Kern besteht es aus einem Lehrmodul von neun Synthesevorschriften, anhand derer die Bedeutung von Begriffen wie Atomökonomie oder Energieeffizienz veranschaulicht wird. Zudem werden alternative Reaktionsführungen erarbeitet und deren Produkte sorgfältig auf Nebenprodukte untersucht. Dieses Angebot wurde Anfang 2004 um ca. 50 weitere ausführliche Versuchsvorschriften mit analytischen Daten und Gefahrstoffhinweisen ergänzt. Diese Daten können zur Durchführung von Laborpraktika und zur eigenständigen weiteren Bewertung und Optimierung der Experimente genutzt werden. Unter NOP – Wie? (Abbildung 2) finden sich zum einen gesetzliche Anforderungen an den Praktikumsbetrieb, soweit sie die Praktikanten bzw. Studierenden betreffen, zum anderen Bewertungsverfahren für Stoffe und Reaktionen, die im NOP zur Anwendung kommen.

Unter Warum ein NOP? wird die Motivation für die Erstellung des NOP dargestellt. Über den Punkt Nachhaltigkeit wird Hintergrundwissen zu diesem Begriff und seine Anwendung auf die Chemie vermittelt. Das Glossar erklärt die Bedeutung der Fachbegriffe und unter Techniken finden sich Texte und Literaturhinweise zu konventionellen und alternativen Labormethoden, zur

Analytik, sowie Tipps zum energieeffizienten Erzeugen von Vakuum sowie zum Heizen. Alle chemischen Stoffe, die in den Versuchen vorkommen, wurden in eine Stoffdatenbank aufgenommen, die unter Stoffe direkt durchsucht werden kann. Hier findet sich auch eine Sammlung von Webadressen zur eigenständigen Recherche nach Stoffeigenschaften, Spektren und Sicherheitsdatenblättern.

Die beteiligten Arbeitsgruppen bzw. Mitarbeiter finden sich im Impressum aufgeführt. Die Projektkoordination liegt bei Prof. Dr. B. König, (Universität Regensburg). In fünf Arbeitsgruppen wurden Synthesevorschriften erarbeitet und geprüft, an den Universitäten Jena, Bremen und Braunschweig wurden Spurenanalytik von Nebenprodukten, Entsorgungsfragen sowie die Bewertung von Stoffen und Versuchen bearbeitet. Die Website wurde in enger Zusammenarbeit mit der Universität Jena unter laufender Konsultation aller Projektpartner an der Universität Bremen entwickelt.

Ein besonderer Dank gilt an dieser Stelle dem Fördergeber, der Deutschen Bundesstiftung Umwelt (DBU), die während der Projektlaufzeit in allen Phasen beratend involviert war und den Projektfortschritt mit wohlwollendem Interesse verfolgt hat.

Nachhaltigkeit im organisch-chemischen Praktikum

Warum ein NOP

Versuche

Stoffdaten

Techniken

Impressum

Projektförderung

Glossar

Suche

Nachhaltigkeit

NOP - Wie?

Ölbad

Glossar

NOP ONLINE

DBU

Zur optimalen Betrachtung der Seiten zum NOP muss JavaScript aktiviert und das Chime Plugin installiert sein. Optimiert für eine Bildschirmauflösung von 1024 x 768.

Letzte Änderung dieser Website: 30.04.2003

http://www.oc-praktikum.de/nopw/nopw.php

Abb. 2 Die Einstiegsseite des NOP bietet einen schnellen und übersichtlichen Zugang zu den verschiedenen Elementen der Webseite.

suchsvorschriften abgedeckt wird, kann das Angebot in anspruchsvollen Lehrveranstaltungen zur praktischen Ausbildung in Organischer Chemie im Grund- und Basisstudium genutzt werden.

Die Auswahlkriterien

Damit steht unser erstes Auswahlkriterium für Versuchsvorschriften bereits fest. Der große Fundus bekannter und bewährter Experimente aus Praktikumskripten und -büchern wurde grob nach Reaktionstypen sortiert, um einige moderne Verfahren ergänzt (z.B. die Scandium-triflat-katalysierte Friedel-Crafts Acylierung von Aromaten) und gesichtet. Im Laborpraktikum soll, unter anderem, der sichere Umgang mit Gefahrstoffen erlernt werden, da dies die Voraussetzung für einen sinnvollen Umgang mit Chemikalien ist. Die Versuche dürfen und sollen daher auch reaktive und toxische Verbindungen enthalten. Experimente in denen allerdings nachweislich krebserregende oder stark umweltbelastende, persistente Stoffe entstehen, wurden aussortiert oder durch Alternativen ersetzt. Gibt es zu einer Reaktion Varianten mit stöchiometrischem und katalytischem Einsatz von Reagenzien oder verschiedene Reaktionsführungen, so wurde versucht, die unterschiedlichen Möglichkeiten anzubieten, um deren Effizienz vergleichen zu können.

Praktikumsexperimente müssen zuverlässig funktionieren. Dies ist ein weiteres Qualitätsmerkmal der aufgenommenen Versuche. Alle nach formalen Kriterien ausgewählten Versuche wurden sorgfältig nachgearbeitet. Dabei wurden i. d. R. Versuchsvorschriften für drei Ansatzgrößen (Mikro-, Standard- und großer Labormaßstab) entwickelt und in Bezug auf Praktikabilität, Effizienz und Umweltverträglichkeit optimiert. Dabei spielt die moderne Analytik eine entscheidende Rolle. Alle isolierten Produkte und Nebenprodukte der Reaktionen wurden durch ^1H - und ^{13}C NMR-

und ihre IR-Spektren charakterisiert. Wo nötig, wurden weitere analytische Daten, z.B. aus der Massenspektrometrie hinzugezogen. Dies förderte einige Überraschungen zu Tage: bei manchen in Praktikumskripten beschriebenen Reaktionsprodukten war die Struktur falsch zugeordnet! Aus der Struktur der Nebenprodukte kann oftmals auf Nebenreaktionen geschlossen werden, die mit geringfügigen Variationen der Versuchsbedingungen zurückgedrängt werden können. Die Analytik lieferte so wichtige Hinweise zu Optimierungsmöglichkeiten, die direkt umgesetzt oder als Anregungen an die Nutzer weitergegeben werden.

Entscheidende Hinweise zur Optimierung liefert auch die Reaktionskontrolle durch Gaschromatographie oder Dünnschichtchromatographie. Die Angabe der Reaktionszeit als „Rückfluss über Nacht“ ist oft ja nur als eine grobe Schätzung zu werten. Die kontinuierliche Reaktionskontrolle zeigte, das oftmals eine Reaktion wesentlich günstiger zu einem anderen – oft früheren – Zeitpunkt beendet werden kann, da ab dann nur noch Anzahl und Menge der Nebenprodukte steigen. Dies eröffnet Optimierungsmöglichkeiten zur schnelleren und effizienteren Reaktionsführung. Die dabei im Praktikumsbetrieb eingesparten Energie-, Abfall- und Substanzmengen sind allerdings relativ unbedeutend, da meist in sehr kleinem Maßstab gearbeitet wird. Der entscheidende Lehrinhalt ist die Einsicht, dass chemische Experimente durch eigenes kreatives Handeln mit einfachen Mitteln und Sachverstand verbessert werden können. Aus dem Studierenden, der Vorschriften lediglich „nachkocht“ wird so der eigenverantwortlich handelnde Chemiker.

Alle Angaben zur Analytik mit Spektrenabbildungen und Chromatographiebedingungen sind den Versuchsvorschriften des NOP beigelegt. Auch wenn sicher im Praktikumsbetrieb nicht jedes Experiment kinetisch verfolgt oder spek-

Abb. 3 Ausschnitt aus der Liste der angebotenen Versuche. Die Ampeln leiten sich aus der Gesamtbewertung der Versuche ab. Die Versuche sind nach Stoffklassen, Reaktionstypen, Arbeitsmethoden und Schwierigkeit kategorisiert.

	1001	Nitrierung von Toluol zu 4-Nitrotoluol, 2-Nitrotoluol und 2,4-Dinitrotoluol	Nitroaromaten	Elektrophile Substitution an Aromaten, Nitrierung von Aromaten	Destillieren unter vermindertem Druck, Zutropfen mit Tropftrichter, Extrahieren, Ausschütteln, Umkristallisieren, Abrotieren, Rühren mit Magnetrührer, Ableiten von Gasen, Kühlen mit Kältebad, Heizen mit Ölbad	Schwer
	5026	Oxidation von Anthracen zu Anthrachinon	Aromat, Chinon	Oxidation	Mechanochemische Reaktion, Mahlen mit Planetenkugelmühle, Filtrieren unter Druck, Abrotieren	Leicht
	3021	Oxidation von Anthracen zu Anthrachinon	Aromat, Chinon	Oxidation	Rühren mit Magnetrührer, Abrotieren, Umkristallisieren	Leicht
	1021	Isolierung von Trimyristin aus Muskatnuss	Triacylglycerid	Isolierung von Naturstoffen	Extrahieren mit Soxhletaufsatz, Abrotieren, Umkristallisieren, Erhitzen unter Rückfluss, Heizen mit Ölbad, Rühren mit Magnetrührer	Leicht
	5019	Isolierung von Trimyristin aus Muskatnuss	Triacylglycerid	Isolierung von Naturstoffen	Extrahieren im Mikrowellenfeld, Umkristallisieren, Abrotieren	Mittel

troskopisch vollständig untersucht werden kann, bietet sich für Dozenten und Studierende so die Möglichkeit, die Experimente eigenhändig zu verbessern. Zudem können die Angaben in anderen Lehrveranstaltungen, z.B. den meist parallel angebotenen Methodenkursen zur Spektroskopie oder apparativen Chromatographie genutzt werden. Die thematische Vernetzung mit den Lehrinhalten des Laborpraktikums verdeutlicht Studierenden unmittelbar die Nützlichkeit und Bedeutung der Methoden für ihre eigene Tätigkeit.

Die abschließende Bewertung eines chemischen Prozesses ist durch die vielen zu berücksichtigenden Parameter und ihre individuelle Gewichtung oft schwierig. Dies gilt auch für Laborexperimente im Praktikum. Um aber ein Gefühl für die verschiedenen Bewertungskriterien chemischer Prozesse zu geben, sind alle Versuche in einer abschließenden Einstufung in drei Gruppen eingeteilt worden, die mit den Ampelsymbolen grün, gelb und rot gekennzeichnet sind (Abbildung 3). Die dabei berücksichtigten Kriterien und ihre Gewichtung sind unter Bewertungsmethoden beschrieben. Alle Versuche des NOP, auch die mit einer roten Ampel versehenen, sind unter Beachtung moderner Sicherheitsstandards und der gesetzlichen Rahmenbedingungen für die organisch-chemische Grundausbildung geeignet. Mit der roten Ampel weisen wir lediglich auf Gefährdungs- und Optimierungspotenziale hin. Versuche mit einer roten und einer gelben Ampel sind in einem oder mehreren Bewertungskriterien als schlecht eingestuft worden. Dies kann sich z. B. auf die Effizienz der Umsetzung, also eine mäßige Produktausbeute bei hohem Gesamtmaterial- und Energieeinsatz, oder auf hochtoxische oder persistente Nebenprodukte beziehen. Alle ausgewählten Reaktionen sind unabhängig von ihrer Bewertung wichtige und wertvolle chemische Umsetzungen, zu denen es heute oft keine besseren Alternativen gibt. Die rote und gelbe Ampel soll aber immer daran erinnern, dass hier noch klare Optimierungsmöglichkeiten bestehen.

Grundregeln für nachhaltige Synthesen

Im Verlaufe der Untersuchungen einiger Reaktionen des NOP konnten wiederkehrende Schwachstellen identifiziert werden. Diese beeinflussen vor allem den Energie- sowie den Ressourcenverbrauch von Laborreaktionen. Mit Hilfe verschiedener Maßnahmen lassen sich die erkannten Problembereiche optimieren bzw. schon bei der Reaktionsplanung vermeiden. Um entsprechende Maßnahmen anzuregen, wurden für das NOP Grundregeln für nachhaltige Synthesen entwickelt (engl. Sustainable Synthesis Optimization Rules, SUSOR) [9]. Die grafischen Symbole für diese Regeln (Tabelle 1) werden auch in den interaktiven Kommentaren der Synthesevorschriften des Lehrmoduls verwendet.

Alternative Reaktionsführungen

Viele organisch-chemische Reaktionen und Prozesse erfordern die Zufuhr von Energie. Meist wird mit thermischer

Energie gearbeitet. Nach Erreichen der Reaktionstemperatur stellt sich ein Gleichgewicht zwischen zugeführter Energie und Energieverlusten ein, welches noch durch die Reaktionsenthalpie beeinflusst wird, die aber unter Praktikumsbedingungen (Ansatzgröße um 0.1 mol) oft keine bedeutende Rolle spielt. In vielen chemischen Umsetzungen wird dieses Gleichgewicht durch Arbeiten unter Rückfluss erreicht, d.h. ein Teil der zugeführten thermischen Energie wird ständig durch Kondensation der siedenden Komponente am Kühler abgeführt. Aus den Möglichkeiten Energie auf alternative Weise zuzuführen (u.a. Chemische Umwandlungen durch Röntgen- und Gammastrahlung, Plasmachemie, Photochemie, Mikrowellen-assistierte Chemie, Mechanochemie und Sonochemie) wird im NOP neben ein-

TAB. 1 | GRUNDREGELN FÜR NACHHALTIGE SYNTHESEN

Thermische Isolation Die Versuchsanordnungen sind bestmöglich zu isolieren.	
Versuchsbedingungen Die Reaktionstemperatur sowie die Versuchsdauer sind auf das notwendige Maß zu beschränken.	
Geräteauswahl Die Versuchsanordnung ist der Ansatzgröße anzupassen.	
Energieeintrag Der Einsatz von Heizpilzen ist einem Ölbad vorzuziehen. Neue Methoden des Energieeintrages (z.B. Mikrowelle oder Ultraschall) können positive Effekte bewirken.	
cp Hilfsstoffe Die Auswahl von Hilfsstoffen ist im Hinblick auf eine möglichst geringe spezifische Wärmekapazität durchzuführen..	
cp Lösungsmittel Lösungsmittel sind unter Berücksichtigung der spezifischen Wärmekapazität und der notwendigen Reaktionstemperatur auszuwählen.	
Hilfsstoffmenge Die Hilfsstoffmenge ist auf das gerade notwendige Maß zu reduzieren. Vorversuche helfen, das richtige Maß gut abzuschätzen. Die Abtrennung der Hilfsstoffe ist wenn möglich in die Reaktion zu integrieren.	
Kühlwasser Der Kühlwasserfluss ist auf das notwendige Minimum einzustellen. Ein Kühlwasserkreislauf kann sich vorteilhaft auf die Umweltlast einer Reaktion auswirken	
Eis Eis zur Reaktionskühlung ist unter Berücksichtigung der Reaktionssicherheit so sparsam als möglich zu verwenden.	
Toxizität Lösungsmittel Bei der Auswahl von Lösungsmitteln ist auch deren Toxizitätspotenzial zu berücksichtigen. Die Stoffe dürfen nicht in die Umwelt gelangen.	
Toxizität Hilfsstoffe Bei der Auswahl von Hilfsstoffen ist deren Toxizitätspotenzial zu berücksichtigen. Nach Gebrauch müssen diese Stoffe recycelt oder umweltgerecht entsorgt werden.	
Vorketten Die Lasten aus Edukten und Hilfsstoffen vorgelagerten Prozessen sind bei der Stoffauswahl zu berücksichtigen.	

zelenen mechanochemisch durchgeführten Experimenten insbesondere die Mikrowellen-assistierte Chemie auf ihre Eignung für ein nachhaltigeres Laborpraktikum überprüft. Vorteile des Mikrowellen-assistierten Prozesses sind die Zeitersparnis, die genaue Temperatursteuerung direkt im Destillationssumpf bzw. im Extraktor und die sichere Beherrschung der eingesetzten Energie.

Die Versuchsbedingungen eines Mikrowellenexperiments hängen u. a. von den technischen Daten des Mikrowellengeräts ab. Um exakte Anleitungen für erfolgreiche und sichere Mikrowellenreaktionen im organisch-chemischen Praktikum erstellen zu können, wurde für die Ausarbeitung der NOP Laborexperimente das Gerät ETHOS der Firma MLS GmbH, Leutkirch, ausgewählt. Das Gerät, das Teil eines Baukastensystems ist, erfüllt alle bezüglich Sicherheit und Technik gestellten Ansprüche für Laborexperimente. Vom Grundsystem abgeleitet wird auch ein Anfängersystem mit vereinfachter Messtechnik (PRAKTIKA) angeboten.

Die Nutzung von Haushaltsmikrowellengeräten für chemische Reaktionen im Labor und für Ausbildungszwecke sollte aus Sicherheitsgründen unbedingt vermieden werden.

In Abbildung 4 ist das Grundgerät mit Rückflussapparatur gezeigt. Der einzige Unterschied zur herkömmlichen Rückflussapparatur ist ein Glasverbindungsstück, welches den Kolben im Mikrowellenraum mit dem Rückflusskühler außerhalb des Mikrowellenfeldes verbindet. Diese Apparatur ist beliebig durch Zusatzteile wie Tropftrichter, Was-

serabscheider, Destillationsbrücken oder KPG-Rührer zu ergänzen, welche in der Regel außerhalb des Mikrowellensystems mit Hilfe von Claisen-Aufsätzen eingebaut werden.

Für die Erweiterung des nutzbaren Temperaturbereiches über den Siedepunkt des jeweiligen Lösungsmittels hinaus stehen eine Reihe vergleichsweise einfacher Druckreaktoren zur Verfügung, welche primär für Aufschlusstechniken entwickelt wurden, aber auch hervorragend zur Durchführung organischer Synthesen geeignet sind.

Ergänzende Informationsangebote

Neben den sorgfältig erarbeiteten Versuchsvorschriften können über die NOP-Website auch Hilfen zur Versuchsdurchführung gegeben werden, die in einer gedruckten Monographie entweder noch nicht Standard sind oder deren Rahmen sprengen würden. So sind für alle Versuche des Lehrmoduls Operationsschemata verfügbar (Abbildung 5). Für Experimentatoren, die von den verwendeten Geräten keine Vorstellung haben, sind Digitalfotos abruflbar. Und als Angebot für Praktikumsleiter, die mit der Verantwortung konfrontiert sind, für die Laborversuche Betriebsanweisungen nach der Gefahrstoffverordnung zu erstellen, werden diese als Vorlagen im PDF-Format angeboten.

Durch die kostenlose Verfügbarkeit des Browser-Plugins „Chime“ (siehe Internet-Adressen) können auch mit jedem unter Windows gängigen Browser dreidimensionale Darstellungen der bei der Reaktion eingesetzten Verbindungen angesehen werden. Diese Darstellungen sind insbesondere

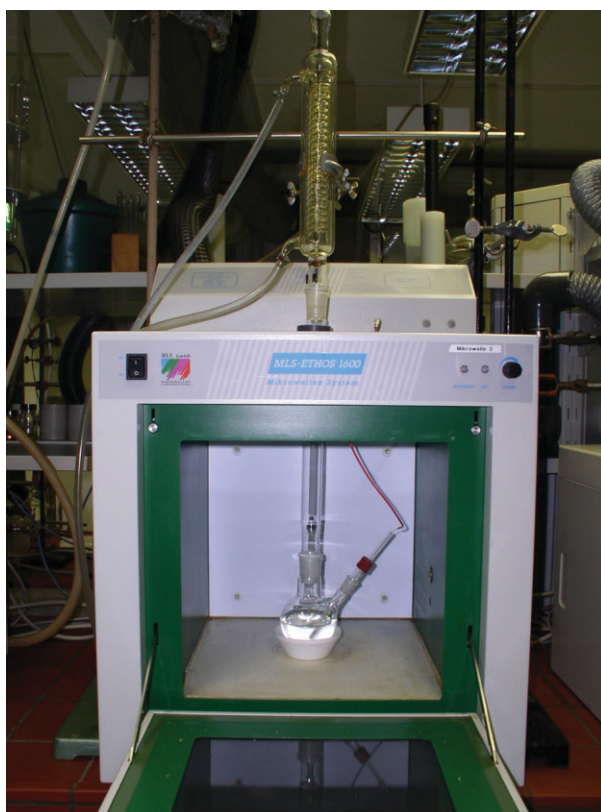
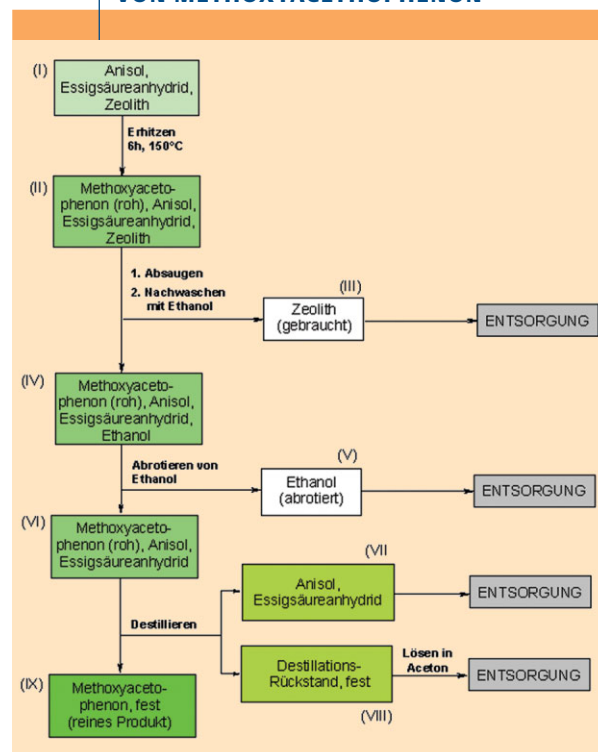


Abb. 4 Reaktionsapparatur im Mikrowellenreaktor mit Rückflusskühler.

ABB. 5 OPERATIONSSCHEMA FÜR DIE SYNTHESE VON METHOXYACETOPHENON



in Kombination mit interaktiven Spektren interessant. So wurden die im JCAMP-DX-Format bereitgestellten ^1H - und ^{13}C -NMR-Spektren mit 3D-Darstellungen verknüpft (Abbildung 6). Interessierende Teile der Spektren können vergrößert werden und beim Anklicken der Peaks werden die entsprechenden Atome bzw. Gruppen in der 3D-Darstellung hervorgehoben.

Bewertungsmethoden Stoffinformationen

Die wichtigsten bewertenden Informationen über Stoffe sind üblicherweise Gefahrensymbole sowie R- und S-Sätze. Diese Informationen werden für jeden Stoff, der im NOP eingesetzt wird, recherchiert und in der Stoffdatenbank abgelegt. Für jeden Versuch wird je eine Ansicht der benötigten Stoffe und der anfallenden Stoffe angeboten, in der sowohl die beim gewählten Maßstab eingesetzten/anfallenden Mengen, als auch diese Gefahrstoffinformationen in übersichtlicher Form präsentiert werden. Bei der Recherche weitergehender Informationen wie physikalisch-chemische Eigenschaften oder toxikologische und ökotoxikologische Daten fällt aber insgesamt auf, dass die Stoffe oft sehr unterschiedlich gut beschrieben und getestet sind. Um diese Tatsache sinnfällig zu machen, wird eine weitere Ansicht angeboten: die Strukturformeln der Stoffe werden je nach Datenlage farblich unterlegt (Abbildung 7).

Eine optisch ähnliche Darstellung der Stoffbewertungen für einen Versuch wird durch die Visualisierung der Wirkfaktoren nach den Technischen Regeln für Gefahrstoffe 440 (TRGS 440) erreicht. Hier bedeutet die Hinterlegung einer Struktur mit einem dunkleren Rotton ein größeres Risiko aus der Sicht des Arbeitsschutzes (Abbildung 8).

Die bisher erwähnten stoffbezogenen Bewertungen basieren in der Regel auf experimentellen Daten, die aus den aggregierten, bewertungsbezogenen Informationen nicht mehr hervorgehen.

Um die Studierenden bei einer tiefer gehenden Recherche über die vorkommenden Stoffe zu unterstützen, ist in der Stoffdatenbank des NOP eine Fülle von Stoffinformationen hinterlegt, die im Hinblick auf die Nutzbarkeit im Kontext des NOP aufbereitet wurde. Durch einfaches Klicken auf Strukturformel oder Namen der Chemikalie ist eine Stoffansicht erreichbar, die für den entsprechenden Stoff alle im NOP recherchierten Hintergrundinformationen mit Quellenangabe bietet.

Kennzahlen für die Versuche

Kennzahlen sind „relevante Größen in Form einer absoluten oder relativen Zahl, die gezielt einen Sachverhalt mit erhöhtem Erkenntniswert beschreiben“. Analog der betriebswirtschaftlichen Kennzahlen, lassen sich auch Kennzahlen ermitteln, die eine Aussage über die Umweltlast einer Re-

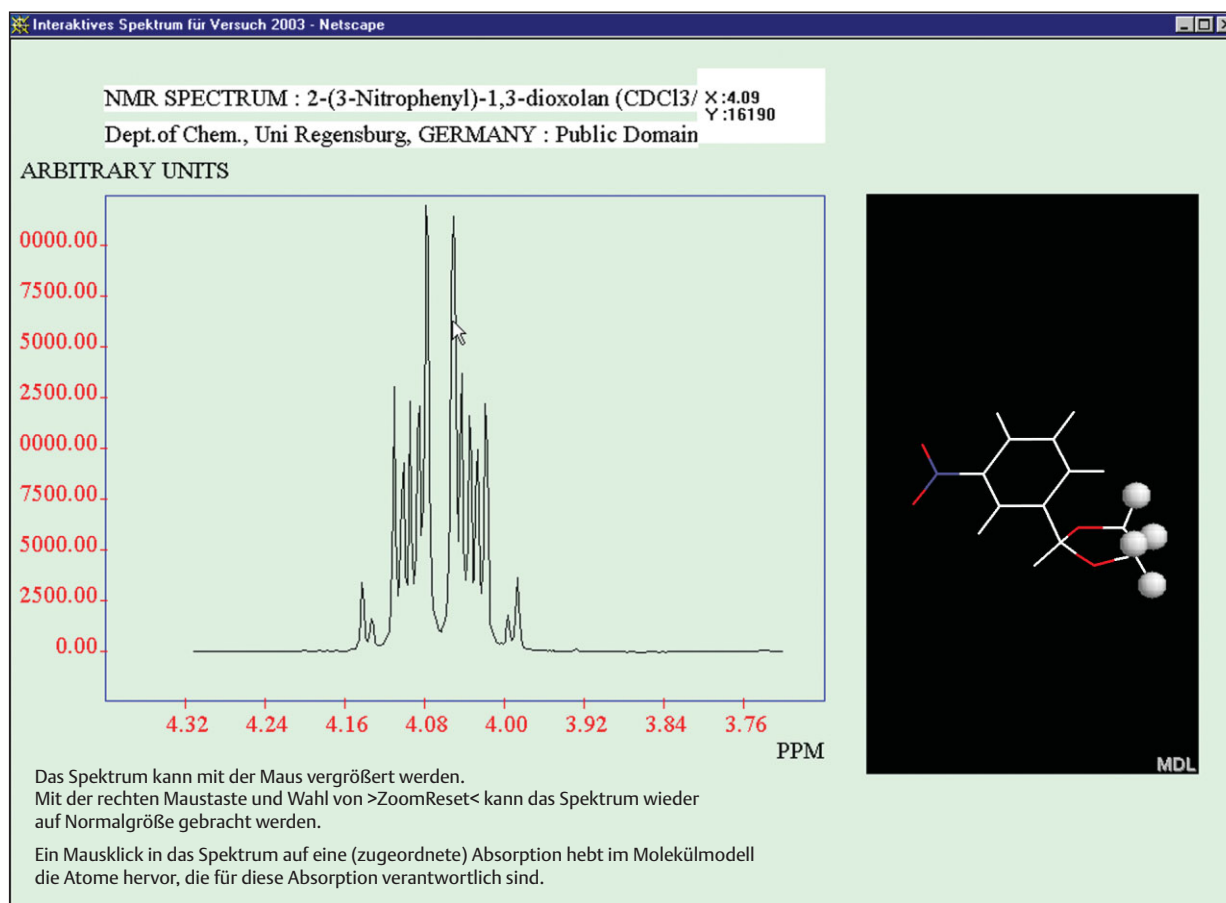


Abb. 6 Interaktives, skalierbares ^1H -NMR-Spektrum von 2-(3-Nitrophenyl)-1,3-dioxolan.

Darstellung der Praktikumsversuche – Konqueror

Location Edit View Go Bookmarks Tools Settings Window Help

Location: http://www.oc-praktikum.de/versuche_frameset.php?versuch=2003

NOP ONLINE

Versuch: 2003

Themen

Synthesevorschrift

Operationsschema

Stoffe

- Datenlage
- Wirkfaktoren TRGS 440
- Benötigte Stoffe
- Anfallende Stoffe

Geräte

Bewertung

Analytik

Betriebsanweisung

O=Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1 + OCCO $\xrightarrow{\text{4-Toluolsulfonsäure}}$ C1OC(c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)O1 + H2O; Nebenreaktionen

Datenlage

Katalysator	Sonstige Hilfsstoffe
4-Toluolsulfonsäure <chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)O)cc1</chem>	Natriumhydrogensulfid <chem>NaHSO3</chem>
Lösemittel Cyclohexan <chem>C1CCC(CC1)</chem>	Natriumsulfat <chem>Na2SO4</chem>
tert-Butylmethylether <chem>CC(C)(C)OC</chem>	Molekularsieb 4A <chem>Na_xAl_ySi_zO_n</chem>

Lösemittel für Analytik

Toxizitäts- und Ökotoxizitätsdaten Nur Toxizitätsdaten Weder Toxizitäts- noch Ökotoxizitätsdaten Nicht einmal CAS-Nr

Abb. 7 Farbige Darstellung der Datenlage für die Stoffe eines Versuches. Je dunkler das Blau, desto weniger Daten sind verfügbar.

Darstellung der Praktikumsversuche – Konqueror

Location Edit View Go Bookmarks Tools Settings Window Help

Location: http://www.oc-praktikum.de/versuche_frameset.php?versuch=2003

NOP ONLINE

Versuch: 2003

Themen

Synthesevorschrift

Operationsschema

Stoffe

- Datenlage
- Wirkfaktoren TRGS 440
- Benötigte Stoffe
- Anfallende Stoffe

Geräte

Bewertung

Analytik

Betriebsanweisung

O=Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1 + OCCO $\xrightarrow{\text{4-Toluolsulfonsäure}}$ C1OC(c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)O1 + H2O; Nebenreaktionen

Wirkfaktoren nach TRGS 440

Katalysator	Sonstige Hilfsstoffe
4-Toluolsulfonsäure Wirkfaktor 5 <chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)O)cc1</chem>	Natriumhydrogensulfid Wirkfaktor 100 <chem>NaHSO3</chem>
Lösemittel Cyclohexan Wirkfaktor 5 <chem>C1CCC(CC1)</chem>	Natriumsulfat Wirkfaktor 5 <chem>Na2SO4</chem>
tert-Butylmethylether Wirkfaktor 5 <chem>CC(C)(C)OC</chem>	Molekularsieb 4A Wirkfaktor 5 <chem>Na_xAl_ySi_zO_n</chem>

Lösemittel für Analytik

Wirkfaktor 0 Wirkfaktor >0 bis 10 Wirkfaktor >10 bis 100 Wirkfaktor >100 bis 1000 Wirkfaktor >1000 bis 50000

Abb. 8 Farbige Darstellung der Wirkfaktoren nach TRGS 440 für die Stoffe eines Versuches. Je dunkler das Rot, desto bedenklicher ist der Stoff aus der Sicht des Arbeitsschutzes.

aktion zulassen und damit als direktes Entscheidungskriterium herangezogen werden können [10].

Gängige Kennzahlen in der organischen Synthesechemie sind z.B. Ausbeute und Reinheit, die die Qualität der durchgeführten Stoffumwandlung charakterisieren. Bevor der Versuch überhaupt durchgeführt wird, lassen sich jedoch über die stöchiometrische Gleichung bereits Aussagen über die Atomökonomie und damit über die Umweltlast einer Umsetzung treffen. Die Atomökonomie ist ein 1991 von B.M. Trost eingeführter Begriff [11], beschreibt das Verhältnis der Molmasse des Zielproduktes zu der Summe der Molmasse aller in der stöchiometrischen Gleichung aufgeführten Edukte.

Eine weitere sinnvolle Umweltkennzahl ist die Stoffeffizienz. Die Stoffeffizienz e_S einer Umsetzung wurde als das Verhältnis der Masse des erhaltenen Reinprodukts m_P geteilt durch die Summe der Massen aller eingesetzten Stoffe definiert:

$$e_S = m_P / \sum_i m_i$$

wobei der Index i über alle eingesetzten Stoffe geht. Kühlmedien wie Kühlwasser oder Eis, die nicht mit der Reaktionsmischung in Kontakt kommen, werden nach der Konvention des NOP an dieser Stelle nicht mit einbezogen. Solche Stoffe mit einzubeziehen ist Aufgabe einer weitergehenden Inputanalyse. Die Stoffeffizienz, wie sie hier definiert ist, ist der Kehrwert des „Mass Index“, der ähnlich wie der „E-Factor“ ein Maß für die Umweltlast einer Reaktion ist [12,13]. Bei der beschriebenen Kennzahl wurde bewusst das Effizienzmaß gewählt, da so ein höherer Wert auch tatsächlich eine Verbesserung signalisiert. Weitergehende stoffbezogene Analysen der Umweltlast chemischer Laborsynthesen wurden an der Universität Oldenburg mit Hilfe des Computerprogramms „Environmental Assessment Tool for Organic Syntheses“ (EATOS) ermöglicht und an Beispielen aus dem NOP durchgeführt [13].

Neben der stofflichen Komponente, trägt auch der Energieverbrauch (bzw. die aus der Energieerzeugung resultierenden Emissionen) einer Reaktion einen wesentlichen Teil zur Gesamtumweltlast bei [14]. Infolge dessen muss auch für den Bereich Energieverbrauch eine Kennzahl berechnet werden.

Im NOP wurde dazu die Energieeffizienz e_E erstmalig eingeführt. Die Energieeffizienz e_E einer Umsetzung wurde, analog der Stoffeffizienz, als das Verhältnis der Masse des erhaltenen Reinprodukts m_P geteilt durch die Summe der Energieeinträge E_k während des gesamten Versuches definiert.

$$e_E = m_P / \sum_k E_k$$

Der Index k wird dabei in pragmatischer Weise über die separat erfassbaren Energieeinträge, sprich über die eingesetzte elektrische Energie bestimmt. Hier wird somit auch die Energie zur Erzeugung von Eis zum Kühlen erfasst. Atomökonomie, Stoffeffizienz und – bei Vorliegen von Energiedaten – Energieeffizienz werden für die Versuche

des NOP automatisch berechnet und sind bei jedem Versuch unter dem Menüpunkt *Bewertung – Kennzahlen* zu finden.

Ausblick

Das NOP ist keine Neuerfindung des organisch-chemischen Praktikums. Aber es ist seine Fortschreibung und Modernisierung. Als Hochschullehrer sollten wir darauf achten, unsere Studenten auf der Höhe der Zeit auszubilden. Und das heißt eben nicht nur, dass sie bereits im Praktikum mit den modernen analytischen und spektroskopischen Methoden in Kontakt kommen, sondern dass sich auch moderne Tendenzen der Chemieausbildung in diesem Praktikum widerspiegeln müssen. Es geht um mehr als handwerkliche Fähigkeiten – diese sind heute so notwendig wie eh und je, aber sie sind nicht mehr hinreichend. Der Studierende muss frühzeitig lernen, sein Arbeiten in einem größeren Kontext zu sehen – vor dem Hintergrund der synthetischen Effizienz, der toxikologischen Eigenschaften aller an einer chemischen Reaktion beteiligten Chemikalien, der Energieeinsparung und der Nachhaltigkeit, um nur die wichtigsten Punkte zu nennen.

Gegenüber dem konventionellen Praktikumsbuch – dem „Kochbuch“ neben dem Reaktionskolben – bietet eine Internetversion einen einmaligen Vorteil: Chemie ist eine dynamische Wissenschaft, die definitionsmäßig von Veränderungen lebt. „Das Bessere ist des Guten Feind“ ist ihr Motto – das gilt auch für unsere Praktikumsvorschriften. Sie sind und sollen nie das letzte Wort sein, sondern Anregungen an unserer Leser und Nutzer, uns mit noch besseren Vorschriften zu versorgen. Das Internet erlaubt die kontinuierliche Aktualisierung und so werden wir quasi asymptotisch am Ende die tatsächlich beste Laboratoriumspraxis erreichen.

Zusammenfassung

Das Neue und nachhaltigere Organisch-chemische Praktikum NOP nutzt die zusätzlichen Möglichkeiten, die eine Website im Vergleich zu einem konventionellen Laborpraktikum in Buchform hat, um angehenden Synthesechemikern ein breiteres Verständnis der durchgeführten Versuche zu vermitteln. Hierzu gehören Informationen zu analytischen Methoden, Hintergrundinformationen zu den eingesetzten und entstehenden Stoffen sowie Kennzahlen zur Bewertung von Stoff- und Energieeffizienz der Versuche. Nicht zuletzt wird dabei Hintergrundwissen zum Konzept der nachhaltigen Entwicklung für den Themenbereich Synthesechemie aufbereitet.

Summary

The sustainable organic chemistry lab course for the new millennium (NOP) makes use of the possibilities that an interactive website provides compared to a conventional lab course published as a textbook or manual. The prospective synthetic chemist can thus gain a more in-depth understanding of his/her experiments. Detailed information about analytical methods, background information about the sub-

stances being used and being formed during the experiment and „management ratios“ like substance efficiency and energy efficiency are provided. Last but not least, knowledge about the concept „sustainable development“ is being adapted to the domain of synthetic chemistry.

Schlagworte

Organisches Praktikum, Synthese, Nachhaltigkeit, Internet

Literatur

- [1] K. Schwetlick, *Organikum – Organisch-chemisches Grundpraktikum*, 21 ed. Wiley-VCH, Weinheim, **2001**.
- [2] T. Eicher und L. F. Tietze, *Organisch-chemisches Grundpraktikum unter Berücksichtigung der Gefahrstoffverordnung*, G. Thieme, Stuttgart, **1993**.
- [3] L. F. Tietze und T. Eicher, *Reaktionen und Synthesen im organisch-chemischen Praktikum und Forschungslaboratorien*, 2 ed. G. Thieme, Stuttgart, **1991**.
- [4] S. Hünig, G. Märkl, S. Sauer, C. Braig, A. Merz und T. Troll, *Integriertes Organisches Grundpraktikum*, Wiley-VCH, Weinheim, **1998**.
- [5] S. Hünig, G. Märkl und S. Sauer, *Integriertes Organisches Grundpraktikum – Ein Assistenten Manual*, Wiley-VCH, Weinheim, **1998**.
- [6] S. Gärtner, J. Küllmer und U. Schlottmann, *Angewandte Chemie International Edition*, **2003**, 42, 4456-4469.
- [7] K. Hungerbühler, J. Ranke und T. Mettler, *Chemische Produkte und Prozesse: Grundkonzepte zum umweltorientierten Design*, Springer, Berlin, **1998**.
- [8] P. A. Anastas und J. C. Warner, *Green Chemistry*, Oxford University Press, Oxford, **1998**.
- [9] A. Diehlmann, G. Kreisel und R. Gorges, *Chem Educator*, **2003**, 8, 102-106.
- [10] T. Loew und H. Kottmann, *UMIS-Magazin*, www.umis.de, **1996**.
- [11] B. M. Trost, *Science*, **1991**, 254, 1471-1477.
- [12] R. A. Sheldon, *Chemtech*, **1994**, 24, 38.
- [13] M. Eissen und J. O. Metzger, *Chem Eur J*, **2002**, 8, 3580-3585.
- [14] A. Beck, M. Scheringer und K. Hungerbühler, *Int J LCA*, **2000**, 5, 335-344.

Internet

<http://www.oc-praktikum.de>
<http://www.dbu.de>
<http://www.mdli.com/chime/>

Die Autoren



Johannes Ranke studierte Umweltnaturwissenschaften mit Schwerpunkt Chemie an der ETH Zürich und promovierte 2001 in Bremen. Derzeit ist er wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Abteilung „Bioorganische Chemie“ des Zentrums für Umweltforschung und Umwelttechnologie (UFT) in der Universität Bremen unter der Leitung von Prof. Dr. B. Jastorff. Arbeitsgebiete: Risikoanalyse von Chemikalien und nachhaltiges Produktdesign.



Burkhard König studierte und promovierte in Hamburg. Nach Postdoktoraten bei Prof. M. A. Bennett, Canberra, Australien, und Prof. B. M. Trost, Stanford, USA, habilitierte er sich 1996 an der TU Braunschweig. Seit 1999 ist er Professor für Organische Chemie an der Universität Regensburg. Arbeitsgebiete: Intermolekulare Wechselwirkungen und molekulare Erkennung.



Achim Diehlmann studierte in Bingen und Hatfield (UK) Umweltschutz und diplomierte an der University of Hertfordshire auf dem Gebiet des Biomonitoring. Seit seinem Wechsel an die Friedrich Schiller Universität Jena beschäftigt er sich mit der ökobilanziellen Betrachtung technisch chemischer Prozesse. Er promovierte 2002 mit einem Beitrag zur Nachhaltigen Entwicklung in der Chemieausbildung.



Günter Kreisel promovierte 1977 in Jena. Von 1991 – 1997 war er geschäftsführender Direktor des Instituts für technische Chemie in Jena, 1994 erfolgte die Berufung zum Hochschuldozenten. Seit 1997 ist er Apl. Professor an der FSU Jena. Arbeitsgebiete: Ökobilanzierung, Nachhaltigkeit in der Chemie.



Matthias Nüchter studierte Chemie in Merseburg und promovierte dort. 1989-1998 war er wissenschaftlicher Mitarbeiter an der AdW und deren Folgeeinrichtungen in Leipzig. Derzeit leitet er die Arbeitsgruppe „Alternative Reaktionsführung“ im Institut für Technische Chemie und Umweltchemie der Friedrich-Schiller-Universität Jena. Arbeitsgebiete: alternative Energieformen zur Aktivierung chemischer Reaktionen und Prozesse, Pyrolysechemie, Chemie nachwachsender Rohstoffe.



Reinhold Störmann studierte an der Universität Bremen und promovierte dort 1988. Es folgten 1992 ein Forschungsaufenthalt am National Institute of Health in Bethesda, MD, USA, und 1992 – 1993 eine Zusatzausbildung als IT-Spezialist für Naturwissenschaften am iher-data-bildungs-zentrum, Bremen. Derzeit ist er Geschäftsführer der CHEOPS GmbH. Arbeitsgebiete: Programmierung chemischer Datenbanken, Struktur-Wirkungs-Denken in der Chemie.



Henning Hopf studierte in Göttingen und Madison, WI. Der Promotion 1967 in Madison folgte 1972 die Habilitation in Karlsruhe. Seit 1979 ist er Professor in Braunschweig und derzeit amtierender Präsident der Gesellschaft Deutscher Chemiker. Arbeitsgebiete: Kohlenwasserstoffchemie, Reaktionsmechanistik.

Korrespondenzadresse

Dr. Johannes Ranke,
 Zentrum für Umweltforschung und
 Umwelttechnologie UFT, Universität Bremen,
 Leobenerstrasse, D-28359 Bremen,
jranke@uni-bremen.de