

Optimierungspotenziale von Laborreaktionen - Grundregeln für Nachhaltige Synthesen

Im Verlaufe der Untersuchungen einiger Reaktionen des NOP konnten allgemeingültige Schwachstellen identifiziert werden. Diese beeinflussen vor allem den Energie- sowie den Ressourcenverbrauch von Laborreaktionen. Mit Hilfe „einfacher“ Maßnahmen lassen sich die erkannten Probleme reduzieren, bzw. schon bei der Reaktionsplanung vermeiden. Zu diesem Zweck wurden die nachfolgenden „Grundregeln für Nachhaltige Synthesen“ erstellt [1]. Die Regeln können einen Beitrag zur Vermittlung eines ganzheitlichen, d.h. vor- und nachgelagerte Prozesse mit einbeziehenden, Denkens und zur Verbesserung der Nachhaltigkeit einer Reaktion aus ökologischer Sicht leisten.

Grundregeln für Nachhaltige Synthesen - Minimierung des Energieverbrauchs

Die Umweltauswirkung von Laborreaktionen wird wesentlich durch die bei der Versuchsdurchführung verbrauchte elektrische Energie bzw. die Umweltlasten der Energiebereitstellung beeinflusst. Der hohe Energieverbrauch der untersuchten Reaktionen hat seine Ursache überwiegend in hohen Energieverlusten an die Umgebung. Nachfolgend werden „Grundregeln für Nachhaltige Synthesen“ definiert, deren Anwendung zu einer Reduktion der Energieverluste bei Laborreaktionen führt.

Thermische Isolation Die Versuchsanordnungen sind bestmöglich zu isolieren.

Grundregel 1: Thermische Isolation

Durch Isolation kann der Wärmedurchgangskoeffizient (k-Wert) verkleinert werden. Dies führt zu einem geringeren Wärmedurchgang und damit zu reduziertem Energieverlust. Der Verlust kann weiter vermindert werden, indem der Temperaturgradient zwischen Reaktionsmedium und Umgebung verkleinert wird. Da der Energieverlust auch zeitabhängig ist, spielt auch die Versuchsdauer eine wesentliche Rolle bei deren Reduktion. Aus diesem Grund ist eine genaue Kenntnis des Reaktionsverlaufs der Reaktion unerlässlich.

Versuchsbedingungen Die Reaktionstemperatur sowie die Versuchsdauer sind auf das notwendige Maß zu beschränken.

Grundregel 2: Versuchsbedingungen

Ein weiterer Parameter, der die Energieverluste beeinflusst, ist die Oberfläche der Apparatur, die die Reaktionsmischung gegen die Umgebung abgrenzt. Je kleiner die Oberfläche, desto geringer der Energieverlust durch Wärmeleitung oder Wärmestrahlung. Das Verhältnis zwischen Oberfläche und Füllvolumen ist daher sinnvoll zu wählen.

Geräteauswahl Die Versuchsanordnung ist der Ansatzgröße anzupassen.

Grundregel 3: Geräteauswahl

Auf den beiden bereits formulierten Grundregeln Isolation und Versuchsbedingungen beruhen auch die bei den verschiedenen Methoden des Energieeintrags festgestellten Unterschiede im Energieverbrauch. Da eine vollständige Isolation des Heizmediums meist nicht möglich ist, sollten günstige Methoden des Energieeintrags bevorzugt eingesetzt werden.

Energieeintrag Der Einsatz von Heizpilzen ist einem Ölbad vorzuziehen. Neue Methoden des Energieeintrags (z.B. Mikrowelle oder Ultraschall) können positive Effekte bewirken.

Grundregel 4: Energieeintrag

Neben hohen Energieverlusten durch Abgabe thermischer Energie an die Umgebung, gibt es noch andere Bereiche, die zum Energieverbrauch von Laborsynthesen beitragen. So beeinflussen Hilfsstoffe die zum Aufheizen und Halten der Reaktionstemperatur benötigte Energie.

c_p Hilfsstoffe Die Auswahl von Hilfsstoffen ist im Hinblick auf eine möglichst geringe spezifische Wärmekapazität durchzuführen.

Grundregel 5: spezifische Wärmekapazität Hilfsstoffe

Den zur Gruppe der Hilfsstoffe zählenden Lösungsmitteln muss aufgrund des meist hohen Anteils an der Reaktionsmischung besondere Bedeutung beigemessen werden. Aus diesem Grund werden die Anforderungen an das zu verwendende Lösungsmittel in einer eigenen Grundregel benannt.

c_p Lösungsmittel Lösungsmittel sind unter Berücksichtigung der spezifischen Wärmekapazität (möglichst klein) und der notwendigen Reaktionstemperatur (möglichst niedrig) auszuwählen.

Grundregel 6: spezifische Wärmekapazität Lösungsmittel

Der Einsatz von Hilfsstoffen ist im Hinblick auf den Energieverbrauch der Reaktion noch aus einer weiteren Richtung optimierbar. Der Zusammenhang zwischen Ressourcen- und Energieverbrauch wird dabei deutlich.

Grundregeln für Nachhaltige Synthesen - Minimierung von Ressourcen- und Energieverbrauch

Ein großer Einsatz von Hilfsstoffen bei Reaktion und Aufarbeitung wirkt sich negativ auf den Ressourcenverbrauch aus. Weiterhin trägt die Menge der verwendeten Hilfsstoffe aufgrund der Zusammenhänge beim Aufheizen von Medien zum Verbrauch elektrischer Energie bei und wirkt sich aus ganzheitlicher Sicht auf den Ressourcen- und Energieverbrauch in den Vorketten aus. Hilfsstoffe werden oft über das notwendige Maß hinaus eingesetzt.

<i>Hilfsstoffmenge</i>	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.
------------------------	--

Grundregel 7: Hilfsstoffmenge

Dem Hilfsstoff Kühlwasser kommt, ähnlich wie den Lösungsmittel, aufgrund seines Anteils am Stoffverbrauch einer Reaktion große Bedeutung zu.

<i>Kühlwasser</i>	Der Kühlwasserfluss ist auf das notwendige Minimum einzustellen. Die Verwendung eines Kühlwasserkreislaufes kann vorteilhaft auf die Umweltlast einer Reaktion wirken.
-------------------	---

Grundregel 8: Kühlwasser

Der Kühlwasserverbrauch kann durch den Einsatz eines Kühlkreislaufes oder eines Kryostaten verringert werden, dadurch erhöht sich aber der Energieverbrauch. Wird Eis bei Reaktionen zur Kühlung benötigt, ist dessen Einsatz aufgrund des hohen Energieverbrauchs bei der Herstellung ebenfalls auf das notwendige Maß zu beschränken.

<i>Eis</i>	Eis zur Reaktionskühlung ist unter Berücksichtigung der Reaktions-sicherheit so sparsam wie möglich zu verwenden.
------------	---

Grundregel 9: Eis

Neben der Menge der eingesetzten Stoffe haben auch ihre Eigenschaften einen deutlichen Einfluss auf die Umweltlast von Laborsynthesen. Nachfolgend werden allgemeine Grundregeln zur Minimierung der Umweltlasten aufgestellt. Dabei gilt das Interesse vor allem den Hilfsstoffen.

Grundregeln für Nachhaltige Synthesen - Minimierung der Toxizitätspotenziale

Bei der Formulierung von Optimierungsregeln im Bereich „Minimierung der Toxizitätspotenziale“ werden die Edukte nicht berücksichtigt. Zwar wäre eine Optimierung hin zu generell nicht toxischen Ausgangsstoffen wünschenswert, aber eine Variation der Edukte zur Synthese einer bestimmten Zielverbindung ist nicht immer möglich. Geringere Probleme gibt es bei der Auswahl der verwendeten Hilfsstoffe. Hier scheint eine Berücksichtigung der stofflichen Wirkpotenziale einfacher.

<i>Toxizität Lösungsmittel</i>	Bei der Auswahl von Lösungsmitteln ist auch deren Toxizitätspotenzial zu berücksichtigen. Die Stoffe dürfen nicht in die Umwelt gelangen.
--------------------------------	---

Grundregel 10: Toxizität Lösungsmittel

<i>Toxizität Hilfsstoffe</i>	Bei der Auswahl von Hilfsstoffen ist deren Toxizitätspotenzial zu berücksichtigen. Nach Gebrauch müssen diese Stoffe recycelt oder umweltgerecht entsorgt werden.
------------------------------	---

Grundregel 11: Toxizität Hilfsstoffe

Wie in vorangegangenen Kapiteln beschrieben, können hohe Umweltlasten auch aus vor- und nachgelagerten Prozessen der eigentlichen Reaktion stammen. Eine Berücksichtigung der Vorketten der eingesetzten Edukte und Hilfsstoffe kann helfen, die Umweltlast aus ganzheitlicher Sicht zu reduzieren.

Grundregeln für Nachhaltige Synthesen - Berücksichtigung der Vorketten

Bei der Produktion von Chemikalien werden je nach Komplexität des Moleküls oft unterschiedliche Umweltlasten hervorgerufen. Sehr oft sind diese Umweltlasten nicht beeinflussbar, der Experimentator kann aber den Chemikalieneinsatz auf die für die Reaktion gerade notwendige Stoffmenge beschränken. Die Anstrengungen, Stoffstrombilanzen für unterschiedliche Chemikalien zu erstellen, haben in den vergangenen Jahren zugenommen. Dadurch wird eine Berücksichtigung der Vorketten von Edukten und Hilfsstoffen künftig einfacher werden. Eine Optimierung von Reaktionen ist durch die Auswahl von Stoffen mit geringer Umweltlast in den Vorketten möglich.

<i>Vorketten</i>	Die Lasten aus Edukten und Hilfsstoffen vorgelagerter Prozesse sind bei der Stoffauswahl zu berücksichtigen.
------------------	--

Grundregel 12: Berücksichtigung vorgelagerter Prozesse

In nachfolgender Tabelle (Tab. 1) werden alle vorgestellten „Grundregeln für Nachhaltige Synthesen“ noch einmal zusammengefasst. Zusätzlich wurde jede Grundregel mit einem Piktogramm versehen das die Anwendung, ähnlich wie bei Gefahrensymbolen, vereinfachen soll.

Die Berücksichtigung der aufgestellten Optimierungsregeln kann helfen, den Energie- und Ressourcenverbrauch von Laborreaktionen sowie deren Umweltlasten zu mindern. Ferner können durch eine konsequente Anwendung der „Grundregeln für Nachhaltige Synthesen“ bereits in der Ausbildung spätere Entscheidungsträger für die Belange einer nachhaltigen Entwicklung sensibilisiert werden.

	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.

Tab.1: Grundregeln für Nachhaltige Synthesen

[1] Diehlmann, A., Kreisel, G., Gorges, R. (2003). Contribution to “Developing Sustainability” in Chemical Education. *The Chemical Educator*, 8