



## Kurze Einführung in die Inhalte des NOP

### Texte und Hintergrundinformationen

Zu vielen Themen, die in einer modernen organisch-chemischen Ausbildung nicht fehlen sollten, bietet die NOP Datenbank das Wichtigste in Form kurzer Texte. Die Texte sind zum Selbststudium oder als Grundlage für Seminarvorträge gedacht. Zu den folgenden Themen sind Beiträge in den Rubriken [Nachhaltigkeit](#), [NOP - Wie?](#) und [Techniken](#) zu finden:

- Nachhaltigkeit
- Gesetzliche Regelungen und Vorschriften
- Bewertungsverfahren für chemische Stoffe, Reaktionen und Abfälle
- Physikalisch-chemische, toxikologische und ökotoxikologische Kennzahlen
- Informationsquellen zum Thema Arbeitssicherheit und Umweltschutz
- Umweltmanagement (z.B. Abfallentsorgung)
- Inhalte und Erstellung einer Ökobilanz
- Energieeintrag in chemische Reaktionen (z.B. durch Mikrowellenstrahlung)
- Energiemessung und Energiekennzahlen
- Optimierung von Reaktionen und Minimierung der Abfälle.

Einen Zugang zu den klassischen praktikumsbezogenen Themen, wie

- Arbeitsmethoden im Laboratorium,
- Chromatographie und
- Spektroskopie



bieten Zusammenstellungen der guten und gängigen Informationsquellen in deutscher und englischer Sprache, die in den meisten Bibliotheken zu finden sind, bzw. in vielen Laborpraktika genutzt werden.

Im [Glossar](#), das eine Suchfunktion enthält, sind neben kurzen Begriffserklärungen auch Texte mit ausführlicheren Informationen, z.B. zur Energieeffizienz, Reaktionswärme oder zu Spurenschadstoffen, wie Dioxin oder Polychlorierten Biphenylen (PCB), zu finden.

## **Kenndaten von Chemikalien**

Nur wer weiß, was über Eigenschaften und Wirkungen einer Chemikalie bereits bekannt ist, kann mit Stoffen nachhaltig experimentieren und forschen. Deshalb ist zu den Laborexperimenten unter dem Menüpunkt Stoffe zunächst die Datenlage zu einer Chemikalie graphisch dargestellt. Mit einem Blick ist dort zu entnehmen, wie viel Wissen zu den Eigenschaften und Wirkungen einer Chemikalie gegenwärtig in der Literatur zu finden ist. Der Menüpunkt Wirkfaktoren bietet auf einen Blick das Gefährdungspotenzial der im Experiment auftretenden Chemikalien für den Menschen bei einer Exposition. Mit einem Klick auf den Namen einer der Chemikalie erfährt man über die Menüleiste unter Grenzwerte und Einstufungen, ob der Stoff in der MAK-Werte Liste aufgeführt ist (Arbeitsschutz) oder das Umweltbundesamt für diesen Stoff eine Wassergefährdungsklasse festgelegt hat (Umweltschutz). Einen direkten Zugang zu Chemikaliendaten ohne Umweg über die Laborexperimente bietet das Feld Stoffdaten auf der NOP Startseite. Die Auswahl erfolgt über eine Suchfunktion. Hier findet sich auch eine Sammlung von Internetseiten und Datenbanken, die für die selbständige Recherche von Chemikalieneigenschaften nützlich sind.

Für Chemikalien der NOP-Datenbank lassen sich derzeitige physikalisch-chemische, toxikologische und ökotoxikologische Kenndaten direkt aufrufen. So werden Grundlagen verständlich und nachvollziehbar, auf deren Basis die Einstufung einer Substanz in R- und S-Sätze, Wirkfaktoren, MAK-Wert oder Wassergefährdungsklasse erfolgt bzw. eine gesetzlich geforderte Betriebsanweisung erstellt wird. Einstufungen und Betriebsanweisungen sind jeweils angegeben. Doch nur für einige Substanzen liegen auf den NOP Seiten bereits vollständige Datensätze vor. Entweder sind entsprechende Untersuchungen heute noch nicht durchgeführt worden oder die Angaben konnten nicht im vollen Umfang recherchiert werden.



In solchen Fällen finden sich in der Menüleiste nur die Punkte Identität, 3-D-Struktur und Grenzwerte und Einstufungen, die sonst durch die bereits genannten Felder ergänzt sind. Hier kann und soll die eigenständige Recherche nach den Kenndaten durchgeführt werden. Um den Einstieg in die Suche zu erleichtern ist unter Identität die CAS-Nummer der Substanz zur eindeutigen Identifizierung angegeben. Weitere Hilfestellung gibt der Text [Bewertung chemischer Substanzen](#) in der Rubrik [NOP - Wie?](#).

## Laborexperimente

Wie in jedem Laborpraktikum, bilden auch im NOP die Laborexperimente das Zentrum. Das Feld [Versuche](#) führt von der Startseite zur Auswahl, die nach Kriterien wie der beteiligten Stoffklasse, dem Reaktionstyp, der Arbeitstechnik oder dem Schwierigkeitsgrad erfolgen kann. Es können aber auch alle ca. 75 verfügbaren Versuche angezeigt werden. Die Sammlung enthält zwei Gruppen von Laborexperimenten: Die Versuche des Lehrmoduls, in denen exemplarisch bereits eine weitestgehende Optimierung, Analyse und Bewertung durchgeführt wurde. Diese Laborexperimente haben Vorbildfunktion und sollen veranschaulichen, wie chemische Reaktionen bereits in der Ausbildung optimiert und bewertet werden können. Die Titelzeilen aller Lehrmodulversuche sind zur leichten Identifizierung grau hinterlegt. Die übrigen Versuche enthalten alle zur sicheren Durchführung im Praktikum nötigen Angaben und eine vollständige Analytik, sind aber nicht so umfassend bewertet oder optimiert worden. Dies gibt Dozenten und Studierenden die Möglichkeit, in eigenen Projekten selbst aktiv zu werden.

Zu jedem Versuch werden auf der Übersichtsseite die Reaktionsgleichung, der Reaktionstyp, die beteiligten Stoffklassen und die wichtigsten anzuwendenden Laborarbeitstechniken genannt. Einige Reaktionen können auf verschiedene Weise durchgeführt werden, z.B. in der klassischen Laborapparatur oder in der Labormikrowelle. Ist eine alternative Reaktionsführung ausgearbeitet, wird unter der Versuchsnummer darauf hingewiesen. Von dort führt eine Verknüpfung direkt zur korrespondierenden Versuchsvorschrift.

Die Seite Synthesevorschrift enthält bei den Versuchen des Lehrmoduls kommentierte Vorschriften für bis zu drei verschiedene Ansatzgrößen, typisch 10 und 100 mmol. Es wird die Durchführung der Reaktion, die Aufarbeitung, das Recycling von Stoffen, der Zeitbedarf,



Unterbrechungsmöglichkeiten und die Entsorgung angegeben. Kommentare erläutern eingesetzte Techniken und Chemikalien. Zu allen Versuchen wird die Synthesevorschrift für die verschiedenen Versuchsmaßstäbe mit allen analytischen Daten, zusätzlichen Anmerkungen, Entsorgungshinweisen und einer Liste benötigter Chemikalien als pdf Dokument angeboten. Ausgedruckt dient dieses Dokument als Arbeitsanleitung im Labor, wo oft kein Computer zur Verfügung steht.

Im Operationsschema, das für alle Laborexperimente verfügbar ist, wird der gesamte Arbeitsablauf mit allen Stoffflüssen dargestellt. Die Grafik bietet eine Orientierung für das Laborexperiment, kann aber auch genutzt werden, um Optimierungspotenziale, z.B. bei der Aufbereitung von Abfallstoffen oder Nebenprodukten, zu identifizieren.

Der Menüpunkt Stoffe wurde bereits ausführlich besprochen. Unter der Rubrik Geräte sind der Versuchsaufbau, sowie eine Liste aller benötigten Geräte, mit Abbildungen dargestellt. Die Photos sollen Laboranfängern, und insbesondere auch ausländischen Studierenden, den Umgang mit neuen Laborgeräten und ihren Bezeichnungen erleichtern. Unter dem Punkt Bewertung sind die wichtigsten Kennzahlen der Reaktion, wie Ausbeute, Atomökonomie, Stoffeffizienz und die Massen der eingesetzten Stoffe und der Produkte zusammengefasst.

Bei einem Teil der Versuche folgt ein Bewertungstext, der unter Abwägung verschiedener Kriterien, z.B. der Toxizität der auftretenden Stoffe, der Ausbeute, der Abfallmenge oder des Energieverbrauchs, versucht, zu einer Gesamteinschätzung zu kommen. Eine grobe Einstufung liefert bereits das Ampelsymbol: Die grüne Ampel steht für Versuche, deren Stoff- und Energieeffizienz, sowie der Einsatz von Gefahrstoffen, als besonders günstig bewertet wurden. Die gelbe Ampel zeigt an, dass der Versuch gewisse Risiken für Mensch und/oder Umwelt beinhaltet, und deshalb mit Bedacht durchgeführt werden sollte. Die rote Ampel weist auf problematische Aspekte in der Bewertung hin. Hier muss besonders vorsichtig vorgegangen werden und es besteht noch Verbesserungsbedarf. Zeigt das Ampelsymbol ein Fragezeichen, so ist der Versuch nach den Auswahlkriterien des NOP (z.B. es werden keine hochtoxischen, ökotoxischen oder persistenten Stoffe eingesetzt oder erhalten, Stoff- und Energieeffizienz ist optimierbar, relevanter Reaktionstyp) für Laborpraktika geeignet. Das Risiko für Mensch und Umwelt in diesem Versuch wurde bereits durch Recherche der Datenlage zu Chemikalieneigenschaften, Festlegung der Wirkfaktoren, Einstufung von Substanzen in der MAK-Liste oder in Wassergefährdungsklassen geprüft. Zu Substanzen, die nicht bereits in den Versuchen des Lehrmoduls auftreten, sollen weitere Kenndaten durch



Studierende selbst recherchiert werden. So kann geübt werden, das Gefährdungspotenzial einer Chemikalie selbst einzustufen. Alle Versuche, auch mit roter Ampel oder ohne vollständige Bewertung sind bei Beachtung der entsprechenden Sicherheitsmaßnahmen, ohne Einschränkung in der praktischen organisch-chemischen Ausbildung einsetzbar.

Der Menüpunkt Analytik gibt die chromatographische Analyse (GC oder HPLC) des Roh- und Reinproduktes mit den genauen Trennbedingungen an. Zur spektroskopischen Identifizierung sind das Protonen- und das  $^{13}\text{C}$ -Kernresonanzspektrum, sowie das Infrarotspektrum von Roh- und Reinprodukt mit Zuordnung angegeben. Die Spektren der Versuche des Lehrmoduls sind auch als interaktive Spektren mit frei drehbarem Molekülmodell verfügbar. Der Punkt Betriebsanweisung teilt sich auf in Hinweise für eine allgemeine Betriebsanweisung für die Versuchsräume und die versuchsbezogene Betriebsanweisung nach Paragraph 20 der Gefahrstoffverordnung als pdf Dokument.

*update 26. November 2012*