

**Beitrag zur Implementierung des Leitbildes  
„Nachhaltige Entwicklung“ in die Chemieausbildung.**

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt dem Rat der Chemisch-Geowissenschaftlichen Fakultät  
der Friedrich-Schiller-Universität Jena

von

Dipl.-Ing. (FH) Achim Diehlmann  
geboren am 26. März 1972 in Kandel/Pfalz

Gutachter:

1. ....

2. ....

Tag der öffentlichen Verteidigung: .....

**Auch ein langer Weg hat irgendwo seinen Anfang**



Für meine Frau Nicole und meine Tochter Luca Elisabeth



## **Danksagung**

Zum Gelingen dieser Arbeit haben viele Menschen beigetragen, denen ich auf diesem Wege meinen Dank ausdrücken möchte. Herrn Prof. Dr. habil. Günter Kreisel danke ich für seinen unermüdlichen Einsatz, der meine Zulassung zur Promotion als Absolvent einer Fachhochschule erst ermöglicht hat. Weiterhin möchte ich ihm für seinen Rat bei der Erstellung dieser und anderer Arbeiten sowie für interessante Diskussionen und Anregungen danken. Ich werde ihn als angenehm unkonventionellen Chef und Mentor stets in guter Erinnerung behalten. Herrn Prof. Dr. habil. Bernd Ondruschka möchte ich für die Erstellung des Zweitgutachtens und für Hilfestellungen bei einigen kniffligen chemischen Fragen danken. Für die Hilfe bei präparativen Laborexperimenten und Messreihen gilt mein Dank Frau Renate Grunert (der gute Geist des Labors), Frau Marina Sammler und Herrn Ronald Trotzki. Ebenfalls zu Dank verpflichtet bin ich den Menschen, die diese Arbeit hinsichtlich Inhalt und Form, ganz oder in Teilen, Korrektur gelesen haben. Namentlich waren dies Frau Susann Meyer, Frau Dana Kralisch, Herr Dr. Jan Lifka, Herr Dr. Gabriel Striegel und Herr Jörg Hartmann. Ich hoffe, euch waren die Ausführungen nicht zu trocken.





# Inhaltsverzeichnis

Danksagung .....	VII
Inhaltsverzeichnis .....	IX
Zusammenfassung .....	XIII
Abbildungsverzeichnis .....	XVII
Tabellenverzeichnis.....	XIX
Glossar.....	XXI
1. Einleitung .....	1
1.1. Historie der Nachhaltigkeit.....	2
1.1.1. Die ökonomischen Regeln der Enquete-Kommission .....	5
1.1.2. Die ökologischen Regeln der Enquete-Kommission.....	6
1.1.3. Die sozialen Regeln der Enquete-Kommission .....	7
1.2. Nachhaltigkeitsbestrebungen in der Gegenwart .....	8
1.3. Nachhaltigkeit in der Chemie .....	9
1.3.1. Die Sichtweise von Verbänden und Unternehmen der Chemieindustrie .....	10
1.3.2. Nachhaltigkeit in der chemischen Ausbildung .....	11
1.4. Ungelöste Probleme in der nachhaltigen Entwicklung .....	14
1.4.1. Wahl der Kriterien zur Beurteilung der nachhaltigen Entwicklung.....	14
1.4.2. Fehlende Indikatoren der nachhaltigen Entwicklung .....	16
1.4.3. Divergenzen der Bedürfnisse .....	17
1.4.4. Kommunikation der Ergebnisse .....	19
2. Ziele und Vorgehensweise.....	22
3. Untersuchungsaufbau und Durchführung .....	23
3.1. Die Methode der Ökobilanz .....	25
3.1.1. Besonderheiten der Bilanzierung von Laborreaktionen.....	27
3.1.2. Bilanzauswertung im drei Ebenen Modell .....	28
3.2. Acetalisierung von Benzaldehyd mit Ethylenglykol.....	30
3.2.1. Klassische Methode der Energiezufuhr - Heizpilz, Ölbad.....	31
3.2.2. Nichtklassische Methode der Energiezufuhr - Mikrowelle .....	32
3.2.3. Sachbilanzen Acetalisierung .....	34
3.2.3.1. Stoff- und Energieströme - Reaktionsebene .....	34

3.2.3.2.	Stoff- und Energieströme - Aufarbeitungsebene .....	35
3.2.3.3.	Stoff- und Energieströme - ganzheitliche Betrachtung .....	35
3.3.	Nitrierung aromatischer Systeme .....	40
3.3.1.	Nitrierung Benzaldehyd - Ebene Reaktion und Aufarbeitung .....	41
3.3.2.	Nitrierung Toluol - Ebene Reaktion und Aufarbeitung .....	42
3.3.3.	Nitrierung Phenol - Ebene Reaktion und Aufarbeitung .....	43
3.3.4.	Nitrierung Aromaten - Ebene ganzheitliche Bilanzierung .....	45
3.4.	Schwachstellenanalyse .....	50
3.4.1.	Schwachstelle Energieverbrauch .....	50
3.4.1.1.	Acetalisierung - Reaktion und Aufarbeitung .....	51
3.4.1.2.	Acetalisierung - ganzheitliche Betrachtung .....	56
3.4.1.3.	Nitrierung von Aromaten - Reaktion und Aufarbeitung .....	57
3.4.1.4.	Nitrierung von Aromaten - ganzheitliche Betrachtung .....	60
3.4.2.	Schwachstelle Ressourcenverbrauch.....	62
3.4.2.1.	Acetalisierung - Reaktion und Aufarbeitung .....	63
3.4.2.2.	Acetalisierung - ganzheitliche Betrachtung .....	64
3.4.3.	Schwachstelle Umweltwirkung der verwendeten Stoffe .....	65
3.4.3.1.	Edukte .....	65
3.4.3.2.	Lösungsmittel.....	66
3.5.	Identifizierte Schwachstellen - Zusammenfassung .....	67
3.6.	Umweltkennzahlen.....	69
3.6.1.	Was sind Umweltkennzahlen.....	69
3.6.2.	Kennzahlen Stoffstrom .....	71
3.6.2.1.	Ausbeute .....	71
3.6.2.2.	Selektivität .....	71
3.6.2.3.	Atomökonomie .....	72
3.6.2.4.	Stoffeffizienz.....	73
3.6.2.5.	Stofflicher Aufarbeitungsaufwand ( $A_S$ ).....	73
3.6.3.	Transformierte Kennzahlen Energie/Stoffstrom .....	74
3.6.3.1.	Energieinduzierte Methanäquivalente .....	74
3.6.3.2.	CO <sub>2</sub> -Äquivalente .....	75
3.6.4.	Kennzahlen Energie.....	75
3.6.4.1.	Energieeffizienzfaktor $K_E$ .....	75
3.6.4.2.	Energieproduktivität ( $P_E$ ) .....	80

3.6.4.3.	Energetischer Aufarbeitungsaufwand ( $A_E$ ) .....	80
3.6.4.4.	Verhältnis Reaktion/Aufarbeitung .....	81
3.6.5.	Berechnete Kennzahlen für den Versuch „Acetalisierung“ .....	81
3.6.6.	Auswertung der Kennzahlen zur Entscheidungsfindung .....	82
3.6.6.1.	Ressourcenverbrauch.....	82
3.6.6.2.	Energieverbrauch .....	84
3.6.7.	Probleme der Entscheidungsfindung durch Kennzahlen.....	85
4.	Optimierungspotenziale von Laborreaktionen - Sustainable Synthesis Optimisation Rules .....	86
4.1.	Sustainable Synthesis Optimisation Rules - Minimierung des Energieverbrauchs .....	86
4.2.	Sustainable Synthesis Optimisation Rules - Minimierung Ressourcen- und Energieverbrauch.....	89
4.3.	Sustainable Synthesis Optimisation Rules - Minimierung Toxizitätspotenziale .....	90
4.4.	Sustainable Synthesis Optimisation Rules - Berücksichtigung der Vorketten .....	91
5.	NOP - Ein Prototyp für die Internetpräsentation.....	92
5.1.	Einstiegsseite .....	93
5.2.	Aufbau und Inhalt der unterschiedlichen Seiten.....	94
5.3.	Besonderheiten der Präsentation .....	96
6.	Diskussion der Ergebnisse .....	98
7.	Literatur .....	102
A.	Anhang .....	A-1
A.1.	Arbeitsvorschriften säurekatalysierte Acetalisierung .....	A-1
A.1.1.	Klassische Umsetzung .....	A-1
A.1.2.	Mikrowellen unterstützte Umsetzung .....	A-2
A.2.	Arbeitsvorschriften Aromatennitrierung .....	A-3
A.2.1.	Arbeitsvorschrift - Nitrierung von Benzaldehyd .....	A-3
A.2.2.	Arbeitsvorschrift - Nitrierung Toluol .....	A-4
A.2.3.	Arbeitsvorschrift - Nitrierung Phenol.....	A-5
A.3.	Stoffstromnetze .....	A-6

A.3.1.	Legende der Stoffstromnetze .....	A-6
A.3.2.	Stoffstromsubnetze - säurekatalysierte Acetalisierung .....	A-7
A.3.3.	Stoffstromsubnetze - Nitrierung von Benzaldehyd .....	A-11
A.3.4.	Stoffstromsubnetze - Nitrierung von Phenol .....	A-13
A.3.5.	Stoffstromsubnetze - Nitrierung von Toluol.....	A-15
A.4.	Daten Sachbilanz Acetalisierung von 3-Nitrobenzaldehyd .....	A-17
A.4.1.	Input Materialien .....	A-17
A.4.2.	Output Materialien.....	A-23
A.5.	Daten Sachbilanz Nitrierung von Aromaten.....	A-36
A.5.1.	Input Materialien .....	A-36
A.5.2.	Output Materialien.....	A-43
A.6.	Berechnung des Energieverlustes der Apparaturen .....	A-57
A.6.1.	Berechnung der abstrahlenden Fläche der Apparaturen.....	A-57
A.6.1.1.	Heizpilz.....	A-57
A.6.1.2.	Reaktionskolben .....	A-57
A.6.1.3.	Wasserabscheider .....	A-58
A.6.1.4.	Kühler .....	A-59
A.6.1.5.	Heizplatte und Ölbad .....	A-59
A.6.2.	Energieverluste der Apparatur „Ölbad“ .....	A-60
A.6.3.	Energieverluste der Apparatur „Heizpilz“ .....	A-61
A.6.4.	Energieverluste durch Kühlwasser .....	A-62
A.6.5.	Energiebilanz - Acetalisierung Heizpilz: .....	A-62
A.7.	Verbrauchstabellen Vakuumerzeugung .....	A-63
A.7.1.	Vakuumpumpen - Energieverbrauchstabellen .....	A-63
A.7.1.1.	Vacuubrand Modell „MZ 2C/1,7“ .....	A-64
A.7.1.2.	Ölpumpe Leybold/Heraeus Modell “trivac D2A”.....	A-65
A.7.1.3.	Vacuubrand Pumpstand Modell "CVC 2000" .....	A-66
A.7.2.	Wasserstrahlpumpen - Wasserverbrauch.....	A-67

## Zusammenfassung

Auf der Konferenz der Vereinten Nationen für Umwelt und Entwicklung (UNCED) 1992 in Rio de Janeiro wurde die Agenda 21 von 170 Nationen verabschiedet. Als weltweit wichtigstes Entwicklungsziel wurde „Sustainable Development“ in die Liste der gemeinsamen Ziele aufgenommen. Um dieses Ziel der nachhaltigen Entwicklung zu erreichen, müssen mitunter tief greifende Reformen auch in den Köpfen durchgeführt werden. Diese Reformen sind sowohl auf der ökonomischen, der ökologischen als auch der sozialen Ebene einzuleiten. Dabei kommt Leitfiguren in der Gesellschaft, besonders heutigen und künftigen Wissenschaftlern der verschiedenen Fachbereiche, eine besondere Bedeutung zu. Sie müssen die notwendige Entwicklungsarbeit dazu leisten. Wissenschaftler sind jedoch oft in ihrem Wissen nur eindimensional auf ihre eigene Fachdisziplin fixiert und können erfolgreiche Verbesserungen nur dort vornehmen. Vor diesem Hintergrund sollten Naturwissenschaftler ihre Anstrengungen vor allem auf die Optimierung des ökologischen Teils der Nachhaltigkeit fokussieren. Insbesondere die Chemiker sind hier aufgrund ihrer fachspezifischen Möglichkeiten in der Verantwortung. Ihr Ziel sollte es sein, den Ressourcen- und Energieverbrauch von Produkten und Prozessen zu senken und die mit der Produktion einhergehenden Umweltlasten zu minimieren.

Viele der heute betriebenen großindustriellen Verfahren haben genau in diesen Bereichen ihre Schwachstellen. Diese Schwachpunkte wiederum haften in veränderter Form bereits bei den zur Prozessentwicklung notwendigen Laborreaktionen an. Um den wissenschaftlichen Nachwuchs schon während der Ausbildung mit dieser Problematik vertraut zu machen, wurden in dieser Arbeit organisch-chemische Laborexperimente auf allgemeingültige Schwachstellen im Ressourcen- und Energieverbrauch hin untersucht. Dabei wurden vor allem Problembereiche überprüft, die im obigen Sinne außerhalb der klassischen, stark reaktionsbezogenen chemischen Denkweise liegen. Dies bedeutet, dass nicht nur die chemische Reaktion, sondern viel mehr auch vor- und nachgelagerte Prozesse, verwendete Hilfsstoffe sowie benötigte Geräte und Apparaturen bei der durchgeführten Untersuchung berücksichtigt wurden.

Es konnten mit dieser Vorgehensweise z.B die mangelnde Isolierung der Versuchsanordnung, ein schlecht gewähltes Oberfläche/Volumen-Verhältnis sowie nicht ausreichende Berücksichtigung der physikalisch-chemischen Eigenschaften von Auxiliaren als Hauptursache für einen hohen Energieverbrauch von Laborreaktionen identifiziert werden. Im Bereich des Ressourcenverbrauchs konnten vor allem die nicht bedarfsgerecht eingesetzten Hilfsstoffmengen als Schwachstelle ausgemacht werden. In der vorliegenden Arbeit wurden die untersuchten Reaktionen auch in einer ganzheitlichen Sichtweise betrachtet. Dabei stellte sich heraus, dass die Vorketten (vorgelagerte Prozesse) einen wesentlichen Anteil am Gesamtressourcen- und Energieverbrauch einnehmen. Der Reduktion des Hilfsstoffeinsatzes und des Energieverbrauchs der Reaktion muss daher ein hoher Stellenwert beigemessen werden. Ebenfalls konnte in der Arbeit gezeigt werden, dass der Aufarbeitung der Rohprodukte künftig eine weitaus höhere Bedeutung zukommen muss, als dies bisher der Fall ist.

Im Anschluss an die Schwachstellenanalyse wurden allgemeine Sustainable Synthesis Optimisation Rules (SUSOR) entwickelt, deren Anwendung einen großen Beitrag zum ganzheitlichen Denken und damit zur Reduktion der durch die Synthese hervorgerufenen Umweltlasten leisten kann.

Um beliebige Reaktionen auf die Größe der in dieser Arbeit identifizierten Schwachstellen hin zu überprüfen, wurde weiterhin ein Kennzahlensystem diskutiert und erstellt.

Über einen festgelegten Algorithmus können die Schwachstellen der Reaktionen in ihrer Größe bestimmt und wenn nötig optimiert werden. Weitere Entwicklungsarbeit muss bei der Berücksichtigung der den Reaktionen vor- und nachgelagerten Prozessketten geleistet werden. Hier erschwert ungenügend verfügbares Datenmaterial bisher die Einbeziehung in ein Kennzahlensystem.

Die in dieser Dissertationsschrift entwickelten Inhalte sind Teil der zur Erstellung des von der Deutschen Bundesstiftung Umwelt geförderten Projekts „nachhaltiges organisches Praktikum (NOP)“ notwendigen Untersuchungen.

Dieses Praktikum soll erstmalig die oben genannten Ziele in der (Chemie-)Lehre verwirklichen. Dazu ist es notwendig, auch bei der Form des Praktikums neue Wege zu gehen. Aus diesem Grund werden die Inhalte nicht in einer Papierversion gedruckt, sondern als Internetpräsentation gestaltet. Damit die Inhalte aus Sicht des Verfassers im Netz auch optimal präsentiert werden, wurde zusätzlich zu den Untersuchungen zur Nachhaltigkeit bei Laborreaktionen ein Prototyp für die Internetpräsentation erstellt.





## Abbildungsverzeichnis

Abb. 1: Mögliche Zustände der Umweltauswirkungen von Reaktionen (schematisch) .....	13
Abb. 2: Bestandteile der Nomenklatur der Nachhaltigkeit .....	21
Abb. 3: Idealtypischer Abbildungsraum einer Ökobilanz .....	26
Abb. 4: Darstellungsebenen der Untersuchungsergebnisse .....	29
Abb. 5: Reaktionsschema - säurekatalysierte Acetalisierung .....	30
Abb. 6: Aufbau Apparatur - Heizpilz .....	31
Abb. 7: Aufbau Apparatur - Ölbad .....	31
Abb. 8: Aufbau Apparatur - Mikrowelle .....	33
Abb. 9: Untersuchungsraum ganzheitliche Betrachtung „Acetalisierung“ .....	36
Abb. 10: Stoffstromnetz Acetalisierung - Heizmedium Heizpilz oder Ölbad .....	37
Abb. 11: Stoffstromnetz Acetalisierung - Energiezufuhr mit der Mikrowelle .....	38
Abb. 12: Reaktionsschema - Nitrierung von Benzaldehyd .....	41
Abb. 13: Reaktionsschema - Nitrierung von Toluol.....	42
Abb. 14: Reaktionsschema - Nitrierung von Phenol .....	43
Abb. 15: Stoffstromnetz Nitrierung von Benzaldehyd .....	46
Abb. 16: Stoffstromnetz Nitrierung von Toluol .....	47
Abb. 17: Stoffstromnetz - Nitrierung von Phenol .....	48
Abb. 18: Energieverbrauch Reaktion/Aufarbeitung -Acetalisierung .....	51
Abb. 19: Infrarotaufnahme - säurekatalysierte Acetalisierung - Apparatur Ölbad.....	52
Abb. 20: Infrarotaufnahme - säurekatalysierte Acetalisierung - Apparatur Heizpilz .....	52
Abb. 21: Lösungsmiteleinfluss auf den theoretischen Energieverbrauch von Synthesen.....	54
Abb. 22: Parameter mit Einfluss auf den Energieverbrauch von Laborsynthesen.....	55
Abb. 23: Kumulierter Energieaufwand - säurekatalysierte Acetalisierung .....	56
Abb. 24: Energieverbrauch Nitrierung von Aromaten - Ebene Reaktion und Aufarbeitung .....	58
Abb. 25: Energieverbrauch Nitrierung von Aromaten - Aufarbeitung .....	59

Abb. 26: Energieverbrauch Nitrierung von Aromaten - ganzheitliche Betrachtung .....	61
Abb. 27: Verbrauch Primärenergieträger - säurekatalysierte Acetalisierung .....	64
Abb. 28: „Solvent Selection Guide“ .....	67
Abb. 29: Differenzierungsmatrix der Umweltkennzahlen .....	70
Abb. 30: Flussdiagramm - Optimierung mit Hilfe von Umweltkennzahlen (Ressourcen) .....	83
Abb. 31: Flussdiagramm - Optimierung mit Hilfe von Umweltkennzahlen (Energie) .....	84
Abb. 32: Einstiegsseite - Vorschlag Präsentation des Praktikums im Internet.....	93
Abb. 33: Hierarchieebene 1 (Einstiegsseite) - Vorschlag Internetpräsentation .....	94
Abb. 34: Hierarchieebene 1 (Inhalt) - Vorschlag Internetpräsentation .....	95
Abb. 35: Hierarchieebene 2 (Inhalt) - Vorschlag Internetpräsentation .....	96
Anhang:	
Abbildung 1: Skizze Heizpilz .....	57
Abbildung 2: Skizze Reaktionskolben.....	57
Abbildung 3: Skizze Wasserabscheider .....	58
Abbildung 4: Skizze Kühler .....	59
Abbildung 5: Aufbau zur Messung des Energieverbrauchs von Vakuumpumpen.....	63
Abbildung 6: Aufbau zur Messung des Wasserverbrauchs von Wasserstrahlpumpen.....	67

## Tabellenverzeichnis

Tab. 1: Kriterien zur Beurteilung der nachhaltigen Entwicklung .....	15
Tab. 2: Stoff- und Energiebilanz - Reaktionsebene Input .....	34
Tab. 3: Stoff- und Energiebilanz - Reaktionsebene Output.....	34
Tab. 4: Stoff- und Energiebilanz - Aufarbeitung Input .....	35
Tab. 5: Stoff- und Energiebilanz - Aufarbeitung Output .....	35
Tab. 6: Säurekatalysierte Acetalisierung - Kumulierter Energieaufwand KEA.....	39
Tab. 7: Säurekatalysierte Acetalisierung - Verbrauch Energieträger .....	39
Tab. 8: Nitrierung von Benzaldehyd - Reaktion.....	41
Tab. 9: Nitrierung von Benzaldehyd - Aufarbeitung .....	42
Tab. 10: Nitrierung von Toluol - Reaktion.....	43
Tab. 11: Nitrierung von Toluol - Aufarbeitung .....	43
Tab. 12: Nitrierung von Phenol - Reaktion.....	44
Tab. 13: Nitrierung von Phenol - Aufarbeitung .....	44
Tab. 14: Kumulierter Energieaufwand (KEA) Nitrierung von Aromaten - Gesamt .....	49
Tab. 15: Kumulierter Energieaufwand (KEA) Syntheseabschnitte - Nitrierung Aromaten .....	49
Tab. 16: Verbrauch Primärenergieträger Nitrierung Aromaten - gesamt .....	50
Tab. 17: Nitrierung von Aromaten – Verfahrensschritte der Aufarbeitung .....	58
Tab. 18: Beiträge zum Gesamtenergieverbrauch - Vakuumdestillation (VD2)..	60
Tab. 19: Berechnete Kennzahlen - säurekatalysierte Acetalisierung .....	81
Anhang:	
Tabelle 1: Energieverbrauch Vakuumpumpe Vacuubrand MZ 2C/1,7 .....	A-64
Tabelle 2: Energieverbrauch Vakuumpumpe Leybold/Heraeus trivac D2A... A-65	
Tabelle 3: Energieverbrauch Vakuumpumpe Vacuubrand CVC 2000 .....	A-66
Tabelle 4: Wasserverbrauch Wasserstrahlpumpen.....	A-67



## Glossar

Da in dieser Arbeit Fachbegriffe aus unterschiedlichen Bereichen verwendet werden, wird zur Unterstützung des Lesers ein auf Striegel (2000) basierendes und um die in dieser Arbeit verwendeten Begriffe erweitertes Glossar vorangestellt.

- **Abschneidekriterien** → **A.** legen methodisch fest, an welchen Stellen der definierte Bilanzraum eines Stoff- oder Energiestroms abgebrochen wird.
- **Allokation** → Zuordnung der Input- und Outputflüsse eines Prozesses auf das untersuchte Produkt- oder Dienstleistungssystem.
- **Apparatur** → siehe Versuchsanordnung.
- **Auswertung** → Phase der Ökobilanz, bei der die Ergebnisse der Sachbilanz oder der Wirkungsabschätzung oder beide mit dem festgelegten Ziel und Untersuchungsrahmen zusammengeführt werden.
- **Auxiliarien** → siehe Hilfsstoffe.
- **Bilanzraum** → Der **B.** grenzt den Untersuchungsumfang in sachlicher, zeitlicher und räumlicher Hinsicht ein.
- **Energieverlust** → Unerwünschte Energieabgabe eines Systems durch Wärmeleitung oder Wärmestrahlung an das umgebende Medium.
- **Erneuerbare Ressourcen** → **E.R.** sind natürliche Ressourcen, die in signifikantem Maße erneuert werden können, wobei die Erneuerungsrate und der aktuelle und zukünftige Verbrauch ausgeglichen sind.
- **Funktionelle Einheit** → **F.E.** ist das Maß für die Quantifizierung des Nutzens der zu untersuchenden Systeme.
- **Ganzheitliche Betrachtung** → Lebenswegbetrachtung unter Berücksichtigung vor- und nachgelagerter Prozesse (In dieser Arbeit wurden nachgelagerte Prozesse, z.B. Entsorgung, nicht berücksichtigt).

- **Hilfsstoffe** → (Auxiliarien) Alle in der Reaktion und Aufarbeitung eingesetzten Stoffe (z.B. Neutralisationsmittel, Trockenmittel), die nicht Bestandteil der in der Reaktion generierten Produkte sind. In dieser Arbeit wurden auch Lösungsmittel, Kühlwasser und Eis zur Gruppe der Hilfsstoffe gezählt.
- **Humantoxizität** → Wirkungskategorie zur Beurteilung des Schadpotenzials von Stoffen im menschlichen Körper.
- **Input** → Stoff oder Energie, der bzw. die einem Prozess zugeführt wird. Stoffe können Ausgangsmaterialien oder Produkte einbeziehen.
- **Laborreaktion** → Chemische Reaktion im Labormaßstab (Ansatzgröße 1 mol) inklusive der Aufarbeitung der anfallenden Rohprodukte.
- **Lebensweg** → Aufeinanderfolgende und miteinander verbundene Stufen eines Produkt- oder Dienstleistungssystems von der Rohstoffgewinnung oder Gewinnung natürlicher Ressourcen bis zur endgültigen Beseitigung.
- **Ökobilanz** → Zusammenstellung und Bewertung der Input- und Outputflüsse eines Produktsystems im Verlaufe seines Lebensweges (siehe Lebensweg) und der mit ihnen verbundenen potenziellen Umweltauswirkungen.
- **Ökotoxizität** → Wirkungskategorie zur Beurteilung des Schadpotenzials von Stoffen in Ökosystemen. Wesentliche Untersuchungsparameter sind die Beständigkeit in der Umwelt (Persistenz) sowie die Anreicherungen in der Nahrungskette (Bioakkumulation) und in abiotischen Segmenten.
- **Output** → Stoff oder Energie, der bzw. die von einem Prozess abgegeben wird. Stoffe können Ausgangsmaterialien, Produkte, Emissionen und Abfall einschließen.
- **Produktsystem** → Zusammenfassung der durch Material- und Energieflüsse verbundenen Prozesse, die eine oder mehrere festgelegte Funktionen erfüllen.

- **Prozess** → Ein **P.** ist der kleinste Teil eines Untersuchungssystems, für den zur Erstellung einer Ökobilanz Daten gesammelt werden.
- **Ressourcenverbrauch** → Reduktion des globalen Bestandes an Rohstoffen, resultierend aus der Entnahme nicht erneuerbarer Ressourcen oder der Entnahme erneuerbarer Ressourcen in höherem Maße als diese nachwachsen.
- **Sachbilanz** → Phase der Ökobilanz, die die Zusammenstellung und Quantifizierung der Inputs und Outputs eines gegebenen Produkt- oder Dienstleistungssystems im gesamten Untersuchungsraum umfasst.
- **Standardlaboroperation** → Spezifischer Bearbeitungsschritt bei Reaktion und Aufarbeitung.
- **Systemgrenze** → Schnittstelle zwischen einem Produktsystem und seiner Umwelt oder anderen Produktsystemen.
- **Umwelt(aus)wirkungen** → Klassen von Umweltbelastungen, die zu einem bestimmten Umweltproblemfeld beitragen.
- **Umweltbelastung** → (Umweltlast) Negative Beeinflussung der Umwelt im weitesten Sinne, z.B. Auswirkungen auf die menschliche Gesundheit, das ökologische Gleichgewicht von Flora und Fauna oder die zukünftige Verfügbarkeit natürlicher Ressourcen.
- **Verfahren** → Ein bestimmter Ablauf von chemischen, physikalischen oder biologischen Vorgängen zur Gewinnung, Herstellung oder Beseitigung von Stoffen oder Produkten (nach DIN 28 004).
- **Versuchsordnung** → Zusammenstellung von Laborgeräten zur Durchführung einer chemischen Reaktion oder der Aufarbeitung der aus dieser Reaktion hervorgegangenen Rohprodukte.
- **Wirkungsabschätzung** → Phase der Ökobilanz, die dem Erkennen und der Beurteilung der Größe und Bedeutung von potenziellen Umweltauswirkungen eines Systems dient.





# 1. Einleitung

Negative Umweltauswirkungen als Ergebnis menschlichen Wirkens sind schon lange Zeit bekannt. Erste schriftliche Hinweise darauf lassen sich in den Sagen und Mythen des antiken Griechenlands finden. Dort spielen anthropogen verursachte Naturveränderungen eine große Rolle (Binswanger, 1998). Weitere Belege von Umweltzerstörung gibt es aus dem antiken Rom, beispielsweise durch den starken Holzeinschlag (Held, 2000) oder durch verschiedene Verbrennungsprozesse im Bereich größerer Städte (Vögler, 2000). So klagte z.B. Plinius d. Ä. über die schlechte Luft in Rom und schrieb: „Sobald ich die schwere Luft von Rom verlassen hatte und den Gestank der qualmenden Kamine, die bei Betrieb alle möglichen Dämpfe und Ruß ausstoßen, verspürte ich einen Wandel meines Befindens“ (Stern *et al.*, 1984). In Mitteleuropa waren Umweltschäden, hervorgerufen durch Metallverhüttung, Salzsiederei und Schiffsbau ebenfalls schon lange bekannt. Um diese Schäden zu vermindern, kamen bereits ab Mitte des 16. Jhd. in Böhmen und Sachsen erste Rauchgasreinigungen zum Einsatz. Der Beginn der Industrialisierung bedeutete nicht nur hinsichtlich der sozialen und wirtschaftlichen Aspekte eine neue Epoche, sondern gab auch den bis dahin bekannten Umweltschäden eine neue Dimension. Waren bis zu diesem Zeitpunkt meist nur lokale Umweltschäden zu beklagen, traten Umweltwirkungen nun oft großflächiger auf. Ließen sich Schäden vorher direkt auf eine am Ort befindliche Quelle zurückführen, traten diese bald, durch den Wind verfrachtet, weit entfernt von den Quellen der Umweltschadstoffe auf (Elsom, 1992). Auch die Art der Schädigung änderte sich. Wo vorher hauptsächlich die Abgase aus der Verbrennung von Holz und Kohle sowie einige wenige aus Verhüttung und Glasschmelze stammende Stoffe auf die Umwelt einwirkten, kamen nun zusätzlich neue organische Chemikalien mit oft hochtoxischen Eigenschaften hinzu. Neben der Qualität der Umweltschadstoffe stieg ebenfalls die Quantität der Schadstoffe aus der industriellen Produktion deutlich an. Erste Gesetze zur Reinhaltung der Luft waren die Folge. Diese wurden im weiteren zeitlichen Verlauf ausgebaut und um gesetzliche Regelungen für die Umweltkompartimente Boden und Wasser erweitert.

Die Produktion, die damit einhergehende Umweltbelastung sowie der Ressourcenverbrauch stiegen jedoch weiterhin stark an. Dies veranlasste 1972 den „Club of Rome“ in seinem Bericht zur Lage der Menschheit „Grenzen des Wachstums“ (Meadows *et al.*, 1973) auf die Problematik weiterer Produktionssteigerung hinzuweisen. Dieser Hinweis gilt als ein Grundstein des Leitbildes der „Nachhaltigen Entwicklung“ mit dem Ziel, den Bedürfnissen heutiger und künftiger Generationen gleichermaßen gerecht zu werden. Bevor jedoch auf dieses neue Leitbild „Nachhaltige Entwicklung“ eingegangen wird, soll zunächst geklärt werden, wo dieser Begriff seinen Ursprung hat und was heute allgemein darunter verstanden wird.

## **1.1. Historie der Nachhaltigkeit**

Der Gedanke der nachhaltigen Entwicklung, wie er heute allgemein verstanden wird, entspringt der Neuzeit, die Berücksichtigung der Belange künftiger Generationen jedoch ist sehr alt. Erste dokumentierte Hinweise darauf lassen sich bereits bei einem Indianerstamm Nordamerikas finden. Dort wurde in einem Ritus von den Häuptlingen der Irokesen verlangt, Entscheidungen auch unter Berücksichtigung der Konsequenzen für künftige Generationen zu fällen (Sachs, 2001; Mergelsberg, 2000). In Europa lässt sich der Gedanke des nachhaltigen Wirtschaftens vor allem auf die Forstwirtschaft zurückverfolgen (Bahadir *et al.*, 2000). Bereits aus dem 13. Jhd. gibt es erste Vorschriften, z.B. die Nürnberger Waldverordnung von 1294, die auf die nachhaltige Verwendung des Rohstoffes Holz hinweisen. Die Problematik des starken Holzeinschlages, ohne sich um die Wiederaufforstung zu bemühen, wurde erstmalig von Herrn Carlowitz, einem sächsischen Adligen, in seiner Schrift: „*Sylvicultura Oeconomica - Naturmäßige Anweisung zur Wilden Baum-Zucht (1713)*“ beschrieben (Hofmeister, 2001). Er führt aus, der Mensch müsse in dem „grossen Welt-Buche der Natur studiren“. Er müsse erforschen, wie „die Natur spielt“, und dann „mit ihr agiren“ und nicht wider sie, „immer-während“, „continuirlich“ und „perpetuirlich“. In seinem Buch plädiert Carlowitz für ein Bündel von Maßnahmen, darunter die Verbesserung der Wärmedämmung beim Hausbau und die Verwendung von energiesparenden Schmelzöfen.

Auch die planmäßige Aufforstung durch Säen und Pflanzen und nicht zuletzt die Suche nach „*Surrogata*“ für das Holz werden in dieser Arbeit genannt (Grober, 1999). Wohl auf den Grundlagen der Carlowitzschen Thesen formulierte 1795 Georg Ludwig Hartig in seiner Arbeit *„Anweisung zur Taxation und Beschreibung der Forste“*: *„(...) die Waldungen (...) zwar so hoch als möglich, doch so zu nutzen suchen, dass die Nachkommenschaft ebenso viel Vorteile daraus ziehen kann, als sich die jetzt lebende Generation zueignet“* (Greis, 1997; Krott, 2001). Die Idee der nachhaltigen Bewirtschaftung, einer Wirtschaftsform, die künftigen Generationen nicht die Lebensgrundlage entzieht, war geboren. Die Motivation einer solchen Vorgehensweise war allerdings wohl überwiegend wirtschaftlicher und sozialer Natur und bezog sich im Kern noch nicht auf den Schutz der Umwelt. Sie führte im Gegenteil sogar dazu, dass der Anteil des naturbelassenen „Urwaldes“ immer weiter zurückgedrängt wurde, um einheitlichen Monokulturen, oft schnell wachsendes Nadelholz, den Vorzug zu geben. Außerhalb der Forstwirtschaft kamen, auch im weiteren geschichtlichen Verlauf, die Ideen der nachhaltigen Wirtschaftsweise nicht zur Anwendung.

Zu Beginn der 80er Jahre wurde der Begriff der Nachhaltigkeit erstmalig in der Weltnaturschutzstrategie der International Union for the Conservation of Nature (IUCN) und des World Wide Fund for Nature (WWF) verwendet und meinte damit „ein System nur so zu nutzen, dass es in seinen wesentlichen Merkmalen erhalten bleibt“ (Umweltbundesamt, 1997). Die Idee, neben den ökonomischen und sozialen Aspekten auch ökologische Gesichtspunkte unter dem Stichwort „nachhaltige Entwicklung<sup>1</sup>“ zu vereinen und auf alle Bereiche des menschlichen Lebens und Wirtschaftens auszudehnen, wurde erstmalig 1987 von der „Weltkommission für Umwelt und Entwicklung“ formuliert. In deren, unter der Leitung der damaligen norwegischen Ministerpräsidentin Gro Harlem Brundtland veröffentlichten, Abschlussbericht „Our Common Future“, besser bekannt als der „Brundtland-Bericht“, heißt es:

---

<sup>1</sup> Die „Nachhaltige Entwicklung“ kann auch als anhaltende, dauerhafte, durchgreifende, intensive oder wirksame Entwicklung beschrieben werden (VCI, 1999).

„Unter dauerhafter Entwicklung verstehen wir eine Entwicklung, die den Bedürfnissen der heutigen Generation entspricht, ohne die Möglichkeiten künftiger Generationen zu gefährden, ihre eigenen Bedürfnisse zu befriedigen und ihren Lebensstil zu wählen. Die Forderung, diese Entwicklung „dauerhaft“ zu gestalten, gilt für alle Länder und Menschen. Die Möglichkeiten kommender Generationen, ihre eigenen Bedürfnisse zu befriedigen, ist durch Umweltzerstörung ebenso gefährdet wie durch Umweltvernichtung und durch Unterentwicklung in der Dritten Welt“ (Hauf, 1987).

In der Folge wurde diese Idee vielerorts aufgegriffen und verfeinert. Auf der Konferenz der Vereinten Nationen für Umwelt und Entwicklung (UNCED) 1992 in Rio de Janeiro wurde dann ein weiterer Meilenstein gesetzt. In der dort von 170 Nationen verabschiedeten Agenda 21 wurde „Sustainable Development“ als das wichtigste Entwicklungsziel aufgenommen (United Nations, 1992). Aufgrund ihres globalen Ansatzes bleibt die Agenda 21 in vielen Bereichen jedoch sehr vage und unklar. Sie beschreibt in den meisten Fällen lediglich, welche Ziele zu erreichen sind, lässt aber offen, wie dies geschehen soll. Wichtiger als der Wortlaut des Dokumentes selbst erscheint daher der „Geist“ der Agenda 21: „Nur eine globale Partnerschaft und Zusammenarbeit kann die Lösung der drängendsten ökologischen und sozialen Probleme dieses Planeten garantieren“ (Greis, 1997). In Deutschland wurden Vorschläge zur Umsetzung bzw. Ausgestaltung einer nachhaltigen Entwicklung erstmalig von der Enquete-Kommission „Schutz des Menschen und der Umwelt“ des 13. Deutschen Bundestages in ihrem Abschlussbericht „Konzept Nachhaltigkeit - Vom Leitbild zur Umsetzung“ vorgestellt (Deutscher Bundestag, 1998). Die Kommission, eingerichtet um „bei der Beantwortung der Frage nach einem gangbaren Weg in die Zukunft voranzukommen“ (Deutscher Bundestag, 1997), nennt als zentrales Ziel der nachhaltigen Entwicklung „die Sicherstellung und Verbesserung ökologischer, ökonomischer und sozialer Leistungsfähigkeiten“. Sie bezieht sich dabei auf das Säulenmodell der Nachhaltigkeit, in dem die Bereiche Ökologie, Ökonomie und Soziologie gleichberechtigt behandelt werden. In ihrem Bericht definierte die Kommission auch Handlungsanweisungen, mit deren Hilfe eine nachhaltige Entwicklung erreicht werden kann.

### **1.1.1. Die ökonomischen Regeln der Enquete-Kommission**

- ❖ Das ökonomische System soll individuelle und gesellschaftliche Bedürfnisse effizient befriedigen. Dafür ist die Wirtschaftsordnung so zu gestalten, dass sie die persönliche Initiative fördert (Eigenverantwortung) und das Eigeninteresse in den Dienst des Gemeinwohls stellt (Regelverantwortung), um das Wohlergehen der derzeitigen und künftigen Bevölkerung zu sichern. Es soll so organisiert werden, dass es auch gleichzeitig die übergeordneten Interessen wahrt.
- ❖ Preise müssen dauerhaft die wesentliche Lenkungsfunktion auf Märkten wahrnehmen. Sie sollen dazu weitestgehend die Knappheit der Ressourcen, Senken, Produktionsfaktoren, Güter und Dienstleistungen wiedergeben.
- ❖ Die Rahmenbedingungen des Wettbewerbs sind so zu gestalten, dass funktionsfähige Märkte entstehen und aufrecht erhalten bleiben, Innovationen angeregt werden, dass langfristige Orientierung sich lohnt und der gesellschaftliche Wandel, der zur Anpassung an zukünftige Erfordernisse nötig ist, gefördert wird.
- ❖ Die ökonomische Leistungsfähigkeit einer Gesellschaft und ihr Produktiv-, Sozial- und Humankapital müssen im Zeitablauf zumindest erhalten werden. Sie sollten nicht bloß quantitativ vermehrt, sondern vor allem auch qualitativ ständig verbessert werden.

### 1.1.2. Die ökologischen Regeln der Enquete-Kommission

- ❖ Die Abbaurate erneuerbarer Ressourcen soll deren Regenerationsrate nicht überschreiten. Dies entspricht der Forderung nach Aufrechterhaltung der ökologischen Leistungsfähigkeit, d.h. (mindestens) nach Erhaltung des von den Funktionen her definierten ökologischen Realkapitals.
- ❖ Nicht erneuerbare Ressourcen sollen nur in dem Umfang genutzt werden, in dem ein physisch oder funktionell gleichwertiger Ersatz in Form erneuerbarer Ressourcen oder höherer Produktivität der erneuerbaren sowie der nicht erneuerbaren Ressourcen geschaffen wird.
- ❖ Stoffeinträge in die Umwelt sollen sich an der Belastbarkeit der Umweltmedien orientieren.
- ❖ Das Zeitmaß anthropogener Einträge bzw. Eingriffe in die Umwelt muss im ausgewogenen Verhältnis zum Zeitmaß der für das Reaktionsvermögen der Umwelt relevanten natürlichen Prozesse stehen.
- ❖ Gefahren und unvermeidbare Risiken für die menschliche Gesundheit durch anthropogene Einwirkungen sind zu vermeiden.

### **1.1.3. Die sozialen Regeln der Enquete-Kommission**

- ❖ Der soziale Rechtsstaat soll die Menschenwürde und die freie Entfaltung der Persönlichkeit sowie Entfaltungschancen für heutige und zukünftige Generationen gewährleisten, um auf diese Weise den sozialen Frieden zu bewahren.
- ❖ Jedes Mitglied der Gesellschaft erhält Leistungen von der solidarischen Gesellschaft:
  - entsprechend geleisteter Beiträge für die sozialen Sicherungssysteme,
  - entsprechend Bedürftigkeit, wenn keine Ansprüche an die sozialen Sicherungssysteme bestehen.
- ❖ Jedes Mitglied der Gesellschaft muss entsprechend seiner Leistungsfähigkeit einen solidarischen Beitrag für die Gesellschaft leisten.
- ❖ Die sozialen Sicherungssysteme können nur in dem Umfang wachsen, wie sie auf ein gestiegenes wirtschaftliches Leistungspotenzial zurückgehen.
- ❖ Das in der Gesellschaft insgesamt und in den einzelnen Gliederungen vorhandene Leistungspotenzial soll für künftige Generationen zumindest erhalten werden.

(Deutscher Bundestag, 1998)

Mit den grundlegenden Regeln für ökonomisches, ökologisches und soziales Handeln will die Enquete-Kommission der Diskussion über Zukunftsfähigkeit neue Impulse geben. Innovation wird von der Kommission als Schlüssel für eine nachhaltige zukunftsverträgliche Entwicklung angesehen (VCI, 1999).

In dem vorgelegten Bericht werden zwar keine Angaben darüber gemacht, wie sich dieser Wandel von Wirtschaft und Gesellschaft vollziehen soll, bzw. welche einzelnen Stufen dazu notwendig sind (Braun, 1999), die wesentliche Aufgabe, das Leitbild der nachhaltigen Entwicklung auch in Deutschland ins Gespräch zu bringen, hat die Enquete-Kommission mit ihrem Bericht allerdings erreicht. Auf allen Ebenen - sowohl der wirtschaftlichen, der gesellschaftlichen als auch der politischen - wurde das neue Leitbild „nachhaltige Entwicklung“ größtenteils akzeptiert und an seiner weiteren Umsetzung gearbeitet.

## **1.2. Nachhaltigkeitsbestrebungen in der Gegenwart**

Im Juni 2001 trafen die Mitglieder der Europäischen Union in Göteborg zusammen, um über die weitere Zukunft Europas und notwendige politische Leitlinien zu beraten. Dabei wurde unter anderem folgender Beschluss gefasst:

„Nachhaltige Entwicklung, d.h. die Erfüllung der Bedürfnisse der derzeitigen Generation ohne dadurch die Erfüllung der Bedürfnisse künftiger Generationen zu beeinträchtigen, ist ein grundlegendes Ziel der Verträge. Hierzu ist es erforderlich, die Wirtschafts-, Sozial- und Umweltpolitik so zu gestalten, dass sie sich gegenseitig verstärken. Gelingt es nicht, Tendenzen umzukehren, die die künftige Lebensqualität bedrohen, so werden die Kosten für die Gesellschaft drastisch ansteigen oder diese Tendenzen werden unumkehrbar. Der Europäische Rat begrüßt die Vorlage der Mitteilung der Kommission über nachhaltige Entwicklung, in der wichtige Vorschläge enthalten sind, um diesen Tendenzen Einhalt zu gebieten“ (Europäischer Rat, 2001).

Die politischen Kräfte der Europäischen Union sind sich also darin einig, den Weg einer nachhaltigen Entwicklung gemeinsam zu gehen. Zusätzlich sollen die politischen Rahmenbedingungen zur Erreichung dieses Ziels verstärkt geschaffen werden. Die folgenden Jahre müssen nun zeigen, wie gut das Leitbild bezüglich der politischen Rahmenbedingungen umgesetzt werden kann.



Neben der rein politischen Ebene gibt es auch eine Vielzahl von Nicht-Regierungs-Organisationen (NGO), - Naturschutzverbände, Unternehmen oder deren Interessensvertretungen - die bestrebt sind, das Leitbild der nachhaltigen Entwicklung umzusetzen und weiter zu entwickeln. Nachfolgend sollen die Anstrengungen, vor allem im Umfeld der Chemie, weiter diskutiert werden.

### **1.3. Nachhaltigkeit in der Chemie**

Die chemische Industrie und ihre Produkte sind für das Konzept der nachhaltigen Entwicklung Chance und Gefahr zugleich. Durch die Kompetenz dieses Industriezweiges auf dem Gebiet der Stoffumwandlung können wichtige Teilbereiche bei der Entwicklung hin zu einer nachhaltigen Gesellschaft mitgestaltet werden. Ein Beispiel, das diesen Sachverhalt gut demonstriert, ist die Herstellung von Isoliermaterialien zur Gebäudedämmung. Die zur Herstellung dieser Materialien verbrauchte Energie kann oft schon nach einem Jahr durch verringerte Energieverluste eingespart werden (VKE, 2001), eine langfristige Reduktion des Energieverbrauchs aus der Gebäudeheizung wurde dadurch erst möglich gemacht. Auch die Entwicklung von Katalysatoren, z.B. im Kraftfahrzeugbereich, brachte große Reduktionen der Emissionslasten und damit eine Verbesserung der Umweltsituation vor allem in Ballungszentren.

Wie bereits erwähnt ist aber nicht nur der Nutzen chemischer Produkte groß, sondern auch die Gefahren, die mit der Herstellung dieser Stoffe einhergehen. So haben Unfälle wie in Seveso, Bophal und bei Sandoz ihre Spuren hinterlassen. Aber auch auf den ersten Blick weniger dramatische Auswirkungen, wie z.B. die ubiquitäre Verbreitung von POP (Persistent Organic Pollutants) und viele weitere aus der Produktion von Chemikalien resultierende Probleme haben ihren Ursprung in der chemischen Industrie. Wie dieser Industriezweig die Herausforderungen, die aus dem Leitbild der nachhaltigen Entwicklung hervorgehen, annimmt und welche Maßnahmen zur Umsetzung notwendig sind, soll in den folgenden Abschnitten geklärt werden.

### **1.3.1. Die Sichtweise von Verbänden und Unternehmen der Chemieindustrie**

Unfälle in Chemiebetrieben, wachsende Sensibilisierung der Bevölkerung und zunehmend verschärfte Gesetze zwangen Unternehmen und Verbände der chemischen Industrie weltweit, über ihre Aktivitäten nachzudenken. Im Rahmen der Ende der 80er Jahre entwickelten und von der chemischen Industrie weltweit getragenen Initiative „Responsible Care“ (CMA, 1998) kam es zu einer Selbstverpflichtung, die Leistungen für Sicherheit, Gesundheit und Umweltschutz in Eigenverantwortung und unabhängig von gesetzlichen Vorgaben zu optimieren. In den vergangenen Jahren konnten auf der Grundlage dieser Initiative deutliche Verbesserungen auch im Bereich des Umweltschutzes erreicht werden. So wurden zum Beispiel die Emissionen von klimawirksamen Gasen durch die Nutzung der Kraft-Wärmekopplung in der chemischen Industrie deutlich gesenkt (VCI, 2001). Trotz des Erreichten gilt es noch immer sehr viel zu leisten, gehen die Forderungen des Leitbildes „Sustainable Development“ doch immer noch weit über die in der Initiative „Responsible Care“ geforderten Maßnahmen hinaus. Die internationalen und nationalen Chemieverbände (CCA, 2002; CEFIC, 2000; VCI, 1999) und eine Vielzahl der darin zusammengeschlossenen Unternehmen nehmen diese Herausforderung an und erkennen die Prinzipien der nachhaltigen Entwicklung an (Bayer AG, 2001; Schering AG, 2000; BASF AG, 2000). Sie sind bereit, ihren Beitrag für eine tragfähige Zukunftsentwicklung zu leisten, fordern allerdings vom Gesetzgeber Rahmenbedingungen zu schaffen, die den Unternehmen eine Arbeit im Sinne des „Sustainable Development“ erlaubt. Diese Forderung bezieht sich nicht nur auf die nationale Ebene, sondern auf die Bedingungen weltweit (VCI, 1999). Weit über 100 global operierende Unternehmen haben sich des Weiteren dem [World Business Council of Sustainable Development](#) (WBCSD) angeschlossen. Das WBCSD versucht mittels unterschiedlicher Projekte, beispielsweise im Bereich Ökoeffizienz oder nachwachsende Rohstoffe (WBCSD, 2002), neue Konzepte und Ansatzpunkte für eine nachhaltige Entwicklung von Industrieunternehmen auszuarbeiten.

Zusätzlich bietet das Council auf seiner Homepage einen online-Kurs ([Virtual University](#)) für nachhaltige Entwicklung an. Darin wird versucht, das für Hochschulabgänger und Mitarbeiter der beteiligten Unternehmen notwendige Grundwissen über das Leitbild des „Sustainable Development“ zu vermitteln. Wie wichtig es ist, junge Menschen bereits während ihrer Ausbildung mit den Prinzipien der Nachhaltigkeit und den dazu notwendigen und sinnvollen Schritten vertraut zu machen, lässt sich aus dieser Vorgehensweise erahnen. Nachfolgend soll auf diesen Punkt noch einmal genauer eingegangen werden.

### **1.3.2. Nachhaltigkeit in der chemischen Ausbildung**

Die Forderungen der „Nachhaltigen Entwicklung“ an die Chemie erstrecken sich auf alle drei bekannten Teilbereiche: die Ökonomie, die Ökologie und auch auf die soziokulturellen Belange. Aufgrund der Komplexität der Problemstellungen können nicht alle Fragen bezüglich der Nachhaltigkeit von Wissenschaftlern einer Fachrichtung beantwortet werden. Vielmehr bedarf es dafür Spezialisten für jede der Disziplinen. Die aus naturwissenschaftlicher Sicht zu bewältigende Aufgabe ist die Entwicklung **ökologisch** nachhaltiger Prozesse und Verfahren. Dabei ist ein Prozess als ökologisch nachhaltig anzusehen, wenn die Ressourcennutzung (der Aufwand und die Bedingungen der Produktion sowie die daraus entstehenden Folgelasten), im Grenzfall an den naturwissenschaftlich gegebenen Minima liegen<sup>2</sup> (Kreisel und Diehlmann, 2002). In ihrer Publikation „10 Jahre nach Rio - Konzepte zum Beitrag der Chemie zu einer nachhaltigen Entwicklung“ fassen Eissen *et al.* (2002) die Anforderungen an künftige Entwicklungen in der Chemie aus ihrer Sichtweise zusammen.

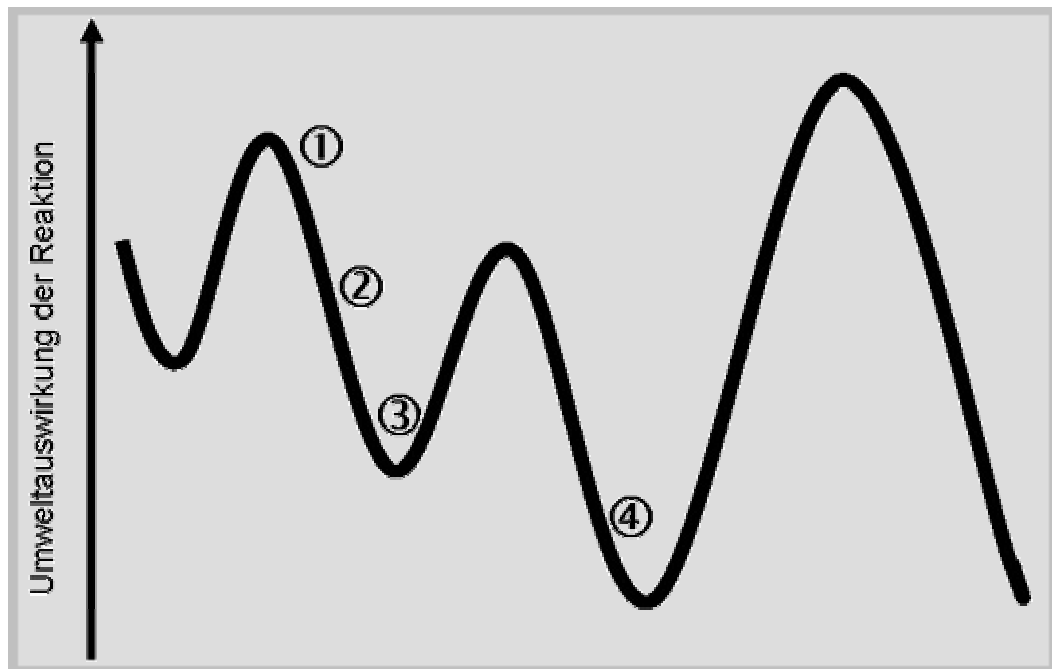
---

<sup>2</sup>Werden (dieser optimierte) Aufwand und Umweltlast eines Prozesses von einer Akteursmehrheit als zu hoch erachtet, muss der Prozess gegen ein neu zu entwickelndes, besseres Verfahren ausgetauscht oder es muss auf entsprechende Produkte verzichtet werden.

Zur Entwicklung solcher Prozesse sind Wissenschaftler gefragt, die profunde Kenntnisse auf dem Gebiet der Stoffumwandlung besitzen. Darin unterscheiden sich heutige Anforderungen an Wissenschaftler nicht von künftigen. Über dieses Wissen hinaus sollten sie jedoch auch noch Verständnis für neue, bisher nur wenig gelehrt Arbeitsgebiete mitbringen. Diese könnten sein:

- ❖ Anwendung energetisch günstiger, umweltschonender alternativer Reaktionsbedingungen durch Verwendung von katalytischen und enzymatischen Reaktionen.
- ❖ Verwendung von alternativen Techniken zu thermischen Reaktionen: photochemische und elektrochemische Reaktionen, Mikrowellentechnik, Solartechnik.
- ❖ Anwendung von modernen chemo-, regio- und stereoselektiven Reaktionen.
- ❖ Einsatz von ressourcenschonenden Ausgangs- und Zwischenprodukten sowie von nachwachsenden Rohstoffen.
- ❖ Verwendung von umweltverträglichen Lösungsmitteln.
- ❖ Rezyklierung von Auxiliaren sowie eingesetzter Lösungsmittel.

Zusätzlich zu den genannten Arbeitsgebieten ist ein Verständnis für Betrachtungen im ganzheitlichen Sinne unverzichtbar. Alle Schritte bis hin zu einem spezifischen Produkt sind bei der Entwicklung in die Betrachtung mit einzubeziehen. Ebenso muss der Verbleib der anfallenden Reststoffe bereits in diesem Stadium bedacht werden. Nur dadurch können Verfahren, aber auch Produkte zu ihrem naturwissenschaftlichen Minimum bezüglich des Energie- und Ressourcenverbrauches hin optimiert und die daraus resultierende Umweltlast weitestgehend reduziert werden. Diese neuen Ansätze müssen künftig verstärkt in die Lehre integriert werden. Folgende Grafik (Abb. 1) und die sich anschließende Erläuterung soll diese Denkweise veranschaulichen:



**Abb. 1: Mögliche Zustände der Umweltauswirkungen von Reaktionen (schematisch)**

Die Umweltauswirkung einer Reaktion sei durch Punkt ① gegeben. Bei Berücksichtigung der, den Edukten, Auxiliaren und Energie vorgelagerten, Produktionsschritte (ganzheitliche Betrachtung), kann bei dieser Reaktion ein Lösungsmittel mit hoher Umweltlast identifiziert werden. Tauscht man nun dieses Lösungsmittel gegen ein ökologisch günstigeres aus, dann kann Zustand ② erreicht werden. Sind alle möglichen Bereiche optimiert, ist das naturwissenschaftlich mögliche Minimum an Ressourcen- und Energieverbrauch dieser Reaktion in Punkt ③ erreicht und eine weitere Verbesserung bezüglich ihrer Umweltlast nicht mehr möglich. Nun müssen prinzipielle Veränderungen an der Reaktion vorgenommen werden, um ein noch niedrigeres Niveau (Punkt ④) zu erreichen. Eine solche Veränderung kann z.B. der Einsatz von Katalysatoren oder der Wechsel der eingesetzten Edukte sein. Nach einer Optimierung ist in jedem Fall die Umweltlast der verbesserten Reaktion neu zu beurteilen, da sich aufgrund der komplexen Zusammenhänge eine vermeintliche Verbesserung auch in ihr Gegenteil umkehren kann. Um diesen Sachverhalt zu demonstrieren, kann wieder das verwendete Beispiel herangezogen werden. Nimmt man für das zur Verbesserung von Punkt ① auf Punkt ② gewählte Lösungsmittel eine höhere spezifische Wärmekapazität an, kann durch erhöhten Energieverbrauch beim Erhitzen der Reaktionsmischung der Vorteil der geringeren Umweltlast in der Vorkette zunichte gemacht werden.

Im Hinblick auf die gesamte Gesellschaft, besonders aber mit Blick auf den wissenschaftlichen Nachwuchs, wäre es wünschenswert, das vorgestellte Gedankengut bereits in einem sehr frühen Stadium der Ausbildung zu vermitteln. Dadurch wird verhindert, dass sich die Lernenden an Denkhaltungen und Arbeitsweisen, die der nachhaltigen Entwicklung abträglich sind, gewöhnen. Ein strukturiertes und komplexes Denken kann dadurch ebenfalls gefördert werden. Diese Arbeit soll einen Beitrag zum Erreichen dieses Ziels leisten. Zunächst jedoch sollen Probleme, die im Zusammenhang mit der Idee des Leitbildes einer nachhaltigen Entwicklung auftauchen, besprochen werden.

## **1.4. Ungelöste Probleme in der nachhaltigen Entwicklung**

In den vergangenen Jahren wurde sehr viel Arbeit in die Entwicklung des Leitbildes „Nachhaltige Entwicklung“ investiert. Neben der politischen Ebene gibt es, wie bereits erwähnt, auch in der Wirtschaft und sogar in Kommunen Bestrebungen, die nachhaltige Entwicklung nicht nur als Ziel anzuerkennen, sondern auch aktiv für eine Umsetzung zu sorgen. Dies ist, gegen eine starke Lobby in vielen Bereichen, nicht immer einfach. Neben dem Problem der Umsetzung gibt es jedoch noch andere Schwachpunkte, die zum Erreichen einer dauerhaft nachhaltigen Entwicklung nicht minder wichtig sind. Einige dieser erkannten Problemfelder werden nachfolgend aufgezeigt.

### **1.4.1. Wahl der Kriterien zur Beurteilung der nachhaltigen Entwicklung**

Die Ziele, die im Rahmen der nachhaltigen Entwicklung erreicht werden sollen, wurden von den verschiedensten Akteursgruppen weltweit definiert. In vielen Bereichen allerdings ist noch unklar, welche Veränderungen erzielt werden müssen, um die Vorgaben auch erreichen zu können. Selbst unter der Voraussetzung, dass die notwendige Vorgehensweise bekannt sei, stellt sich noch immer die Frage, wie der Stand der jeweiligen Entwicklung überprüft werden kann. Gerade die Beurteilung, ob und wenn ja wie weit sich die Gesellschaftsentwicklung in die „richtige“ Richtung bewegt, ist in diesem Prozess sehr wichtig. Dazu bedarf es, wie bereits in der Agenda 21 (United Nations, 1992) eingefordert, einer Auswahl definierter Kriterien.

Diese Kriterien müssen den Entwicklungszustand in den drei Bereichen der Nachhaltigkeit - Umwelt, Wirtschaft und Gesellschaft - gut abbilden. Ebenso müssen daran notwendige Maßnahmen abgeleitet werden können. Nachfolgende Tabelle (Tab. 1) zeigt beispielhaft eine Auswahl von Kriterien, die dem Bericht des Interdepartementalen Ausschusses (IDARio, 2001) für die Überprüfung der Entwicklungen in der Schweiz entnommen wurden.

<p style="text-align: center;"><b><u>Umwelt</u></b></p> <p style="text-align: center;"><b>Umweltqualität und natürliche Ressourcen</b></p>	<p style="text-align: center;"><b><u>Wirtschaft</u></b></p> <p style="text-align: center;"><b>Wohlstand und Zukunftsfähigkeit</b></p>	<p style="text-align: center;"><b><u>Gesellschaft</u></b></p> <p style="text-align: center;"><b>Human- und Sozialkapital</b></p>
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Artenvielfalt</li> <li>2. Klima, Ozonschicht</li> <li>3. Emissionen</li> <li>4. Landschaft, Kultur-, Naturraum</li> <li>5. Wasser</li> <li>6. Stoffe, Organismen, Abfälle</li> <li>7. Energie</li> <li>8. Boden, Fläche, Fruchtbarkeit</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. BIP pro Kopf</li> <li>2. Qualität und Effizienz der Infrastruktur und Dienstleistungen der öffentlichen Hand</li> <li>3. Wertvermehrende Investitionsquote</li> <li>4. Langfristig tragbare Staatsverschuldung</li> <li>5. Ressourceneffizienz</li> <li>6. Wettbewerbsfähigkeit</li> <li>7. Qualitatives und quantitatives Arbeitskräftepotenzial</li> <li>8. Innovationsfähigkeit und leistungsfähige Forschung</li> <li>9. Ordnungspolitische Rahmenbedingungen zum Wohle der Gesamtwirtschaft</li> <li>10. Wirtschaftliche Entwicklung des Südens und des Ostens</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Bildung, Lernfähigkeit</li> <li>2. Gesundheit, Sicherheit, Wohlbefinden</li> <li>3. Freiheit, Individualität, Unabhängigkeit, Selbstverantwortung</li> <li>4. Identität, Kultur</li> <li>5. Wertehaltung</li> <li>6. Solidarität, Gemeinschaft, sozialer Zusammenhalt, Gerechtigkeit</li> <li>7. Offenheit, Toleranz, Wandlungsfähigkeit</li> <li>8. Soziale Sicherheit, geringer Armutsanteil</li> <li>9. Rechtssicherheit</li> <li>10. Chancengleichheit, Gleichstellung, Partizipation</li> </ol>

**Tab. 1: Kriterien zur Beurteilung der nachhaltigen Entwicklung (IDARio, 2001)**

Entsprechende Kriterien müssen für alle Länder und alle Bereiche - auch mit globaler Sichtweise - festgelegt werden. Weil sich Probleme, Themenschwerpunkte und das Handlungsbewusstsein in Gesellschaften jedoch kontinuierlich ändern, müssen diese Kriterien flexibel handhabbar sein und nicht zu einem politischen Dogma werden (VCI, 1999). Was bei der Definition der Kriterien, aber auch bereits bei den von der Enquete-Kommission des 13. Deutschen Bundestages formulierten Regeln auffällt, ist die Betrachtung jeweils nur **eines** Nachhaltigkeitsbereiches. Es gibt, von einigen wenigen Beispielen, wie z.B. der von der BASF AG entwickelten Ökoeffizienzanalyse (BASF, 1999; Schrott und Saling, 2000) abgesehen, offensichtlich noch kaum anwendbare Regeln bzw. keine Kriterien, die zwei oder gar alle drei Nachhaltigkeitsbereiche umfassen. Da eine gegenseitige Beeinflussung der Bereiche möglicherweise dazu führt, dass eine Verbesserung in einem Nachhaltigkeitsbereich kontraproduktiv in einem der beiden anderen wirkt, wäre die Entwicklung von Kriterien, die sich über zwei oder gar alle drei Nachhaltigkeitsbereiche hin erstrecken, wünschenswert. Sind solche Kriterien entwickelt, taucht allerdings eine weitere Frage auf. Welche Indikatoren können zur Messung des Zustandes der zu untersuchenden Kriterien heran gezogen werden?

#### **1.4.2. Fehlende Indikatoren der nachhaltigen Entwicklung**

Wie im vorangegangenen Kapitel beschrieben, bedarf es zur Beurteilung der Nachhaltigkeit einer Entwicklung bestimmter Kriterien. Diese sollen die drei Teilbereiche des „Sustainable Development“ möglichst gut repräsentieren und leicht zu untersuchen sein. Zur Untersuchung ist eine Auswahl von Indikatoren erforderlich, mit deren Hilfe eine Aussage über die zu untersuchenden Kriterien - z.B. der Artenvielfalt, der Innovations- und Leistungsfähigkeit der Forschung sowie Identität und Kultur - getroffen werden kann. Hier zeichneten sich zunächst Probleme ab, denn Indikatoren waren zwar für den Bereich der Ökologie gut, für den Bereich der Ökonomie jedoch nur mäßig und für den Bereich der sozialen Nachhaltigkeit nahezu nicht definiert (Schwery und von Burg, 2001; Mauch Consulting *et al*, 2001). Mit der Vorlage des Berichtes „Indicators of Sustainable Development“ der Vereinten Nationen ist man dem Problem fehlender Indikatoren bereits deutlich näher gekommen.



In diesem Bericht sind 134 Indikatoren aus den verschiedenen Bereichen der Nachhaltigkeit genannt, die in verschiedenen Projekten untersucht wurden (United Nations, 2002). Ihre Leistungsfähigkeit müssen diese Indikatoren aber noch unter Beweis stellen. Probleme bereiten des Weiteren noch die Kriterien, die exemplarisch für den Entwicklungszustand der Gesellschaft stehen. Sie hängen von den Ansprüchen und Bedürfnissen der Menschen ab, die weltweit in vielerlei Hinsicht unterschiedlich sind und auf die nun eingegangen wird.

### **1.4.3. Divergenzen der Bedürfnisse**

Die von der Brundtland-Kommission vorgestellte Definition von „Sustainable Development“ sagt aus, dass eine nachhaltige Entwicklung eine Entwicklung ist „...die den Bedürfnissen der heutigen Generation entspricht, ohne die Möglichkeiten künftiger Generationen zu gefährden, ihre eigenen Bedürfnisse zu befriedigen und ihren Lebensstil zu wählen...“.

Von zentraler Bedeutung innerhalb der Definition ist, dass die Entwicklung so vorangetrieben werden soll, dass die Bedürfnisse heutiger und zukünftiger Generationen gleichermaßen befriedigt werden. Die Bedürfnisse variieren jedoch von Individuum zu Individuum, von Land zu Land und unterliegen ferner dem Wandel der Zeit. Nachfolgend sollen diese Divergenzen erläutert werden.

#### *Zeitliche Divergenz:*

Bedürfnisse unterliegen dem Wandel der Zeit und sind gleichsam auch vom technologischen Fortschritt und Stand einer Gesellschaft abhängig. Abgesehen von den Grundbedürfnissen des Menschen wie Zugang zu Nahrung, sauberem Trinkwasser und Arbeitsmöglichkeiten, lassen sich vom heutigen Standpunkt gesehen keineswegs die Bedürfnisse späterer Generationen ausmachen. Zwar lassen sich anhand der Vergangenheit Szenarien für die Zukunft konstruieren, aber schon ein Zeithorizont von mehr als einhundert Jahren wird nur schwer zu beurteilen sein.

### *Örtliche Divergenz:*

Aufgrund der z.B. geografischen Lage oder der Religion ergeben sich neben den Grundbedürfnissen unterschiedliche Notwendigkeiten. So spielt z.B. im Vergleich zu Nordeuropa der Erdölverbrauch in den meisten OPEC Staaten eine untergeordnete Rolle, während der Zugang zu ausreichend Trinkwasser in diesen Ländern deutlich wichtiger ist als in Nordeuropa. Neben diesen eher globalen Unterschieden gibt es aber auch regionale und gar lokale Divergenzen. So ist beispielsweise an einem Industriestandort die Reduzierung der Emissionslast für die Bürger von hoher Wichtigkeit, während diese in regionaler und globaler Sicht eine eher untergeordnete Größe darstellt.

### *Akteursdivergenz:*

Neben örtlichen und zeitlichen Bedürfnisdivergenzen kommt es auch zu Unterschieden in der Bedürfnisdefinition verschiedenster Akteure. Diese variieren z.B. zwischen unterschiedlichen Industrieunternehmen oder unterschiedlichen Verbänden. Auch jedes Individuum hat seine ganz speziellen Bedürfnisse. Letzteres lässt sich zum Beispiel am unterschiedlichen Freizeit- und Sozialverhalten von Menschen erkennen, aber auch an deren Umgang mit der Ressource Natur.

Diese Zielkonflikte sind der Grund, warum es nur sehr schwer möglich ist eine gemeinsame Linie auf der ganzen Welt zu finden. Man ist sich zwar in den Kernpunkten (z.B. Reduktion des Ressourcenverbrauchs, Zugang zu Nahrungsmitteln und Trinkwasser, Arbeit) einig, aber über die Ausgestaltung einer Gesellschaft, eines Unternehmens oder des Lebens eines Einzelnen herrscht noch große Unklarheit. Nichts desto trotz wurden in vielen Bereichen schon wichtige Schritte eingeleitet. Die Forschung auf dem Gebiet der Nachhaltigkeit, gleich in welchem Fachbereich, hat seit der Verabschiedung der Rio-Deklaration stark zugenommen und einige Neuerungen haben sicherlich das Potenzial die gewünschte nachhaltige Entwicklung zu fördern.

Allerdings bestehen auch hier Gefahren, z.B. die Entwertung der Idee der nachhaltigen Entwicklung durch unsachgemäße Aussagen über die Qualität der Forschungsergebnisse. Für den Bereich der Chemie soll diese Aussage nachfolgend verifiziert und eine neue Nomenklatur zur Abwendung einer Entwertung des Nachhaltigkeitsbegriffes eingeführt werden.

#### **1.4.4. Kommunikation der Ergebnisse**

Im Chemiesektor, in dem mit der Bewegung der „Green Chemistry“ (Anastas und Warner, 1998) eine neue Denkhaltung kreiert wurde, arbeiten viele Arbeitsgruppen an der Entwicklung neuer Prozesse, die den Prinzipien des „Sustainable Development“ genügen sollen. Dabei stehen vor allen Dingen Arbeiten im Vordergrund, die in der Regel auf die Minimierung der Umweltlasten durch z.B. Ressourcenschonung, durch die Substitution von Toxinen mit weniger giftigen Stoffen oder die Reduktion des Energieverbrauchs eines Prozesses zielen. Die Ergebnisse dieser Arbeiten sind, in Bezug auf ihre naturwissenschaftlichen Erkenntnisse, meist hochwertig (Beispiele siehe Tundo und Anastas, 2000). Dennoch muss die Frage gestellt werden, ob sie nachhaltig im eigentlichen Sinne sind. Die Idee der nachhaltigen Entwicklung zielt wie bereits beschrieben, auf eine Verbesserung von Ökonomie und Ökologie im Zusammenspiel mit sozialen Fragestellungen. Die Ökologie ist davon nur ein Teilbereich. Die beiden anderen Gebiete der Nachhaltigkeit sind in der Regel nicht Gegenstand der Forschungsarbeiten von Chemikern, da ihre Kenntnisse auf diesen Gebieten selbstverständlich deutlich geringer sind. Um nun zu bestimmen, ob eine in der Chemie als nachhaltig bezeichnete Neuerung wirklich nachhaltig im Sinne der Definition ist, müssen Wissenschaftler anderer Disziplinen die Ergebnisse unter den für sie bedeutenden Gesichtspunkten untersuchen. Solange diese Untersuchungen nicht erfolgt sind, ist ein derartiger „nachhaltiger Prozess in der Chemie“ allenfalls ökologisch nachhaltig. Dies bedeutet jedoch auch, dass die erreichte Neuerung zu einer Verschlechterung in den beiden anderen Teilbereichen der Nachhaltigkeit führen kann. Ein Beispiel soll diesen Sachverhalt erläutern:

*In einem Prozess wird ein toxisches Lösungsmittel gegen ein weniger toxisches ausgetauscht. Der Prozess wird dadurch ökologisch nachhaltiger. Wenn das neu eingesetzte Lösungsmittel jedoch teurer als das alte ist, dann verschlechtert sich der ökonomische Bereich der Nachhaltigkeit. Nimmt man weiterhin an, dass der Wechsel des Lösungsmittels zum Verlust eines Arbeitsplatzes beim Lieferanten führt, dann verschlechtert sich auch der soziale Nachhaltigkeitsbereich.*

Ob der Austausch des Lösungsmittels in der Summe noch nachhaltig ist, wäre nun fragwürdig. Um die Aussagen über neue Entwicklungen zu präzisieren und um die Idee des „Sustainable Development“ nicht zu einer Worthülse verkommen zu lassen, soll in dieser Arbeit eine Nomenklatur für nachhaltige Entwicklungen eingeführt werden (Diehlmann und Kreisel, 2002), mit deren Hilfe der Untersuchungsgrad bzw. der Grad der Nachhaltigkeit eindeutig identifiziert werden kann. Als Grundbaustein der Nomenklatur wird ein großes S (Sustainability) verwendet. Ergänzt wird dieser Grundbaustein durch die Indizes econ. (ökonomisch), ecol. (ökologisch) und soc. (sozial) wenn die Entwicklung auf diese Bereiche hin untersucht wurde. Die in oben genanntem Beispiel eingeführte Entwicklung wäre demnach  $S^{ecol}$ .

Die Nomenklatur hilft, die untersuchten Bereiche genau anzuzeigen, die Untersuchungstiefe jedoch wird bis jetzt noch nicht berücksichtigt. Um die Tiefe der Untersuchung zu deklarieren, muss die Nomenklatur noch erweitert werden. Anhand des oben verwendeten Beispiels wird diese Notwendigkeit erläutert.

*Der Austausch des Lösungsmittels führt zu einer ökologischen Nachhaltigkeit. Geht man jedoch davon aus, dass die Produktion des geringer toxischen Lösungsmittels mit einer größeren Umweltlast einhergeht, als die des toxischen, dann ist es möglich, dass die betrachtete Substitution des Lösungsmittels die ökologische Nachhaltigkeit sogar verschlechtert.*

Zur Identifizierung der Untersuchungstiefe (natur-)wissenschaftlicher Arbeiten soll bei einer ganzheitlichen Betrachtung h (für holistic) und wenn nur der Prozess selbst betrachtet wurde p (für process) als Index Verwendung finden.

Eine dritte Erweiterung der Nomenklatur ist wichtig, um die Größenordnung der verbesserten Nachhaltigkeit zu erfassen. Nachhaltigkeit hat einen globalen, einen regionalen oder lokalen Charakter. Die Reduktion der Emissionslast an einem Industriestandort z.B. führt zu einem positiven Effekt auf lokaler vielleicht noch regionaler Ebene, in globaler Hinsicht allerdings wirkt sich diese Reduktion deutlich geringer aus. Die Reduktion des Treibstoffverbrauchs der in einem Land betriebenen Fahrzeugflotte hingegen könnte z.B. helfen, das globale Problem des Treibhauseffektes zu reduzieren, das zunächst aus regionaler und lokaler Sicht weniger dringend erscheint. Um die Größenordnung der Auswirkung einer Innovation zu beschreiben, soll die Nomenklatur deshalb um die Indizes *loc* (Lokal), *reg* (Regional) oder *glob* (Global) erweitert werden. Abb. 2 zeigt zusammenfassend den Aufbau der neuen Nomenklatur.

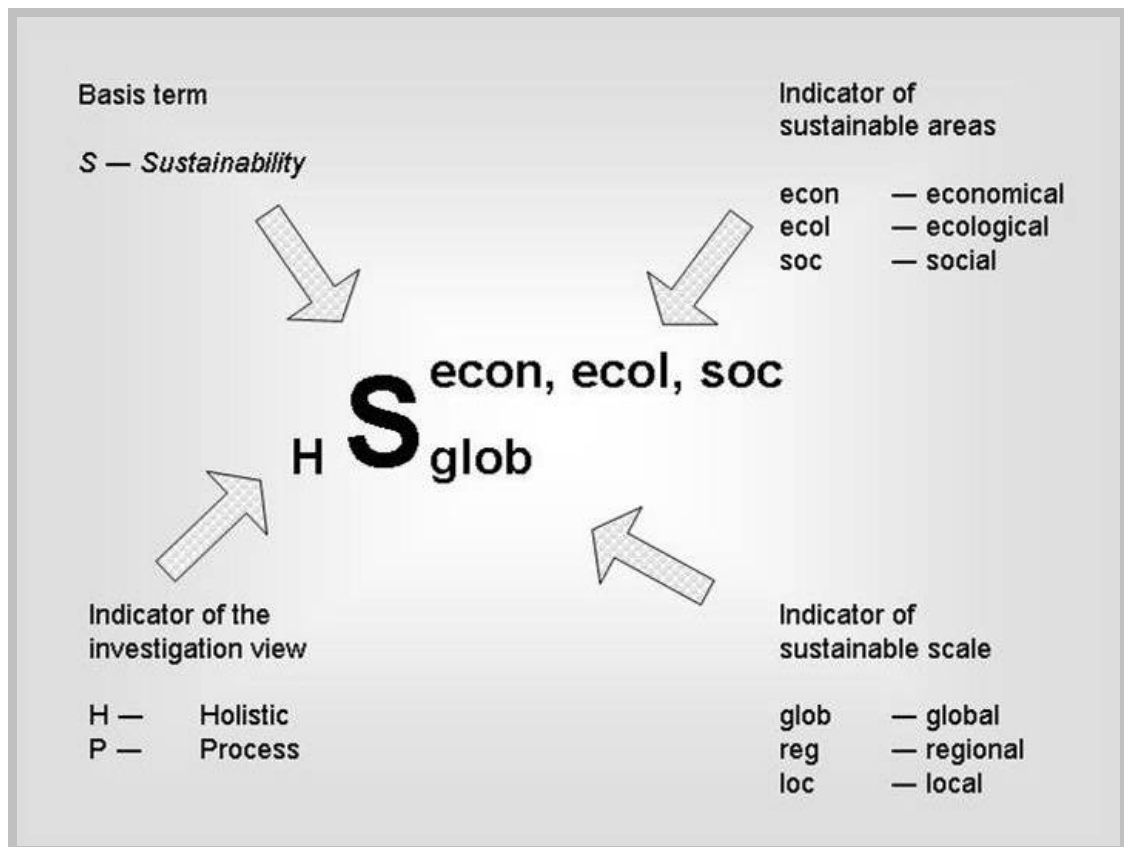


Abb. 2: Bestandteile der Nomenklatur der Nachhaltigkeit (Diehlmann und Kreisel, 2002)

## 2. Ziele und Vorgehensweise

*Die Ziele dieser Arbeit sind:*

- I. Die Sensibilisierung von (Nachwuchs)Wissenschaftlern für die Möglichkeiten der Ressourcen- und Energieschonung außerhalb der konventionellen, stark reaktionsbezogenen Denkhaltung in der Chemie.
- II. Die Bedeutung einer ganzheitlichen Betrachtungsweise in der Chemie zur Verbesserung der ökologischen Nachhaltigkeit aufzuzeigen.
- III. Die Entwicklung einer Bewertungsgrundlage als Entscheidungshilfe bei der Wahl von Reaktions- und Aufarbeitungsbedingungen.

*Die Vorgehensweisen in dieser Arbeit sind:*

- I. Das Aufdecken von Schwachstellen, die den ökologischen Teil der Nachhaltigkeit chemischer Laborsynthesen beeinflussen.
- II. Die Formulierung von Regeln (Sustainable Synthesis Optimisation Rules - SUSOR) zur ökologisch nachhaltigen Optimierung von Synthesen unter besonderer Berücksichtigung des Stoff- und Energieverbrauchs.
- III. Die Entwicklung einfacher Kennzahlensysteme zur zügigen Abschätzung der Umweltlast einer Laborsynthese.
- IV. Die Erarbeitung eines Prototyps der Internetpräsentation zur Darstellung der im Rahmen des Projektes „[nachhaltiges organisches Praktikum](#)“ (DBU, unveröffentlicht) erarbeiteten Inhalte.

### 3. Untersuchungsaufbau und Durchführung

Laborreaktionen sind der Ursprung jedes industriell durchgeführten chemischen Verfahrens. Beim Versuch im Labor werden bereits erste Festlegungen über Stoffeinsatz, Reaktionsdauer und Reaktionstemperatur sowie über mögliche Wege der Aufarbeitung getroffen. Viele dieser Reaktionen im Labormaßstab sind bezüglich des Energie- und Ressourcenverbrauchs sowie der hervorgerufenen Umweltlasten nicht optimiert. Man kann deshalb davon ausgehen, dass die Probleme der Laborreaktionen in veränderter Form später auch den industriellen Prozess beeinflussen. Vor diesem Hintergrund ist es wichtig, bei Laborreaktionen inhärente allgemeine Schwachstellen aufzuklären und mögliche Optimierungspotenziale aufzuzeigen. Dabei ist eine Berücksichtigung der Herstellung von Edukten und Auxiliaren der Reaktion (Vorketten) unabdingbar. Die Identifikation von Problembereichen ist auch dann wichtig, wenn der absolute Stoff- und Energieverbrauch der (Labor-)Reaktionen in seiner Größe weitgehend unbedeutend ist. Mit dem Wissen um potenzielle Schwachstellen und der handhabbaren Wege diese zu beseitigen, können künftige Generationen von Wissenschaftlern den Anforderungen der ökologisch nachhaltigen Entwicklung gerechter werden.

Die wesentlichen Probleme der heutigen Industrieprozesse sind ein hoher Ressourcen- und Energiebedarf, Emissionen in die Umweltkompartimente Boden, Wasser und Luft sowie ein hohes Abfall- und Reststoffaufkommen. Die Problemfelder des Stoff- und Energieverbrauchs wurden in dieser Arbeit eingehender untersucht. Dazu wurden aus dem Angebot des [„nachhaltigen organischen Praktikums“](#) (DBU, unveröffentlicht) vier unterschiedliche Reaktionen im Labormaßstab ausgewählt. Im Focus des Interesses stand zunächst der Energieverbrauch der Laborsynthesen, da dieser die Ergebnisse von Umweltwirkungsbetrachtungen meist sehr stark beeinflusst (Beck *et al.*, 2000).

Elektrische Energie wird bei chemischen Reaktionen vor allem zur Zu- und Abfuhr von Reaktionsenergie sowie für die unterschiedlichen Arbeitsschritte zur Aufarbeitung der aus der Reaktion hervorgegangenen Rohprodukte benötigt. Um Unterschiede bei der Bereitstellung der Reaktionsenergie zu identifizieren, wurde mit der säurekatalysierten Acetalisierung von 3-Nitrobenzaldehyd mit Ethylenglykol zum 1,3-Dioxolan 3 eine Reaktion ausgewählt, die sowohl mit klassischen Heizmethoden (Heizen mit Ölbad oder Heizpilz) durchführbar ist, als auch eine Reaktion im nicht klassischen Mikrowellenfeld erlaubt. Um den energetischen Aufwand von unterschiedlichen Standardlaboroperationen zu untersuchen, wurden drei verschiedene Nitrierungen von Aromaten - Nitrierung von Toluol, Phenol und Benzaldehyd - ausgewählt, die sich jeweils in der Art der Aufarbeitung ihrer Rohprodukte unterscheiden. Bei den ausgewählten Reaktionen wurde in einem zweiten Schritt der Einsatz von Auxiliaren bei Reaktion und Aufarbeitung untersucht, um die Problematik des oft hohen Ressourcenverbrauchs chemischer Reaktionen genauer zu beleuchten.

Bei den Untersuchungen wurde jeweils die Menge der eingesetzten Stoffe sowie die bei der Reaktion verbrauchte Energie erfasst und auf mögliche Schwachstellen hin untersucht. Im weiteren Verlauf der Arbeiten wurde durch eine ganzheitliche Betrachtung der jeweilige Einfluss von der Umsetzung vorgelagerter Prozessketten auf die Umweltlast der Reaktion untersucht. Bei der Stoffstrombetrachtung waren nur die Massenströme und nicht wie üblich die Wirkpotenziale der einzelnen Stoffe von Interesse. Um absolute Aussagen über die Umweltlast der untersuchten Reaktionen zu treffen, wäre die Durchführung einer kompletten Ökobilanz, inklusive der auf den Wirkpotenzialen der Stoffe basierenden Wirkungsbilanz, notwendig. Darauf wird hier verzichtet, da ein Ziel dieser Arbeit ist, **allgemeine** Schwachstellen von Laborreaktionen der (Hochschul-) Ausbildung zu ermitteln. Die Umweltwirkung einer Reaktion ist keine allgemeine Schwachstelle, sondern variiert vielmehr mit den in der Synthese eingesetzten Edukten und Auxiliaren.

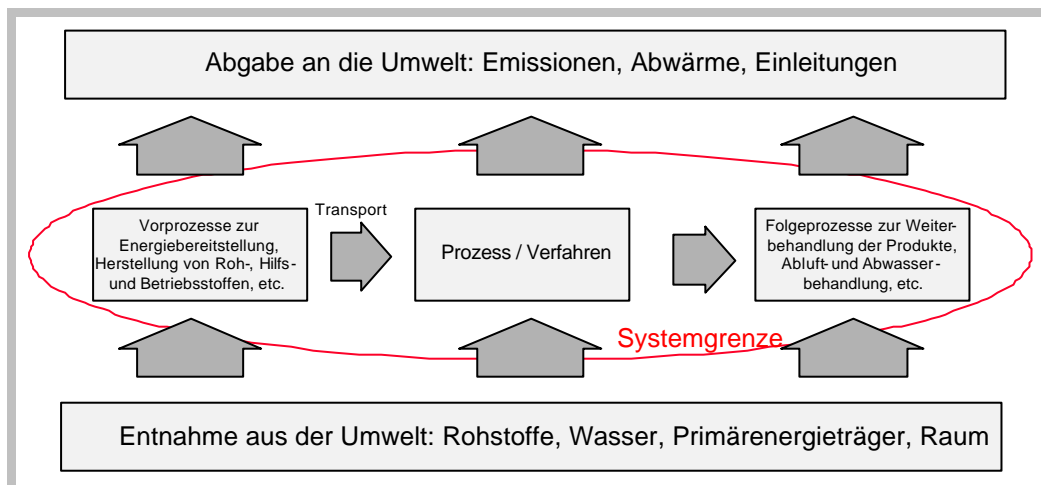


Ein weiterer Grund eine komplette Wirkungsauswertung zu unterlassen, ist die Tatsache, dass im Rahmen des Projektes „[nachhaltiges organisches Praktikum \(NOP\)](#)“ diese Untersuchung für die ausgewählten Reaktionen von einer anderen Arbeitsgruppe durchgeführt wird. Weiterhin sollen in dieser Arbeit Problemkreise außerhalb der konventionellen, stark reaktionsbezogenen Denkhaltung in der Chemie aufgedeckt werden, was ebenfalls zu einem Verzicht einer Wirkungsuntersuchung führt. Trotzdem stellt die Ökobilanzmethode, bei der alle Stoffströme auch nach ihrer Wirkung hin untersucht werden, eine gute Möglichkeit dar, die Umweltauswirkungen von Prozessen und Produkten ganzheitlich zu untersuchen. Aus diesem Grund soll eine Beschreibung der Methode der Ökobilanz in dieser Arbeit nicht fehlen.

### **3.1. Die Methode der Ökobilanz**

Die wissenschaftliche Methode der Ökobilanz ermöglicht es, „die mit einem Produkt, einem Verfahren oder einer Dienstleistung verknüpften Umweltlasten ganzheitlich zu erfassen, zu quantifizieren und im Zusammenhang der gegebenen Fragestellung auszuwerten“ (Striegel, 2000). Die Ökobilanz dient dabei dem Vergleich der Umweltauswirkungen zweier oder mehrerer unterschiedlicher Produkte, Produktgruppen, Systeme, Verfahren oder Verhaltensweisen. Sie unterstützt dadurch die „Offenlegung von Schwachstellen, die Verbesserung der Umwelteigenschaften der Produkte, den Vergleich alternativer Verhaltensweisen und die Begründung von Handlungsempfehlungen“ (Umweltbundesamt, 1992). Nach langjähriger Entwicklungsarbeit liegt seit 1997 eine breit anerkannte Rahmenmethodik für Ökobilanzen vor (ISO/EN/DIN 14040, 1997). Durch intensive internationale Normungsbestrebungen wurde mittlerweile Konsens über die Konkretisierung einzelner Bereiche, z.B. „Festlegung des Ziels und des Untersuchungsrahmens sowie Sachbilanz“ (ISO/EN/DIN 14041, 1998) erzielt, während andere Teile wie z.B. die „Wirkungsabschätzung“ (ISO/EN/DIN 14042, 2000) oder auch die „Auswertung“ (ISO/EN/DIN 14043, 2000) noch immer diskutiert werden. Produktökobilanzen („Life Cycle Assessment“) zeichnen sich dadurch aus, dass der gesamte Lebensweg von Produkten oder Produktsystemen von der Herstellung, über die Nutzung bis zur Verwertung/Beseitigung betrachtet wird.

Dies bedeutet, dass nicht nur die Umweltauswirkungen an der Produktionsstätte, sondern vielmehr die gesamte Herstellung des Produktes, ausgehend von der Förderung der Rohstoffe aus der Lagerstätte, über die Distribution und den Gebrauch/Verbrauch bis zur Verwertung/Beseitigung erfasst werden. Die Bilanzierung und Auswertung der Daten erfolgt medienübergreifend für die Kompartimente Luft, Boden und Wasser. Dabei werden in allen Lebenswegabschnitten die maßgeblichen Input- (Energie, Rohstoffe, Wasser) und Outputströme (Abwasser, Abfälle, Emissionen) erfasst (Abb. 3) und auf eine den Nutzen quantifizierende Größe (Nutzeneinheit) bezogen. Das Instrument Ökobilanz ermöglicht damit, die Umweltauswirkungen von Systemen in ihrer Gesamtheit zu erfassen. Das untersuchte System wird dabei durch die Systemgrenzen zur Umwelt festgelegt.



**Abb. 3: Idealtypischer Abbildungsraum einer Ökobilanz (nach Kuhenn, 1997)**

Die Ökobilanzmethode findet nicht nur für Produkte, sondern prinzipiell auch für technische Prozesse Anwendung, gleichwohl es hierzu noch keine standardisierten Vorgaben für die Durchführung gibt (Curran, M.A. 2000; Burgess und Brennan, 2001). Aufbauend auf dem Stand des Wissens zur Produkt-Ökobilanzierung wurde exemplarisch in einem Projekt die bestehende Methode für den Bereich der technischen Verfahren weiterentwickelt (BMBF-Verbundvorhaben, 1998). Da Laborreaktionen ebenfalls technische Prozesse sind, ist das Instrument der Ökobilanz praktikabel anwendbar. Es gibt dabei aber einige Besonderheiten zu beobachten, die Einfluss auf das Ergebnis einer Bilanz nehmen können und die nachfolgend genannt werden.

### **3.1.1. Besonderheiten der Bilanzierung von Laborreaktionen**

Die Bilanzierung von Laborreaktionen unterscheidet sich formal nicht von der Bilanzierung industrieller Produktionsprozesse. Es gelten ebenso die Regeln der Normenreihe ISO 14040 ff. Unterschiede gibt es jedoch bei den betrachteten Prozessen selbst. Industriell durchgeführte Verfahren sind in der Regel weitgehend optimierte Systeme, die nach dem ökonomischen Prinzip mit einem Minimum an Inputmaterialien ein Maximum an Stoffen erwirtschaften. Die Verfahren sind jeweils so weit standardisiert, dass, von Prozessstörungen abgesehen, immer eine gleich bleibend hohe Produktqualität garantiert werden kann. Prinzipien, wie sie für eine dermaßen ausgestattete Produktion gelten, finden für Laborreaktionen nur bedingt Anwendung. Viele Parameter, die Einfluss auf die Umweltlast einer chemischen Synthese nehmen, werden nahezu ausschließlich durch die Arbeitsweise des Bearbeiters gelenkt und sind nicht durch physikalische und chemische Notwendigkeiten bedingt. So ist zum Beispiel die Reaktionsdauer oft willkürlich und nicht aufgrund der Kinetik gewählt (z.B. Rühren über Nacht). Angaben über die benötigten Mengen von Hilfsstoffen fehlen oft völlig und sind dem Ermessen des Bearbeiters überlassen. Die Ergebnisse aus der Aufnahme der Daten zur Sachbilanz lassen sich, einen einzigen Bearbeiter vorausgesetzt, in Grenzen reproduzieren. Sie haben aus den genannten Gründen jedoch erhebliche Schwankungsbreiten bei unterschiedlichen Bearbeitern. Die unterschiedliche Schwankungsbreite der Ergebnisse der Sachbilanz ist nicht der einzige Punkt, an dem sich die Bilanzierung einer Laborreaktion von Produkt- oder Prozessökobilanzen unterscheidet. Eine weitere und ebenfalls sehr wichtige Besonderheit der Laborsynthese sind die Ergebnisse der Wirkungsauswertung. Die oft sehr geringen Mengen an Einsatzstoffen und entstehender Produkte lassen es meist nicht zu, dass vorhandene Unterschiede in der Umweltlast von zu vergleichenden Synthesen herausgearbeitet werden können. In vielen Kategorien sind die betrachteten Stoffmengen ohne Wirkung. Um trotzdem eine Aussage über Vor- und Nachteile von zu vergleichenden Reaktionen zu erreichen, kann es daher notwendig werden, zur Bewertung nur die gut vergleichbaren Stoff- und Energieströme heranzuziehen. Dabei kann das Bilanzergebnis variieren, der didaktische Effekt für den Studenten jedoch bleibt.

### **3.1.2. Bilanzauswertung im drei Ebenen Modell**

Die Methode der Ökobilanz erlaubt es, die Umweltlast aus der Erzeugung von Produkten detailliert zu erfassen. Aufgrund der ganzheitlichen Betrachtung können aber nicht nur die Input- und Outputströme des Gesamtprozesses im Sinne einer Blackbox-Betrachtung beurteilt werden, sondern auch detailliert alle zur Produkterzeugung notwendigen Prozessabschnitte. Für die Untersuchung von Laborsynthesen mit dem Hintergrund, die Stoff- und Energieströme dieser Synthesen transparenter zu machen, Schwachstellen zu verdeutlichen und die Verhältnisse zwischen eigentlicher Reaktion und den vor- und nachgelagerten Arbeitsschritten darzustellen, bietet eine solche Vorgehensweise damit optimale Voraussetzungen. In dieser Arbeit wurde die Untersuchung angelehnt an einen Vorschlag von Hungerbühler (2001) auf den drei nachfolgend beschriebenen Betrachtungsebenen durchgeführt.

#### ***Reaktionsebene***

Die erste untersuchte Ebene stellt die Reaktion dar. Die Bilanzgrenzen erstreckten sich dabei vom Befüllen der Reaktionsapparatur über die eigentliche Reaktion bis hin zum aufzuarbeitenden Rohprodukt. Berücksichtigt wurden alle für die Umsetzung in der Laborreaktion benötigten Edukte, Hilfsstoffe, Lösungsmittel und Katalysatoren sowie die bei der Reaktion verbrauchte Energie.

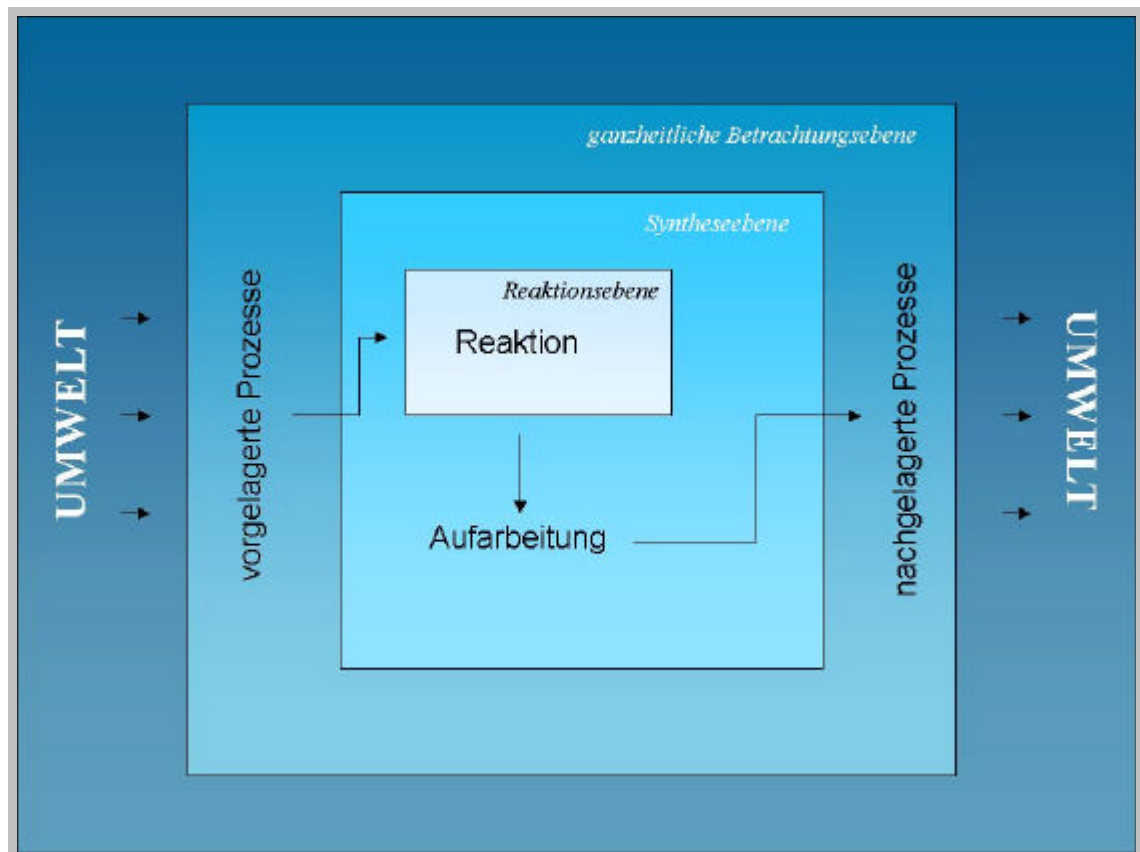
#### ***Aufarbeitungsebene***

Die zweite Untersuchungsebene ist die Ebene der Aufarbeitung des Rohproduktes. Es werden bei der Betrachtung alle Stoff- und Energieströme erfasst, die zur Isolierung und Reinigung des Zielproduktes notwendig sind. Auf diese Weise lässt sich ein besserer Vergleich zwischen den untersuchten Reaktionen ziehen. Weiterhin ist auch ein Vergleich des stofflichen und energetischen Aufwandes von Reaktion und Aufarbeitung nur einer Reaktion möglich. Der Bilanzrahmen erstreckt sich bei dieser Betrachtung vom aus der Reaktion hervorgegangen Rohprodukt bis zum aufgearbeiteten Reinprodukt.

## **Ganzheitliche Betrachtung**

In der dritten Untersuchungsebene wird dem, aus der Sicht der Ökobilanz geforderten, Schritt der ganzheitlichen Betrachtung Rechnung getragen. Hier werden jedoch nicht explizit die Stoff- und Energieströme der Vor- und Nachketten ausgewiesen, sondern alle Schritte - Vorkette, Prozess, Aufarbeitung und soweit möglich nachgelagerte Prozesse - zusammengefasst.

Durch die gewählte Struktur folgt der didaktische Ansatz im Wesentlichen der Vorgehensweise bei einer Betrachtung aus chemischer Sicht, bei der die Synthese im Mittelpunkt steht. In der nachfolgenden Abbildung (Abb. 4) werden die zugrunde liegenden Darstellungsebenen noch einmal aufgezeigt.

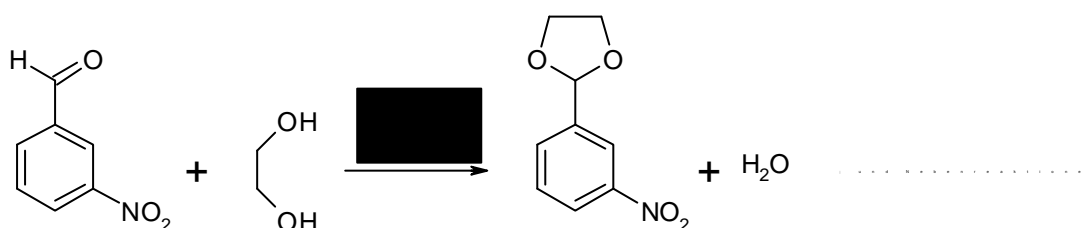


**Abb. 4: Darstellungsebenen der Untersuchungsergebnisse (Hungerbühler, 2001)**

Nachdem das methodische Vorgehen bei der Bilanzierung der Reaktionen in dieser Arbeit nun dargelegt ist, sollen nachfolgend die gemachten Untersuchungen genauer beschrieben werden.

### 3.2. Acetalisierung von Benzaldehyd mit Ethylenglykol

Die Durchführbarkeit der säurekatalysierten Acetalisierung von 3-Nitrobenzaldehyd mit Ethylenglykol zum 1,3-Dioxolan 3 sowohl mit Hilfe klassischer Reaktionstechnik als auch im Mikrowellenfeld ermöglicht es, vorhandene Unterschiede in der Höhe des Energieverbrauchs - als Resultat unterschiedlichen Energieeintrages - zu untersuchen. Die für einen Vergleich notwendigen Daten wurden in verschiedenen Versuchen ermittelt. Die Arbeitsanweisungen zu diesen Versuchen entstammen sowohl bei der klassischen Variante (siehe A.1.1) als auch bei der Mikrowellen assistierten Synthese (siehe A.1.2) dem „[nachhaltigen organischen Praktikum](#)“ (DBU, unveröffentlicht). Nach diesen Vorschriften reagieren die eingesetzten Edukte nach folgendem Schema (Abb. 5) zum 1,3-Dioxolan 3:



**Abb. 5: Reaktionsschema - säurekatalysierte Acetalisierung**

Die Mikrowellenreaktion unterscheidet sich von der klassischen Reaktionsvariante im Verzicht auf Schlepptmittel zur Abscheidung von Reaktionswasser und in der Art der Aufarbeitung. Die Reaktion führt selektiv zum gewünschten 1,3-Dioxolan 3. Im aufzuarbeitenden Reaktionsgemisch lassen sich nach Ende der Reaktion nur das Zielprodukt, nicht umgesetzte Edukte sowie die notwendigen Hilfsstoffe nachweisen. Vor diesem Hintergrund müssen bei der ganzheitlichen Bilanzierung der Reaktion keine Allokationen vorgenommen werden. Nachfolgend wird zunächst die Reaktion unter klassischen Reaktionsbedingungen vorgestellt, dann auf die Mikrowellensynthese eingegangen.

### 3.2.1. Klassische Methode der Energiezufuhr - Heizpilz, Ölbad

Zur Datenerhebung der klassischen Reaktionsvariante wurde, mit Ausnahme der Energiequelle, stets eine identische Versuchsanordnung gewählt. Diese setzte sich wie folgt zusammen:

**Ölbad:** 250 mL Zweihalskolben, Quecksilberthermometer bis 100°C, Wasserabscheider, Rückflusskühler, Heizrühr Tisch IKA RCT Basic, Ölbad (Glas Abdampfschale und Silikonöl), Kontaktthermometer bis 150°C.

**Heizpilz:** 250 mL Zweihalskolben, Quecksilberthermometer bis 100°C, Wasserabscheider, Rückflusskühler, Heizpilz Labor Alliance 250.

Die folgenden Abbildungen zeigen die Versuchsanordnung unter Verwendung eines Heizpilzes (Abb. 6) und eines Ölbades (Abb. 7) als Energiequelle:



**Abb. 6: Aufbau Apparatur - Heizpilz**



**Abb. 7: Aufbau Apparatur - Ölbad**

Zur Durchführung der Reaktion wurden Edukte, Katalysator und Schlepplmittel vorgelegt, die Mischung zum Sieden erhitzt und so lange am Rückfluss gehalten, bis sich kein Reaktionswasser mehr abschied. Die noch heiße Reaktionsmischung wurde vom öligen Rückstand abdekantiert und im Wasserbad kristallisiert. Das Rohprodukt wurde abgesaugt und im Exsikkator bei vermindertem Druck getrocknet. Zur Entfernung nicht umgesetzten 3-Nitrobenzaldehyds wurde das Rohprodukt in Diethylether gelöst und mit einer Natriumhydrogensulfit-Lösung ausgeschüttelt. Von der Lösung wurde nach Trocknen mit Natriumsulfat das Lösungsmittel abgezogen und der Rückstand aus einer 1:1 Mischung von Petrolether und Diethylether umkristallisiert (Heizpilz/Ölbad). Nach vollständiger Kristallisation im Eisbad wurde der Niederschlag über einen Büchnertrichter abgesaugt und im Exsikkator getrocknet (A.1.1). Die im Verlauf der Reaktion und Aufarbeitung benötigte Energie sowie die Kühlwassermenge wurden für die Versuche jeweils ermittelt.

### **3.2.2. Nichtklassische Methode der Energiezufuhr - Mikrowelle**

Die Reaktionsvorschrift zur Umsetzung von 3-Nitrobenzaldehyd und Ethylenglykol zum 1,3-Dioxolan 3, ist eine Abwandlung der klassischen Reaktionsvorschrift. Die zur Reaktion verwendete Versuchsanordnung setzte sich wie folgt zusammen:

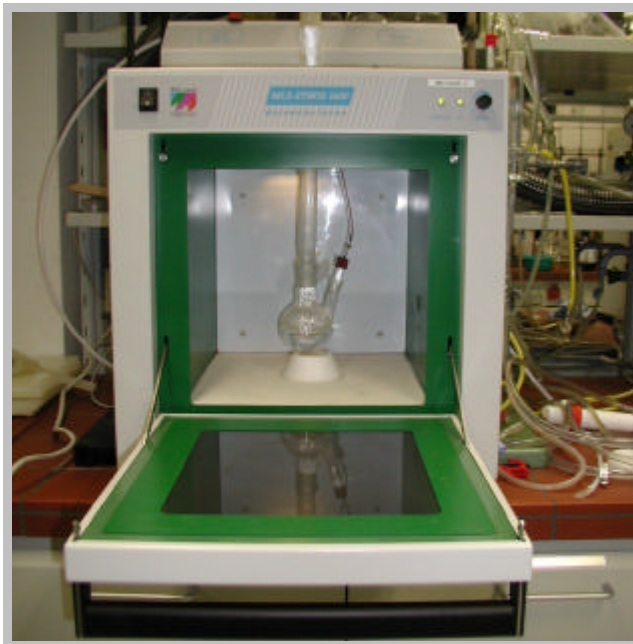
**Mikrowellenapparatur::** Mikrowellengerät MLS - ETHOS 1600, 100 mL Zweihalskolben, faseroptisches Thermometer, Steigrohr, Magnetrührer.

Zur Reaktion wurden Edukte und Katalysator vorgelegt und in der Mikrowelle 5 Minuten bestrahlt. Die dabei eingebrachte Energie reichte aus, um gebildetes Reaktionswasser aus der Reaktionsmischung auszutreiben. Im Anschluss an die Reaktion wurde das Reaktionsgemisch unter Rühren abgekühlt und das entstandene ölige Produkt mit Wasser gut gerührt. Der entstandene Niederschlag wurde abgesaugt und im Exsikkator bis zur Massekonstanz getrocknet. Das erhaltene Rohprodukt wurde aus einer 1:1 Mischung von Petrolether und Diethylether mittels Heizpilz umkristallisiert, nach der vollständigen Kristallisation im Eisbad abgesaugt und im Exsikkator getrocknet (A.1.2).



Entsprechend der Vorgehensweise bei der klassischen Reaktionsvariante wurde auch bei der Reaktion im Mikrowellenfeld der Energieverbrauch erfasst. Vergleichbar wurden die jeweiligen Aufarbeitungsschritte untersucht.

Die folgende Abbildung (Abb. 8) zeigt den Aufbau der verwendeten Mikrowellen-Apparatur.



**Abb. 8: Aufbau Apparatur - Mikrowelle**

### 3.2.3. Sachbilanzen Acetalisierung

Die in den jeweiligen Versuchen ermittelten Stoff- und Energieströme wurden in die in Abschnitt 3.1.2 beschriebenen drei Betrachtungsebenen aufgeteilt. Ebene Eins zeigt die Stoff- und Energieströme der Reaktion, Ebene Zwei beinhaltet den stofflichen sowie energetischen Input und Output der Aufarbeitung und Ebene Drei die Daten einer ganzheitlichen Betrachtung.

#### 3.2.3.1. Stoff- und Energieströme - Reaktionsebene

Die Grenzen dieser Betrachtung werden vom Einsatz der Edukte bis hin zum weiter aufzuarbeitenden Rohprodukt gezogen. Die Sachbilanz der Reaktionsebene beinhaltet alle Edukte und Hilfsstoffe sowie die generierten Abfälle. Die im Verlauf der Reaktion verbrauchte Energie ist ebenfalls enthalten. Nachfolgende Tabellen (Tab. 2, Tab. 3) zeigen die erfassten Daten.

Reaktion Input	Stoff- & Energiestrom	Ölbad	Heizpilz	Mikrowelle
	3-Nitrobenzaldehyd (g)	7,55	7,55	7,55
	Ethylenglykol (g)	3,42	3,42	3,42
	4-Toluolsulfonsäure * H <sub>2</sub> O (g)	0,40	0,40	0,40
	Cyclohexan (g)	70,11	70,11	-
	Kühlwasser (L)	66,00	61,00	-
	Versuchsdauer (min)	132,00	122,00	5,00
	Summe Energie (kJ)	1504,80	1069,20	277,20

Tab. 2: Stoff- und Energiebilanz - Reaktionsebene Input

Reaktion Output	Stoffstrom	Ölbad	Heizpilz	Mikrowelle
	Abfall (g)	70,51	70,51	0,40
	Abwasser (L)	66,00	61,00	-
Rohprodukt (g)	8,97	8,97	8,97	

Tab. 3: Stoff- und Energiebilanz - Reaktionsebene Output

### 3.2.3.2. Stoff- und Energieströme - Aufarbeitungsebene

In der zweiten Ebene werden die Stoffströme und der Energieverbrauch der Aufarbeitung zusammengefasst (Tab. 4, Tab. 5). Hierbei ist zu beachten, dass der Input der Hilfsstoffe komplett als Abfall anfällt und entsorgt werden muss.

Aufarbeitung Input	Stoff- & Energiestrom	Ölbad	Heizpilz	Mikrowelle
	Diethylether (g)	96,31	96,31	10,70
	Petrolether (g)	9,75	9,75	9,75
	Natriumhydrogensulfit (g)	0,44	0,44	-
	Natriumsulfat (g)	10,00	10,00	-
	Eis (g)	1000,00	1000,00	1000,00
	Kühlwasser (L)	4,00	4,00	4,00
	Summe Energie (kJ)	406,80	259,20	79,20

**Tab. 4: Stoff- und Energiebilanz - Aufarbeitung Input**

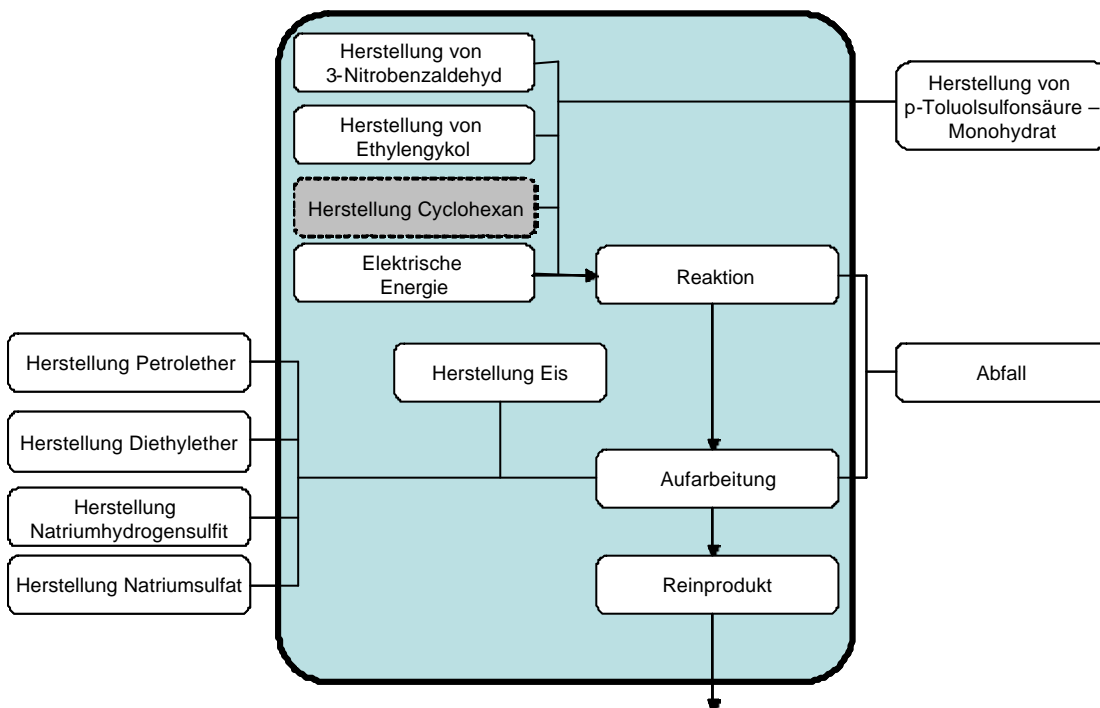
Reaktion Output	Stoffstrom	Ölbad	Heizpilz	Mikrowelle
	Abfall (g)	116,50	116,50	20,45
	Abwasser (L)	5,00	5,00	5,00
	Rohprodukt (g)	7,8	7,8	7,8

**Tab. 5: Stoff- und Energiebilanz - Aufarbeitung Output**

### 3.2.3.3. Stoff- und Energieströme - ganzheitliche Betrachtung

Die dritte Betrachtungsebene bildet die Sachbilanz im Kontext einer ganzheitlichen Betrachtung. Als funktionelle Einheit - das Maß für die Quantifizierung des Nutzens der zu untersuchenden Systeme - der Berechnungen, wurde die Ausbeute in den verschiedenen Varianten der säurekatalysierten Acetalisierung festgelegt. Der den Berechnungen zugrunde liegende Untersuchungsraum (Abb. 9) erstreckte sich von der Reaktion bis zur Aufarbeitung inklusive aller vorgelagerten Prozessschritte (soweit Daten darüber zur Verfügung standen oder generiert werden konnten).

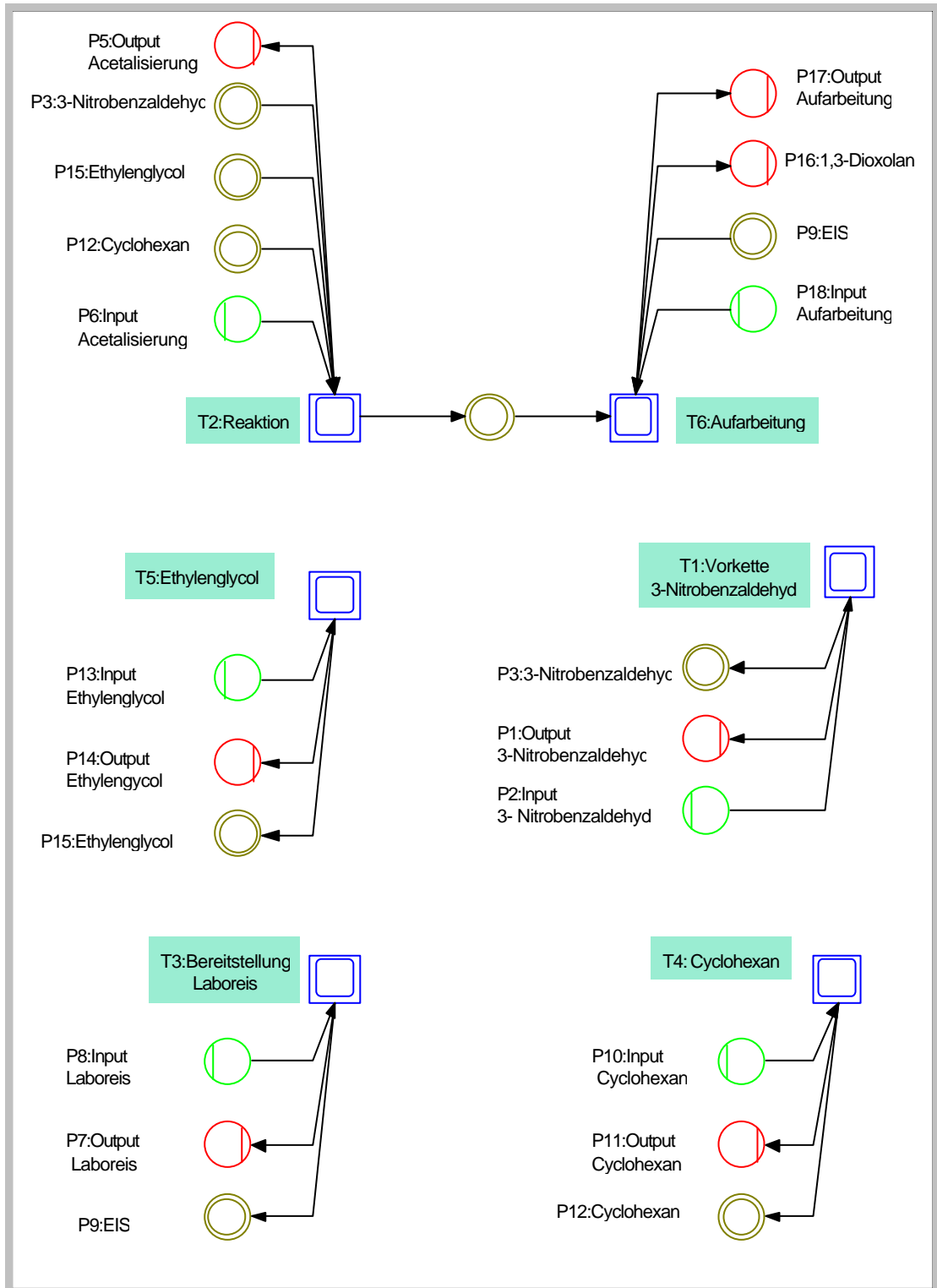
In diesem Zusammenhang ist darauf hinzuweisen, dass die Vorketten einiger Lösungsmittel (Diethylether, Petrolether) und Hilfsstoffe (Natriumhydrogensulfit, Natriumsulfat) sowie der weitere Verbleib der Abfälle aus Reaktion und Aufarbeitung unbekannt waren und deshalb bei den Berechnungen unberücksichtigt blieben. Das Ausklammern dieser Stoff- und Energieströme bei der ganzheitlichen Betrachtung kann zu Fehlern in der Aussage führen. Bei der Untersuchung der säurekatalysierten Acetalisierung ist jedoch nicht damit zu rechnen, dass die Aussage der Untersuchung signifikant verändert wird.



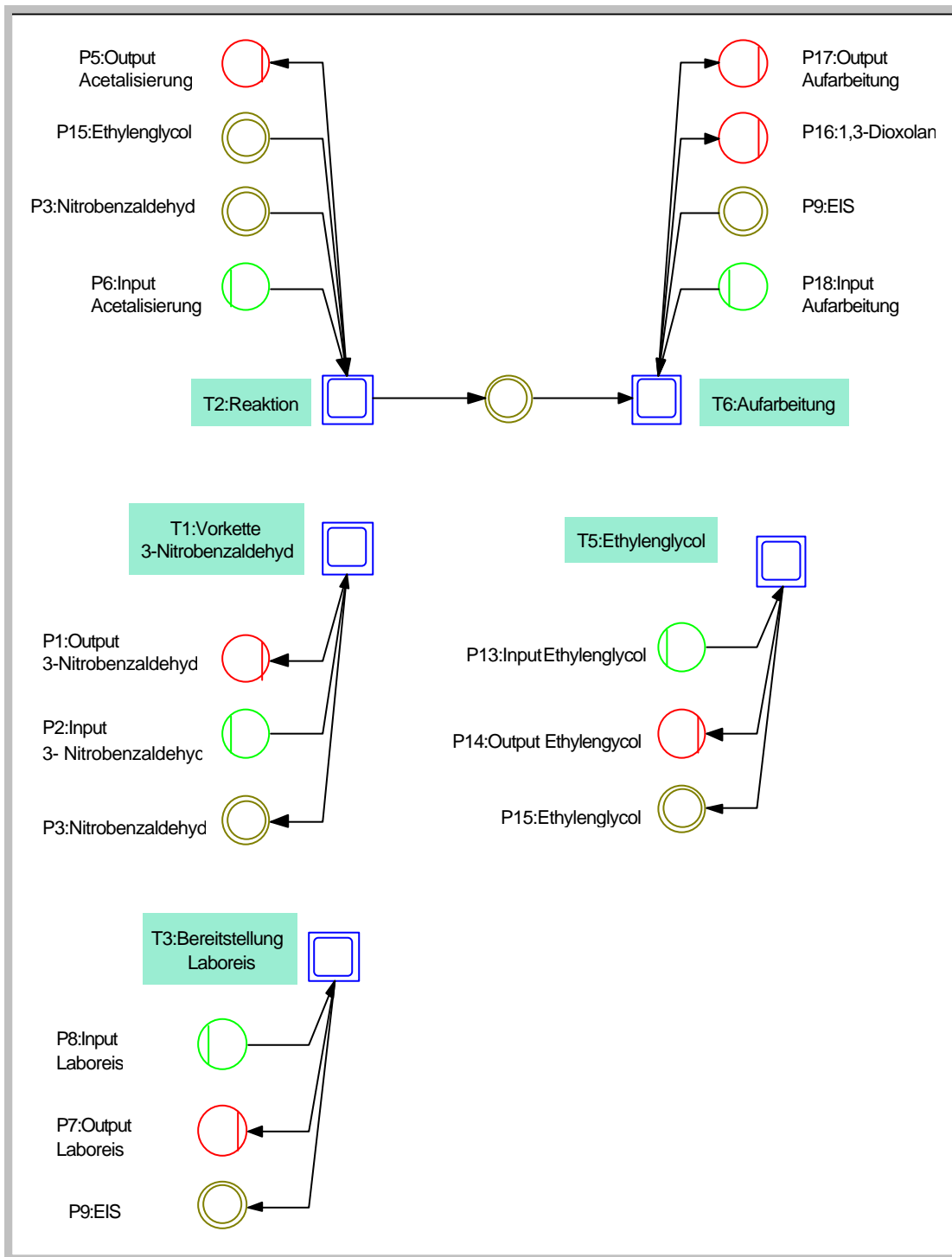
**Abb. 9: Untersuchungsraum ganzheitliche Betrachtung „Acetalisierung“**

Die Berechnungen der Stoff- und Energieströme im Untersuchungsraum wurden mit Hilfe der Bilanzierungssoftware Umberto (IFU und IFEU, 2001) durchgeführt. Umberto basiert auf dem Konzept der Stoffstromnetze, die nach den Prinzipien der Petri-Netztheorie aufgebaut werden. Die relevanten Zusammenhänge in einem untersuchten System werden als Netz von miteinander verbundenen Transitionen (Umwandlungsprozesse) und Stellen (Stoff- und Energielagern) modelliert. Das Stoffstromnetz für die Acetalisierung unter Verwendung von Heizpilz und Ölbad zeigt Abb. 10, Abb. 11 beinhaltet das Stoffstromnetz der Reaktion im Mikrowellenfeld.

Eine Zeichenerklärung der Netze sowie die zu den jeweiligen Stoffstromnetzen gehörenden Subnetze finden sich im Anhang (Kapitel A.3.2). Ebenso im Anhang befinden sich die Daten der ganzheitlichen Betrachtung (A.4).



**Abb. 10: Stoffstromnetz Acetalisierung - Heizmedium Heizpilz oder Ölbad**



**Abb. 11: Stoffstromnetz Acetalisierung - Energiezufuhr mit der Mikrowelle**

Exemplarisch für die Ergebnisse der ganzheitlichen Betrachtung wird hier der kumulierte Energieaufwand KEA (Tab. 6) und der Verbrauch an Primärenergieträgern (Tab. 7) der Synthesevarianten dargestellt.

Kumulierter Energieaufwand (KEA)	
Ölbad	23240,76 kJ
Heizpilz	21498,46 kJ
Mikrowelle	14286,67 kJ

**Tab. 6: Säurekatalysierte Acetalisierung - Kumulierter Energieaufwand KEA**

Energieträger (g)	Erdgas	Erdöl	Braunkohle	Steinkohle
Ölbad	107,38	56,55	568,17	152,33
Heizpilz	103,84	56,30	512,53	137,63
Mikrowelle	46,33	11,99	419,69	111,17

**Tab. 7: Säurekatalysierte Acetalisierung - Verbrauch Energieträger**

### 3.3. Nitrierung aromatischer Systeme

Die Nitrierung von Aromaten ist ein fester Bestandteil der Ausbildung von Chemikern. Dabei sind, in Abhängigkeit der Substituenten am aromatischen Ring, unterschiedliche Vorgehensweisen zur Nitrierung notwendig. Zur Schwachstellenanalyse wurden beispielhaft drei unterschiedliche Reaktionen aus dem „[nachhaltigen organischen Praktikum](#)“ (DBU, unveröffentlicht) ausgewählt. Neben der Nitrierung von Benzaldehyd waren dies die Nitrierung von Toluol und die Phenolnitrierung. Entsprechend dem Vorgehen bei der Untersuchung der säurekatalysierten Acetalisierung von 3-Nitrobenzaldehyd, wurden auch bei der Betrachtung der Nitrierungen die Stoffstrom- und Energieverbrauchsdaten erfasst und in den beschriebenen drei Ebenen aufbereitet. Die Grenzen der Betrachtung wurden entsprechend dem Vorgehen bei der säurekatalysierten Acetalisierung gezogen.

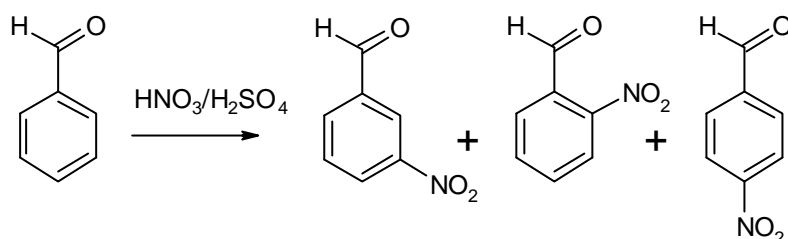
Reaktion:	Einsatz Edukte bis Rohprodukt
Aufarbeitung:	vom Rohprodukt zum Reinprodukt
Ganzheitliche Betrachtung:	Reaktion, Aufarbeitung, Vorketten

Als Nutzeinheit (funktionelle Einheit) für die Untersuchung der Nitrierung der ausgewählten Aromaten wurde ein durchgeführter Praktikumsversuch mit einer Ansatzgröße von 100 mmol Edukt festgelegt. Bevor auf die Ergebnisse der Datensammlung eingegangen wird, sollen zunächst die durchgeführten Reaktionen genauer erläutert werden.



### 3.3.1. Nitrierung Benzaldehyd - Ebene Reaktion und Aufarbeitung

Benzaldehyd wird bei rund 15°C unter Einwirkung von Nitriersäure zu den in der nachfolgenden Abbildung (Abb. 12) gezeigten Isomeren 3-Nitrobenzaldehyd, 2-Nitrobenzaldehyd und 4-Nitrobenzaldehyd umgesetzt.



**Abb. 12: Reaktionsschema - Nitrierung von Benzaldehyd**

Dabei wird zunächst unter Eiskühlung die Nitriersäure aus Schwefel- und Salpetersäure hergestellt, in die Benzaldehyd anschließend eingetroppt wird. Diese Mischung wird nach einer Standzeit von 8 Stunden auf Eis gegossen und der entstehende Niederschlag abgesaugt. Der feuchte Rückstand wird in Methyl-tert-butylether (*MTBE*) aufgenommen und mit einer 5% igen NaHCO<sub>3</sub>-Lösung ausgeschüttelt. Die organische Phase wird dann über Natriumsulfat getrocknet und das Solvens am Rotationsverdampfer abdestilliert (A.2.1). Die Stoff- und Energiedaten der Reaktion und der Aufarbeitung zeigen folgende Tabellen (Tab. 8, Tab. 9).

Nitrierung Benzaldehyd					
Reaktion Input	Schwefelsäure (g)	163,85	Reaktion Output	Rohprodukt (g)	13,70
	Salpetersäure (g)	67,64		Abfall (g)	228,44
	Benzaldehyd (g)	10,66		Abwasser (g)	1000,00
	Eis (g)	1000,00			
	Energie (kJ)	100,08			

**Tab. 8: Nitrierung von Benzaldehyd - Reaktion**

Nitrierung Benzaldehyd					
Aufarbeitung Input	Rohprodukt (g)	13,70	Aufarbeitung Output	Reinprodukt (g)	6,50
	Natriumhydrogencarbonat (g)	6,25		Abfall (g)	1130,85
	Natriumsulfat (g)	20,00			
	MTBE (g)	111,15			
	Wasser (g)	400,00			
	Petrolether (g)	23,24			
	Toluol (g)	13,01			
	Eis (g)	550,00			
Energie (kJ)	351,36				

Tab. 9: Nitrierung von Benzaldehyd - Aufarbeitung

### 3.3.2. Nitrierung Toluol - Ebene Reaktion und Aufarbeitung

Die Nitrierung von Toluol ist eine weitere Variante der Nitrierung von Aromaten. Toluol setzt sich dabei unter Einwirkung von Nitriersäure hauptsächlich zu den in folgender Abbildung gezeigten Produkten um (Abb. 13):

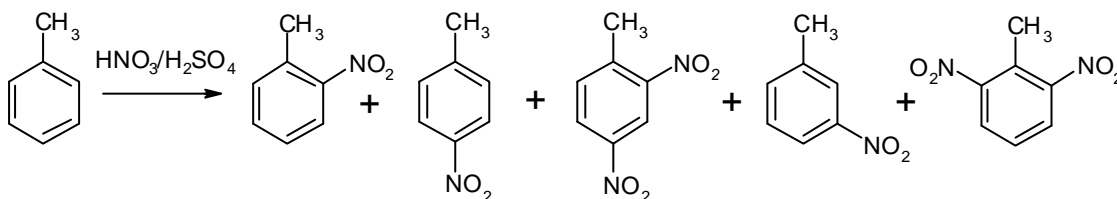


Abb. 13: Reaktionsschema - Nitrierung von Toluol

Dazu wird zu der unter Eiskühlung hergestellten Nitriersäure das wasserfreie Toluol im Eis/Kochsalzbad langsam zugetropft und nach Beendigung der Zugabe zwei Stunden gerührt. Die auf Eis gegossene Reaktionsmischung wurde mit Cyclohexan ausgeschüttelt, die organische Phase anschließend neutralisiert, gewaschen und getrocknet. Der nach Abziehen des Lösungsmittels verbleibende ölige Rückstand wurde im Vakuum destilliert und die gewonnenen Fraktionen jeweils umkristallisiert (A.2.2). Den erfassten Stoff- und Energiefluss zeigen Tab. 10 bzw. Tab. 11.

Nitrierung Toluol				
Reaktion Input	Natrium (g)	2,00	Reaktion Output	
	Toluol (g)	9,19		
	Salpetersäure (g)	15,93		
	Schwefelsäure (g)	23,01		
	Natriumchlorid (g)	200,00		
	Eis (g)	600,00		
	Energie (kJ)	33,66		
			Nitrotoluole roh (g)	48,13
			Abwasser (g)	800,00
			Natrium (g)	2,00

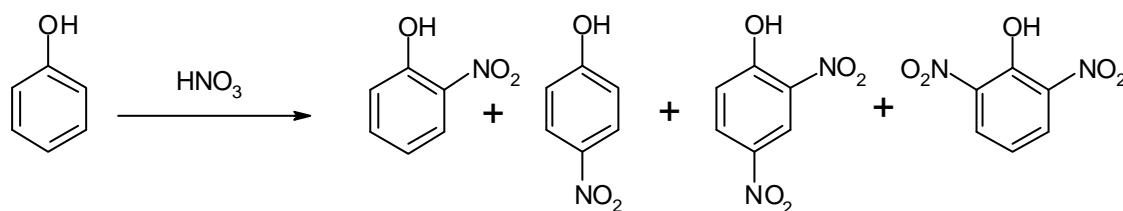
**Tab. 10: Nitrierung von Toluol - Reaktion**

Nitrierung Toluol				
Aufarbeitung Input	Nitrotoluole roh (g)	48,16	Aufarbeitung Output	
	Cyclohexan (g)	46,74		
	NaHCO <sub>3</sub> (g)	3,20		
	Natriumsulfat (g)	15,00		
	Ethanol (g)	7,89		
	Eis (g)	50,00		
	Wasser (g)	30,00		
	Energie (kJ)	1514,52		
			2- Nitrotoluol (g)	6,50
			2,4-Nitrotoluol (g)	0,58
			4- Nitrotoluol (g)	0,90
			Abfall (g)	193,01

**Tab. 11: Nitrierung von Toluol - Aufarbeitung**

### 3.3.3. Nitrierung Phenol - Ebene Reaktion und Aufarbeitung

Die letzte untersuchte Variante der Nitrierung von Aromaten stellt die Nitrierung von Phenol dar. Bei dieser Reaktion wird Phenol unter Einwirkung von Salpetersäure zu unterschiedlichen Nitrierungsprodukten umgesetzt (Abb. 14).



**Abb. 14: Reaktionsschema - Nitrierung von Phenol**

Dazu wird Phenol in die gekühlte Salpetersäure (33 % ig) langsam eingetroppt. Nach der Zugabe wird die Reaktionsmischung eine Stunde nachgerührt, die wässrige Phase abgossen und das Reaktionsprodukt gewaschen.

Anschließend wird die Reaktionsmischung mit Wasserdampf destilliert und o-Nitrophenol nach Kristallisation abgesaugt. Der Destillationsrückstand wird umkristallisiert und das ausgefallene p-Nitrophenol wiederum abgesaugt.

Nitrierung Phenol					
Reaktion Input	Phenol (g)	9,41	Reaktion Output	2- Nitrophenol (g)	4,00
	Salpetersäure (g)	31,56		4-Nitrophenol (g)	4,00
	Eis (g)	1000,00		Abfall (g)	84,97
	Wasser (g)	52,00		Abwasser (g)	1000,00
	Energie (kJ)	75,60			

**Tab. 12: Nitrierung von Phenol - Reaktion**

Nitrierung Phenol					
Aufarbeitung Input	2- Nitrophenol (g)	4,00	Aufarbeitung Output	2- Nitrophenol (g)	3,68
	4- Nitrophenol (g)	4,00		4-Nitrophenol (g)	1,10
	Salzsäure (g)	40,00		Abfall (g)	693,72
	Aktivkohle (g)	0,50		Abwasser (g)	400,00
	Eis (g)	400,00			
	Wasser (g)	650,00			
	Energie (kJ)	670,32			

**Tab. 13: Nitrierung von Phenol - Aufarbeitung**

### **3.3.4. Nitrierung Aromaten - Ebene ganzheitliche Bilanzierung**

Wie in Kapitel 3.3 bereits beschrieben, wurden die Grenzen der ganzheitlichen Betrachtung der Nitrierungen von der Exploration der Rohstoffe bis hin zum fertig aufgearbeiteten Produkt gezogen. Die Entsorgung der Abfallprodukte wurde in dieser Arbeit nicht mit in die Untersuchung einbegriffen. Hintergrund dieser Vorgehensweise ist die aufwändige Analysenprozedur zum Nachweis der gebildeten Stoffe, die im Rahmen dieser Arbeit nicht geleistet werden konnte. Auch die Tatsache, dass zurzeit keine Daten über die Umweltwirkungen einer großen Zahl der, zumindest theoretisch gebildeten, Reaktionsprodukte vorhanden sind und diese mit den gegebenen Mitteln auch nicht generiert werden konnten, führte zum Ausklammern der jeweiligen Entsorgungskette bei der Betrachtung. Die ungenügende Datenlage war ebenfalls ein Abschneidekriterium für die Stoff- und Energieströme von, in Reaktion und Aufarbeitung benötigten, Auxiliaren. Zwar waren Daten für einige Stoffe bekannt, um jedoch einen Vergleich zu gewährleisten, wurden Hilfsstoffe generell bei der Untersuchung nicht mit einbezogen. Das Abschneiden von Stoffströmen birgt die Gefahr, dass Bilanzergebnisse verfälscht werden. Die Teile der Bilanzen, die in dieser Arbeit zur Schwachstellenanalyse herangezogen werden, bleiben von diesen Fehlern weitgehend unberührt, die aus den Ergebnissen abgeleiteten Verbesserungspotenziale sind daher belastbar.

Zur Bilanzierung wurden die Stoff- und Energieströme der jeweiligen Reaktion, vergleichbar mit dem Vorgehen bei der Untersuchung zur säurekatalysierten Acetalisierung von 3-Nitrobenzaldehyd, unter Verwendung der Bilanzierungssoftware Umberto (IFU und IFEU, 2001) modelliert. Nachfolgend sind die erstellten Stoffstromnetze der Nitrierung von Benzaldehyd (Abb. 15), der Nitrierung von Toluol (Abb. 16) und der Nitrierung von Phenol (Abb. 17) gezeigt.

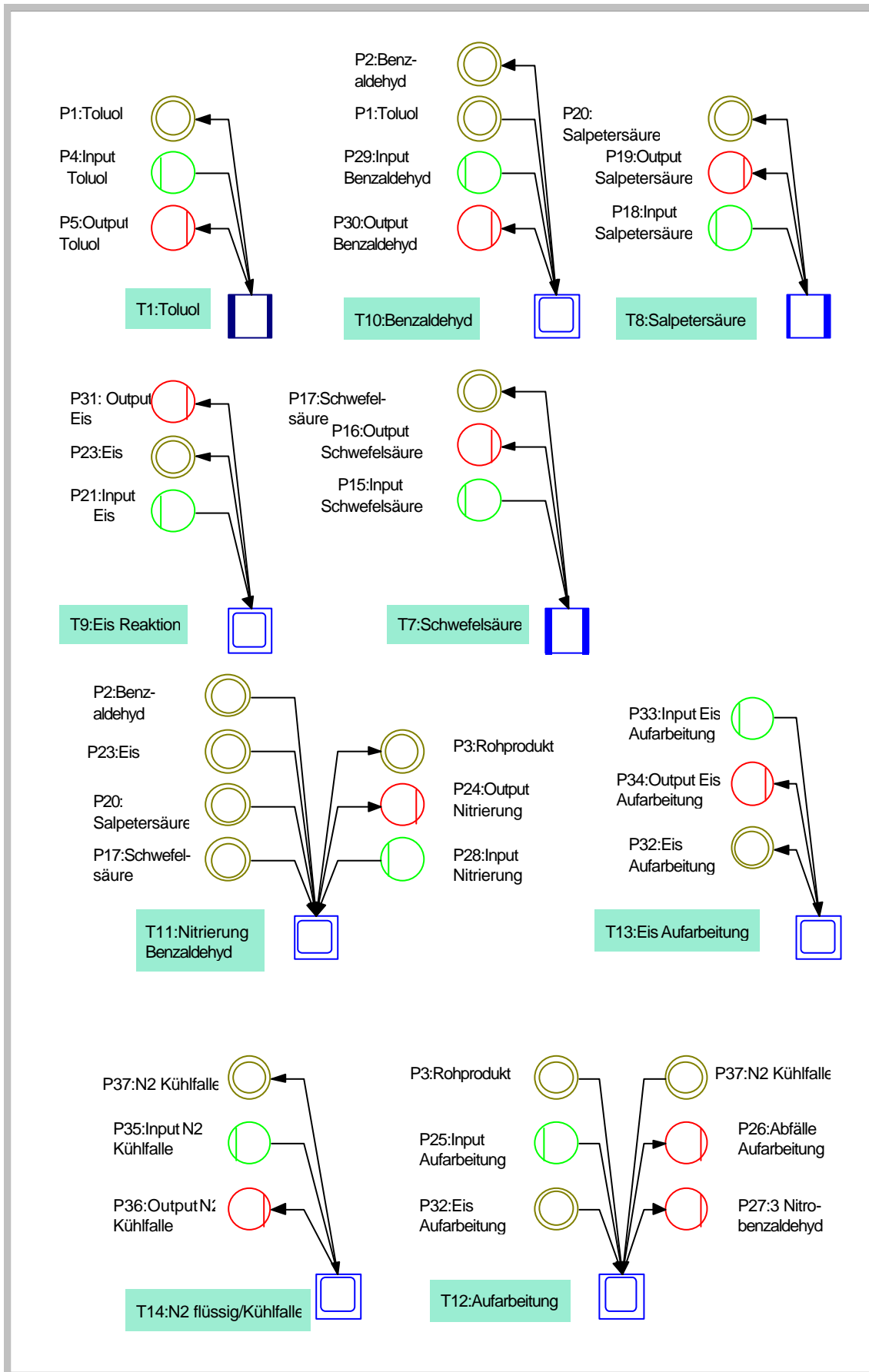


Abb. 15: Stoffstromnetz Nitrierung von Benzaldehyd

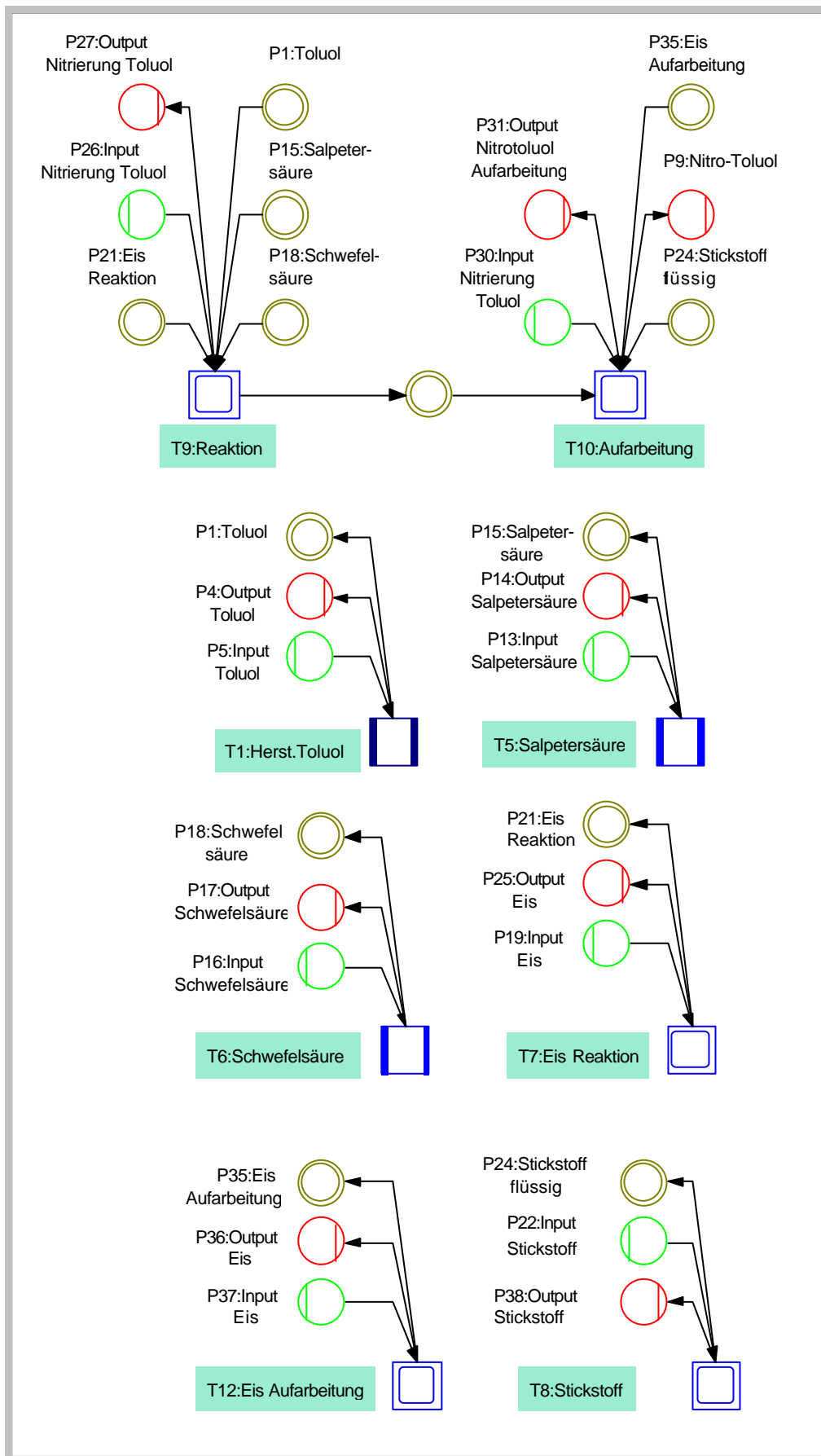


Abb. 16: Stoffstromnetz Nitrierung von Toluol

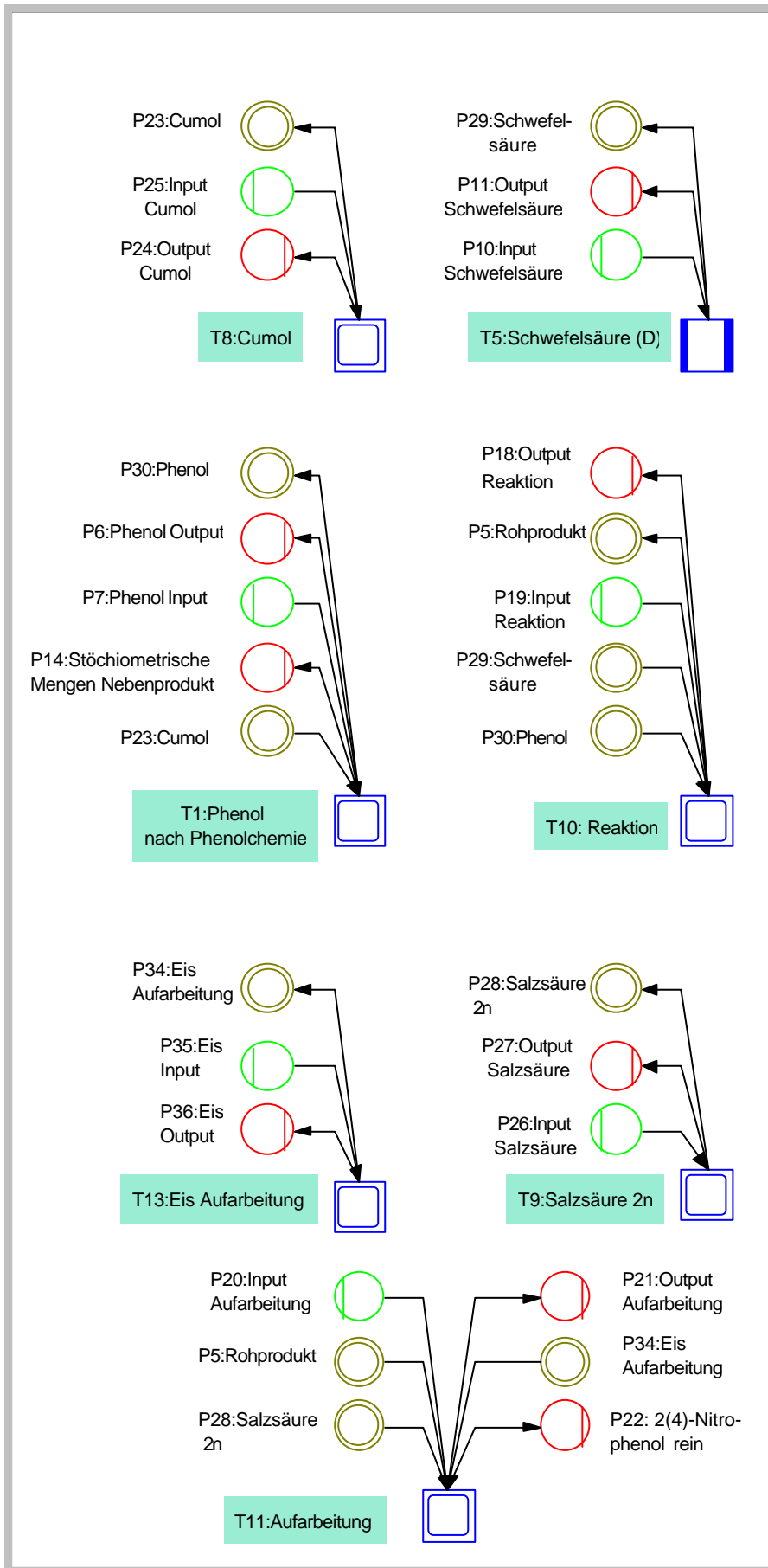


Abb. 17: Stoffstromnetz - Nitrierung von Phenol



Aufgrund des Datenumfanges der Sach- und Wirkungsbilanz wird in diesem Kapitel nur eine Auswahl der für die Untersuchungen wichtigen Bereiche - Kumulierter Energieaufwand (KEA) und Verbrauch Primärenergieträger - der Nitrierung von Aromaten aufgeführt. Der vollständige Datensatz der Nitrierung von Benzaldehyd, Toluol und Phenol befindet sich im Anhang (Kapitel A.5). Bei der Berechnung des kumulierten Energieaufwands der Nitrierung von Aromaten wird die Energie aus der Erzeugung der Edukte, die der Reaktion zugeführte Energie und die bei den jeweiligen Aufarbeitungsschritten verbrauchte Energie zusammengefasst. Die zur Bereitstellung des benötigten Eises verbrauchte Energie ist im kumulierten Energieaufwand ebenfalls enthalten. Die Stoff- und Energieströme zur Herstellung der während der Aufarbeitung verbrauchten Hilfsstoffe sind, um eine Vergleichbarkeit der verschiedenen Reaktionen zu gewährleisten, im berechneten kumulierten Energieaufwand nicht enthalten. Diese Vorgehensweise war aufgrund unzureichend verfügbarer Daten bei einigen der verwendeten Stoffe notwendig. Folgende Tabellen zeigen den kumulierten Energieverbrauch der verglichenen Reaktionen (Tab. 14 und Tab. 15) bzw. den Anteil der zur Energieerzeugung und zur Herstellung der Stoffe notwendigen Primärenergieträger (Tab. 16).

KEA gesamt - Nitrierung Aromaten	
Benzaldehyd	6522,73 kJ
Toluol	4675,85 kJ
Phenol	5095,38 kJ

**Tab. 14: Kumulierter Energieaufwand (KEA) Nitrierung von Aromaten - Gesamt**

KEA Syntheseabschnitte - Nitrierung Aromaten				
	Benzaldehyd	Toluol	Phenol	
Edukte	1425,43	737,19	1150,71	kJ
Reaktion	1475,55	1064,20	1408,90	kJ
Aufarbeitung	3621,75	2874,45	2535,77	kJ

**Tab. 15: Kumulierter Energieaufwand (KEA) Syntheseabschnitte - Nitrierung Aromaten**

	Benzaldehyd	Toluol	Phenol
Braunkohle	139,64	215,01	124,49 g
Erdgas	39,53	23,70	22,25 g
Erdöl	19,41	7,50	12,13 g
Steinkohle	37,42	57,01	33,98 g

**Tab. 16: Verbrauch Primärenergieträger Nitrierung Aromaten - gesamt**

Mit Hilfe der Sachbilanzdaten aus der Untersuchung der verschiedenen Varianten der säurekatalysierten Acetalisierung (Kapitel 3.2) und den Daten der verschiedenen Nitrierungen von Aromaten (Kapitel 3.3) soll nun eine Analyse der inhärenten Schwachstellen von Laborreaktionen durchgeführt werden.

### **3.4. Schwachstellenanalyse**

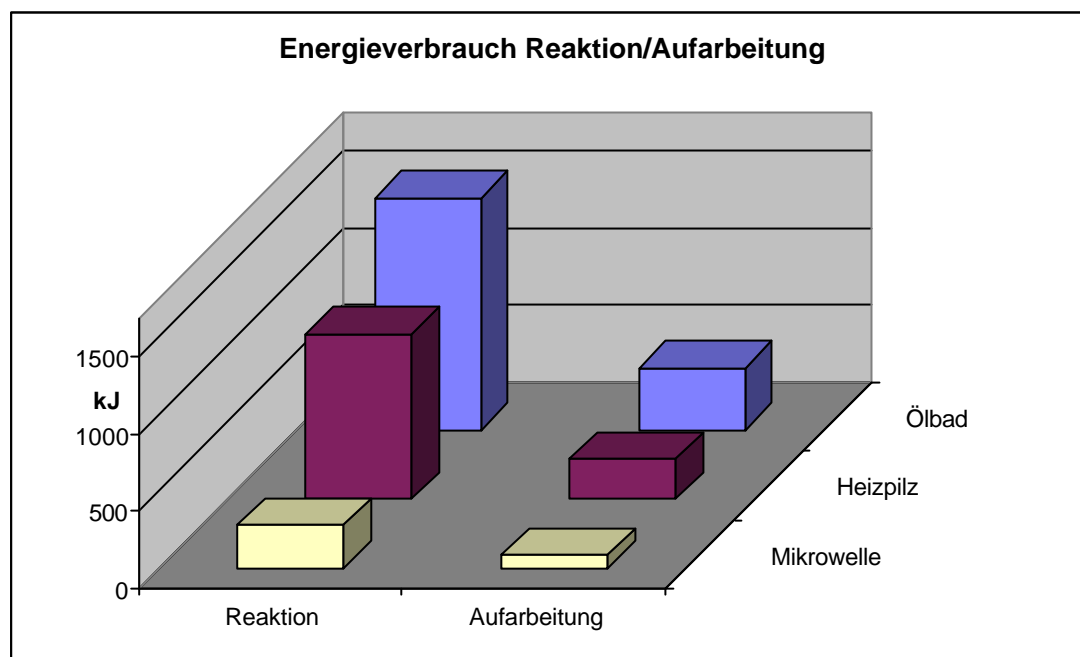
Die Aufdeckung allgemeiner Schwachstellen von Laborreaktionen ist ein wichtiger Schritt, um die vom Verfasser für diese Arbeit gesteckten Ziele zu erreichen. Anhand der Sachbilanzen der Reaktionen und der Aufarbeitung der betrachteten Versuche, sollen die wesentlichen Problembereiche der Laborsynthesen nachfolgend erfasst werden. Die Ergebnisse der ganzheitlichen Betrachtung sollen im Anschluss zeigen, ob und wenn ja in welcher Weise sich diese identifizierten Schwachstellen bei dieser Betrachtungsweise ändern.

#### **3.4.1. Schwachstelle Energieverbrauch**

Die aus der Nutzung bzw. dem Verbrauch von Energie resultierenden Umweltbelastungen, z.B. die Emissionen aus der Erzeugung elektrischer oder thermischer Energie durch Verbrennung fossiler Energieträger, dominieren in vielen Fällen das Ergebnis von Ökobilanzen (Beck *et al.*, 2000). Deshalb wird eine Schwachstellenanalyse zuerst im Bereich Energie durchgeführt.

### 3.4.1.1. Acetalisierung - Reaktion und Aufarbeitung

Betrachtet man die Sachbilanzen (Tab. 2) der untersuchten Varianten zur säurekatalysierten Acetalisierung von 3-Nitrobenzaldehyd mit Ethylenglykol, sind besonders die Unterschiede im Energieverbrauch augenfällig (Abb. 18).



**Abb. 18: Energieverbrauch Reaktion/Aufarbeitung - Acetalisierung**

Der Energieverbrauch der Reaktion unter Verwendung eines Heizpilzes ist im Vergleich zur Reaktion unter Verwendung eines Ölbades um den Anteil von rund 29 % geringer. Die Mikrowellen assistierte Reaktion gar rund 82 %. Da jeweils die gleichen Edukte umgesetzt wurden, lassen sich diese großen Unterschiede der Reaktionsvarianten im Energieverbrauch nur schwer erklären. Könnte im Vergleich der klassischen Vorgehensweise bei der Wärmezufuhr mit der Mikrowellensynthese die kürzere Reaktionszeit eine Rolle spielen, lässt sich zwischen der Umsetzung mit Heizpilz und Ölbad als Energiequelle eine zeitliche Divergenz nicht ausmachen. Ebenso kann das Fehlen eines Schlepptittels bei der Mikrowellenreaktion nicht die Ursache sein, da beide klassischen Synthesvarianten jeweils diesen Hilfsstoff einsetzen. Die Divergenzen im Energieverbrauch müssen daher eine andere Ursache haben.

Mit Hilfe von Infrarotaufnahmen der Versuchsanordnungen (Abb. 19, Abb. 20) konnten die Unterschiede der zu vergleichenden Varianten aufgedeckt werden.

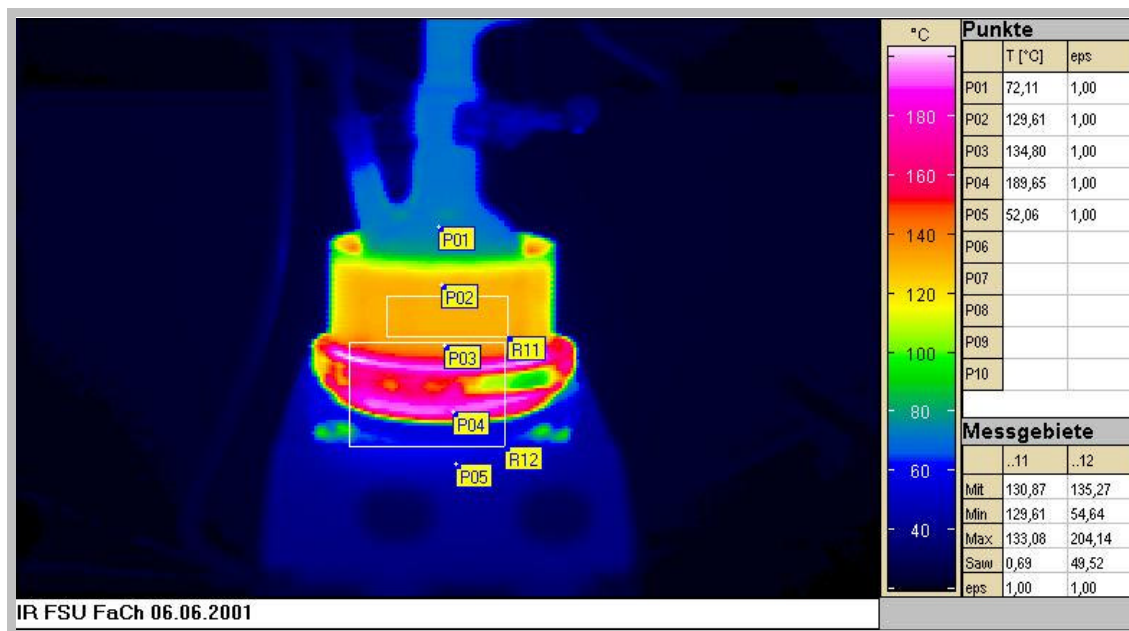


Abb. 19: Infrarotaufnahme - säurekatalysierte Acetalisierung - Apparatur Ölbad

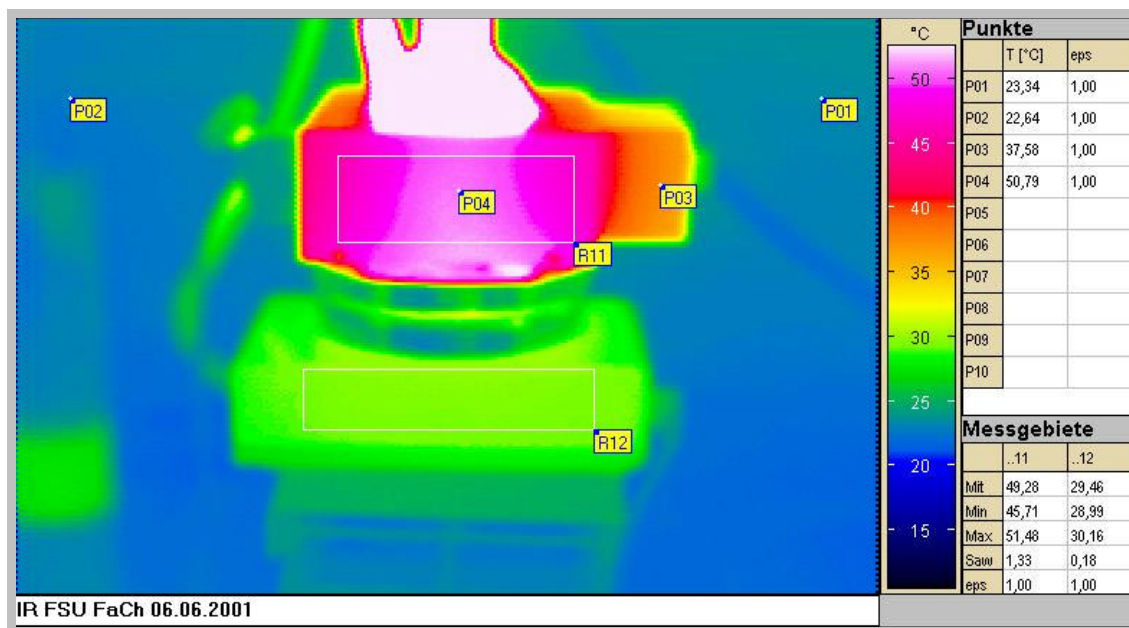


Abb. 20: Infrarotaufnahme - säurekatalysierte Acetalisierung - Apparatur Heizpilz

Der Energieverlust eines Körpers an das ihn umgebende Medium findet überwiegend durch konvektive Prozesse statt. Wärmestrahlung spielt in bei den untersuchten Reaktionen eine deutlich geringe Rolle. Nach der Gleichung für den Wärmeübergang (Grassmann *et al.*, 1997) nimmt die konvektiv abgegebene Energiemenge  $Q_K$  mit steigender Temperaturdifferenz zwischen Körper und umgebendem Medium zu.

$$Q_K = \alpha \cdot F \cdot (T_{\text{Körper}} - T_{\text{Umgebung}}) \cdot \Delta t$$

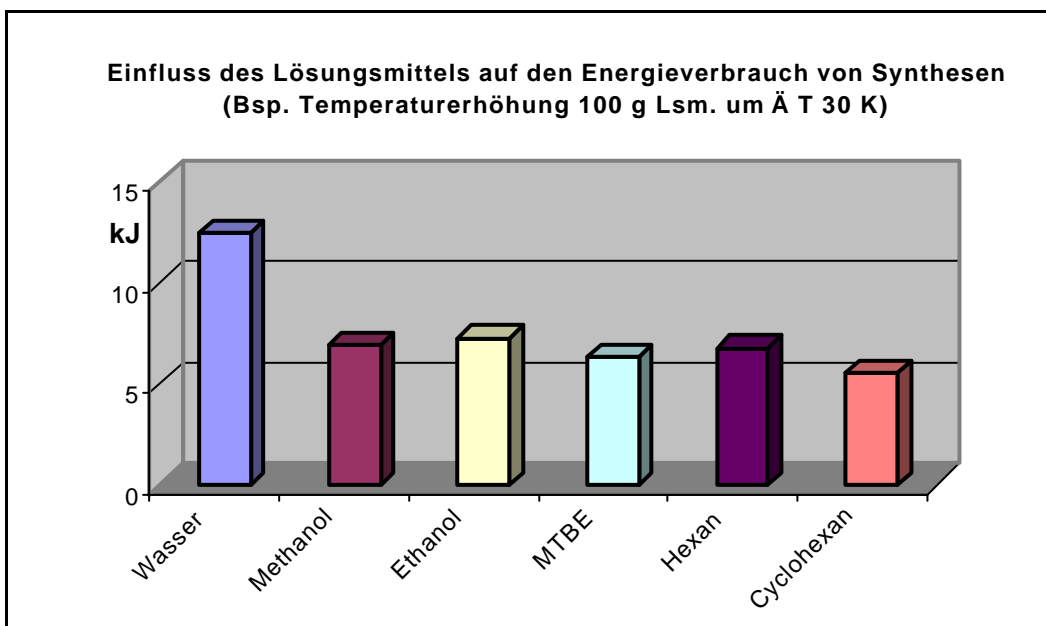
Vor diesem Hintergrund ergibt sich, dass der Vorteil der „Mikrowellensynthese“ gegenüber den klassischen Reaktionsvarianten seine Ursache in der kürzeren Reaktionszeit hat. Die Energieverluste aufgrund von Wärmestrahlung und Konvektion fallen bei kürzeren Reaktionszeiten deutlich geringer aus.

Die Unterschiede im Energieverbrauch zwischen Heizpilz und Ölbad lassen sich ebenfalls über oben genannte Gleichungen erklären. Aufgrund der unterschiedlichen Temperaturen der Heizgeräteoberflächen werden verschieden große Mengen Energie an die Umgebung abgegeben. Um diese „Verlustenergie“ wieder zu ersetzen, muss dem Netz mehr elektrischer Energie entnommen werden. Aus den Messergebnissen der Infrarotaufnahmen wurden die Energieverluste der beiden Versuchsanordnungen näherungsweise bestimmt (A.6). Bei der Verwendung eines Heizpilzes werden rund 50 %, bei der Verwendung eine Ölbad gar rund 85 % der aus dem Netz entnommenen Energie an die Umgebung abgegeben. Die Unterschiede im Energieverlust der beiden klassischen Versuchsanordnungen bzw. die unterschiedliche Temperatur der Oberfläche der Heizmedien lassen sich mit der besseren Isolation der verwendeten Heizhaube begründen.

Neben den aus den Ergebnissen der Sachbilanzen ermittelten Faktoren gibt es noch weitere Parameter, die Einfluss auf den Energieverbrauch einer Synthese nehmen. Dieser Einfluss kann sowohl indirekt z.B. über die Festlegung der Reaktionstemperatur aber auch direkt erfolgen und meist nicht ohne weiteres aus den Ergebnissen der Sachbilanz abgeleitet werden. Die Wahl des richtigen Lösungsmittels und der Lösungsmittelmenge sind solche Faktoren. Für Reaktionen stehen dem Anwender zahlreiche unterschiedliche Lösungsmittel zur Verfügung. Aus diesem Angebot sind - aus physikalisch-chemischer Sicht - meist mehrere Lösungsmittel zum Einsatz in einer Reaktion geeignet. Aufgrund des oben bereits angesprochenen Einflusses der Reaktionstemperatur auf den Energieverlust durch Wärmeleitung und Wärmestrahlung ist es daher notwendig, Lösungsmittel auch unter dem Gesichtspunkt ihres Siedepunktes auszusuchen. Dieser sollte möglichst nahe an der kinetisch notwendigen Reaktionstemperatur liegen, um unnötige Energieverluste zu vermeiden. Bei der Wahl des richtigen Lösungsmittels ist weiterhin zu beachten, dass dessen spezifische Wärmekapazität möglichst gering ist. Nach

$$Q = \sum m_i * c_{p_i} * \Delta T_i$$

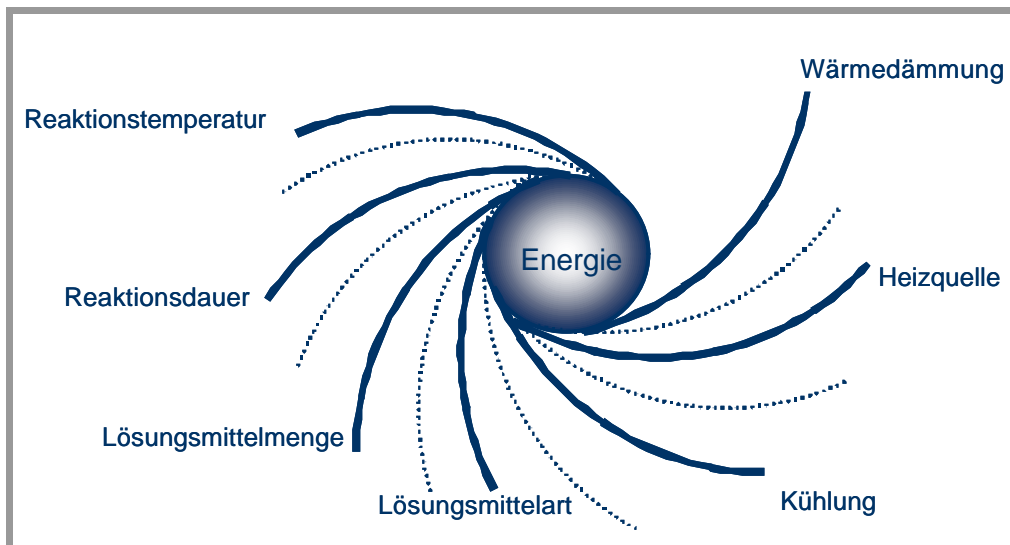
hat diese direkten Einfluss auf den Energieverbrauch.



**Abb. 21: Lösungsmiteleinfluss auf den theoretischen Energieverbrauch von Synthesen**

Die Unterschiede im Energieverbrauch einer Reaktion, die nur durch die Variation der Wärmekapazität eines Lösungsmittels zustande kommen können, zeigt (Abb. 21). Aufgrund der gleichen Zusammenhänge beim Aufheizen von Medien, hat auch die Masse des eingesetzten Lösungsmittels in Bezug auf den Energieverbrauch der Reaktion eine Bedeutung. Hier ist darauf zu achten, dass die eingesetzte Lösungsmittelmenge den Erfordernissen angepasst ist und nicht im großen Überschuss zugegeben wird.

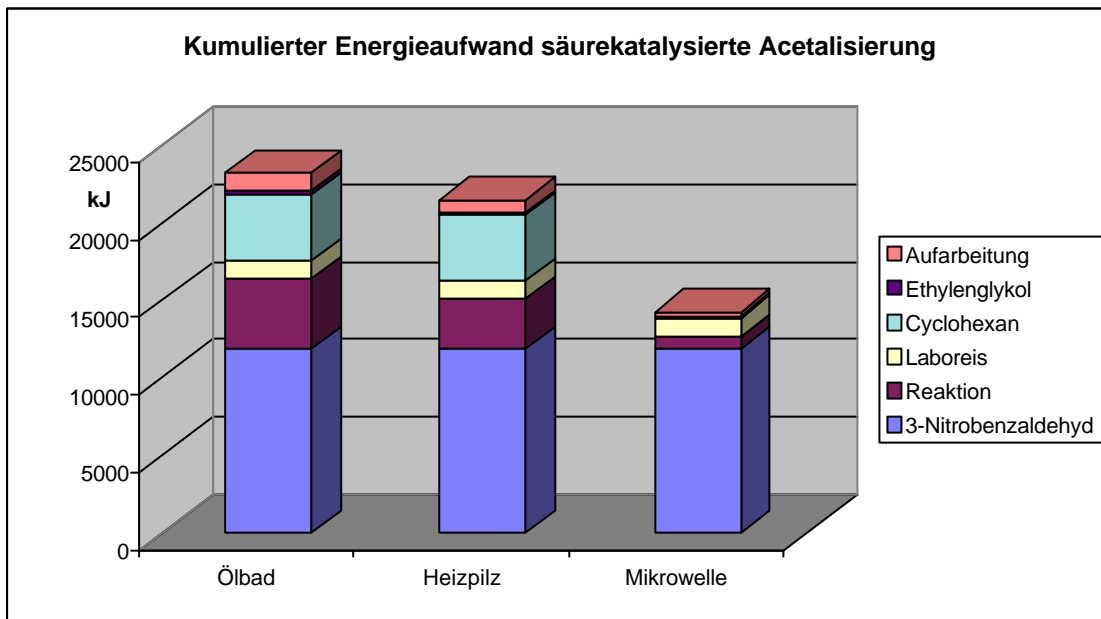
Eine weitere, in dieser Arbeit nicht untersuchte Schwachstelle, wird im Energieverbrauch der Kühlung von Laborreaktionen vermutet. Bei zunehmendem Wechsel von Wasserkühlung hin zu Kryostaten können wohl große Mengen Wasser eingespart werden. Diese Einsparung wird allerdings mit einem deutlich höheren Energieverbrauch bezahlt. Bei der sachgerechten Kühlung liegt wohl ein großes Potenzial für Einsparungen. Weitere Arbeiten müssen zeigen, wie groß dieses Potenzial ist. Alle genannten Einflussgrößen des Energieverbrauchs zeigt zusammenfassend folgende Abbildung (Abb. 22).



**Abb. 22: Parameter mit Einfluss auf den Energieverbrauch von Laborsynthesen**

### 3.4.1.2. Acetalisierung - ganzheitliche Betrachtung

Ähnliche Verhältnisse wie bei den Sachbilanzen der Reaktion und Aufarbeitung lassen sich beim Energieverbrauch der säurekatalysierten Acetalisierung bei ganzheitlicher Betrachtungsweise feststellen. Allerdings sind die Unterschiede zwischen der Reaktion im Mikrowellenfeld und den klassischen Variationen nun weniger deutlich erkennbar (Abb. 23).



**Abb. 23: Kumulierter Energieaufwand - säurekatalysierte Acetalisierung**

Der kumulierte Energieaufwand der Reaktionsvariante Heizpilz liegt bei der ganzheitlichen Betrachtung nun nur noch rund 8 % (vgl. Ebene Reaktion 29 %) unter dem Energieaufwand der Ölbadreaktion, der Energieaufwand der Mikrowellenreaktion rund 39 % (vgl. Ebene Reaktion 82 %). Es zeigt sich, dass unter Miteinbeziehung der Vorketten von Edukten und Hilfsstoffen diese die Energiebilanz der säurekatalysierten Acetalisierung dominieren. Die Beiträge der Edukte einer Laborreaktion zum kumulierten Energieaufwand lassen sich nur vermindern, indem man die Ansatzgröße minimiert. Dies ist jedoch gerade bei der praktischen Ausbildung, bei der die Bearbeiter den Umgang mit Chemikalien und Geräten erlernen sollen, nicht immer sinnvoll bzw. erwünscht.

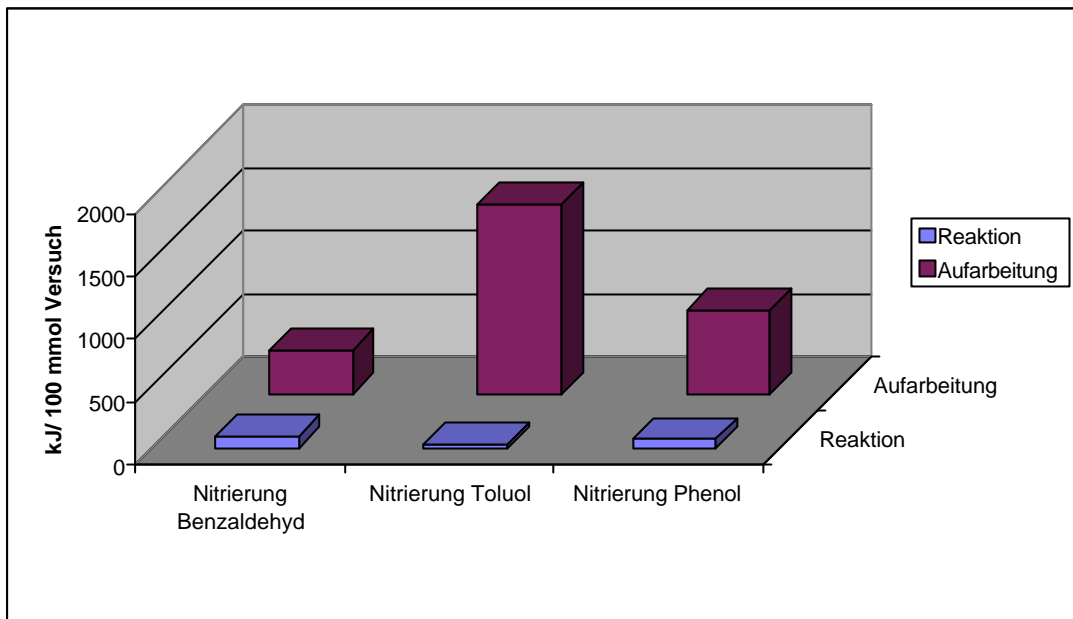


Die Ansatzgröße ist daher auf eine zweckmäßige Größe zu reduzieren, die verwendete Masse der Hilfsstoffe bei Reaktion und Aufarbeitung auf das gerade notwendige Maß zu beschränken. Dadurch kann der Beitrag zum kumulierten Energieaufwand einer Reaktion vermindert werden. Weiterhin ist bei der Auswahl von Auxiliaren darauf zu achten, dass deren Rohstoff- und Energieverbrauch bei der Herstellung sowie die hervorgerufene Umweltlast klein ist. Gerade diese Forderung ist schwer realisierbar, da eine Auswahl des - aus Sicht der Umweltlast in den Vorketten - geeigneten Hilfsstoffes aufgrund fehlender oder unzureichend verfügbarer Daten meist sehr schwierig ist.

#### 3.4.1.3. Nitrierung von Aromaten - Reaktion und Aufarbeitung

Im Gegensatz zu den Untersuchungsergebnissen der säurekatalysierten Acetalisierung zeigen die bei den Nitrierungen erfassten Daten bei der Reaktion durchweg niedrigere Energieverbrauchswerte als bei der Aufarbeitung. Da die durchgeführten Nitrierungen alle exotherme Reaktionen waren, ist diese Tatsache jedoch kaum verwunderlich (Abb. 24). Das trotz der Exothermie der Reaktion Energie verbraucht wurde, wird später in anderem Zusammenhang (Kapitel 3.6.4) noch einmal von Interesse sein. Zunächst stehen aber die Ergebnisse der verschiedenen Nitrierungen im Blickpunkt.

Bei der Reaktion wird Energie nur durch das Rühren der Reaktionsmischung verbraucht. Einfluss auf die Höhe des Energieverbrauches nehmen hier die Reaktions- und Nachreaktionszeit sowie die Rührgeschwindigkeit, die in Abhängigkeit der Viskosität des Mediums eingestellt wird. Die Rührgeschwindigkeit lässt sich, will man eine gute Durchmischung der Reaktionspartner erreichen, nur wenig beeinflussen. Außerdem nimmt der Verfahrensschritt Rühren mit einem Energieverbrauch von 0,2 kJ bis 0,7 kJ pro Minute nur einen kleinen Anteil am Gesamtenergieverbrauch ein. Entsprechend der Untersuchungsergebnisse aus Kapitel 3.4.1.1 kann die Reaktionsdauer bei den Nitrierungen von Aromaten ebenfalls als Schwachstelle identifiziert werden. Aufgrund des niedrigen Energieverbrauches des Magnetrührers, hat jedoch die Reaktionsdauer bei den Nitrierungen einen deutlich geringeren Einfluss auf den Gesamtenergieverbrauch als beispielsweise die Aufarbeitung. Hier gibt es eindeutige Unterschiede im Energieverbrauch der Reaktionen (Abb. 24).



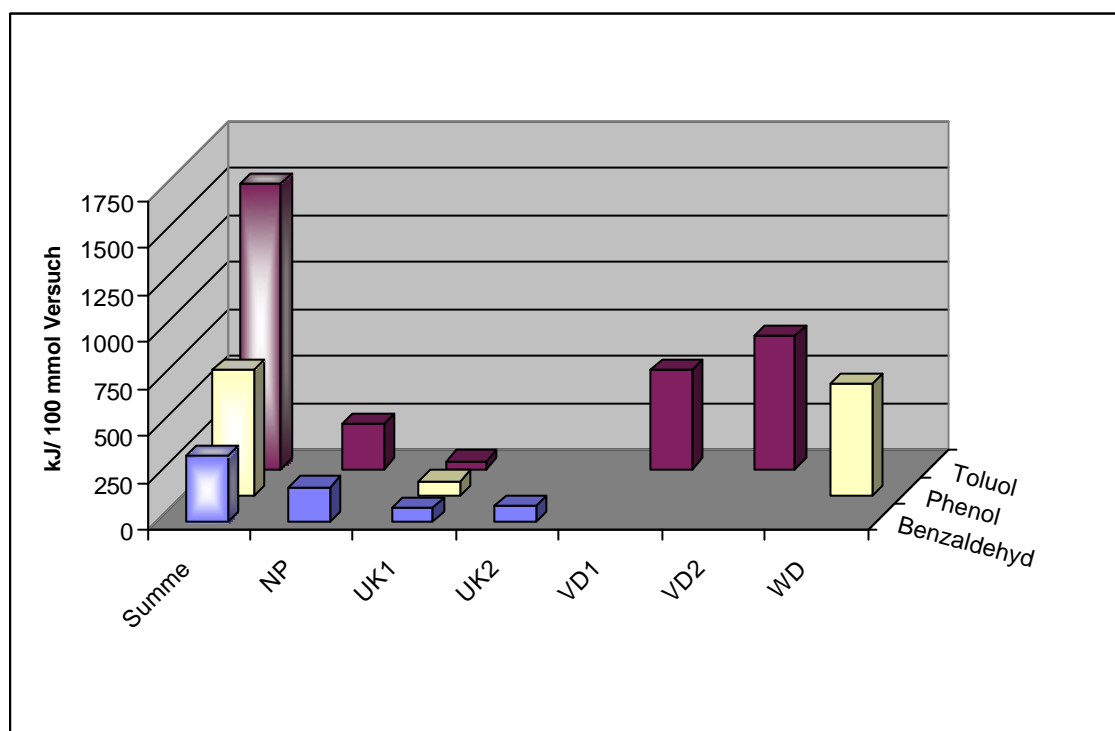
**Abb. 24: Energieverbrauch Nitrierung von Aromaten - Ebene Reaktion und Aufarbeitung**

Die Unterschiede im Energieverbrauch der Reaktionen haben ihren Ursprung in der Art der Aufarbeitung und in der Anzahl der Aufarbeitungsschritte. Es kommen bei den in dieser Arbeit untersuchten Reaktionen mehrere unterschiedliche Reinigungsmethoden zum Einsatz, die sich in ihrem Verbrauch an elektrischer Energie stark unterscheiden. Um die jeweiligen Schwachstellen genauer zu identifizieren, muss der Summenparameter Energieverbrauch auf die einzelnen Verfahrensschritte aufgeteilt werden, die zur Gesamtsumme des Energieverbrauchs beitragen (Tab. 17).

Verfahrensschritt	Bestandteile des Verfahrensschrittes
Neutralisieren Produkt (NP)	Aufnehmen in Lösungsmittel, Neutralisieren, Trocknen, Abfiltrieren Trockenmittel, Abrotieren Lösungsmittel
Umkristallisieren (UK)	Heißlösen im Lösungsmittel, Absaugen
Vakuumdestillation (VD)	Vakuumdestillation (Erzeugung Vakuum mit Ölpumpe)
Wasserdampfdestillation (WD)	Wasserdampfdestillation (Erzeugung Wasserdampf mit Heizpilz)

**Tab. 17: Nitrierung von Aromaten - Verfahrensschritte der Aufarbeitung**

Das Reaktionsprodukt aus der Nitrierung von Benzaldehyd wird einmal neutralisiert und zweimal umkristallisiert, um das reine 3-Nitrobenzaldehyd darzustellen. Die Reaktionsprodukte der Toluolnitrierung werden ebenfalls neutralisiert, bevor die verschiedenen Produkte mittels Umkristallisation und zweier Vakuumdestillationen isoliert werden. Bei der Nitrierung von Phenol wird auf den Schritt der Neutralisation verzichtet. Die Reaktionsmischung wird mittels Wasserdampfdestillation destilliert und eines der Reaktionsprodukte zur Reinigung umkristallisiert. Die in den identifizierten Verfahrensschritten verbrauchte Energie zeigt Abb. 25.



**Abb. 25: Energieverbrauch Nitrierung von Aromaten - Aufarbeitung**

Innerhalb der durchgeführten Aufarbeitung lassen sich zwei Verfahrensschritte - Wasserdampfdestillation und Vakuumdestillation - mit einem besonders hohen Beitrag zum Gesamtenergieverbrauch identifizieren. Der Energieverbrauch der Wasserdampfdestillation lässt sich teilweise auf die bereits besprochene mangelnde Isolierung der Versuchsanordnung und die daraus resultierenden Energieverluste durch Wärmestrahlung und Konvektion zurückführen (3.4.1.1).

Auch die ebenfalls schon besprochene hohe spezifische Wärmekapazität von Wasser trägt bei der Wasserdampfdestillation zum hohen Gesamtenergiebedarf bei (Abb. 21). Der Beitrag, der bei der Aufarbeitung von Toluol zweimal benötigten Vakuumdestillation, zum Gesamtenergieverbrauch ist gleichfalls sehr hoch. Dieser Wert ist ein Summenparameter und setzt sich aus dem Verbrauch der Vakuumerzeugung und der Konsumtion elektrischer Energie zur Bereitstellung thermischer Energie zusammen. Der Energieverbrauch der Vakuumdestillation VD 2 hat danach folgende Zusammensetzung (Tab. 18).

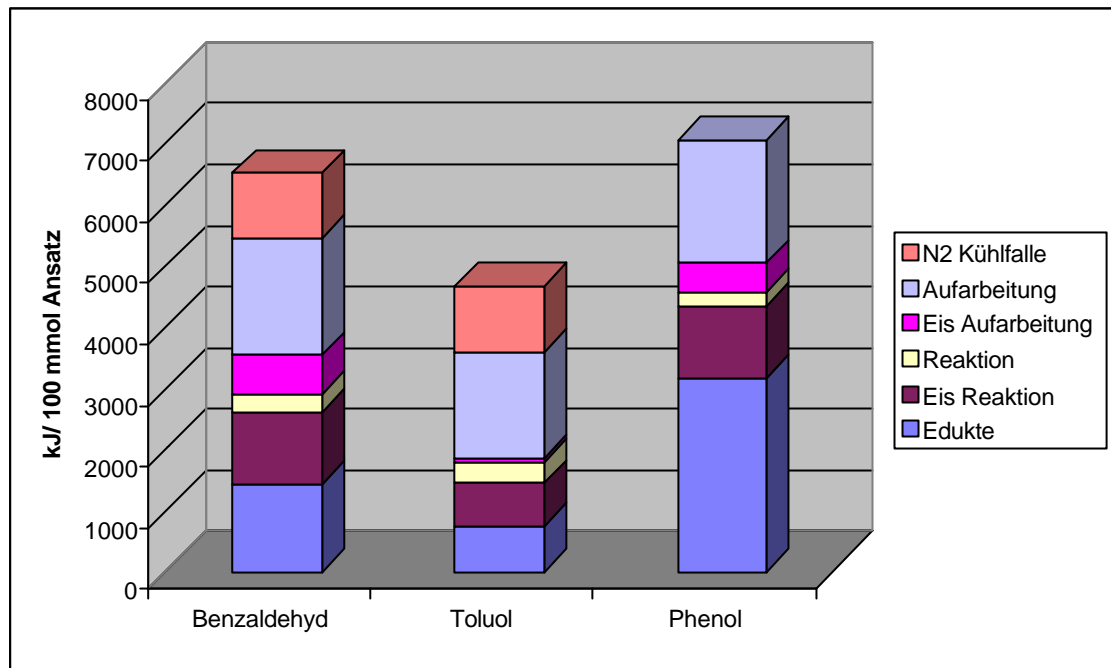
Vakuumdestillation (VD2)		
	Verbrauch (kJ)	Anteil (%)
Gesamt	709,20	100,0
Heizpilz	502,20	70,8
Vakuum	207,00	29,2

**Tab. 18: Beiträge zum Gesamtenergieverbrauch - Vakuumdestillation (VD2)**

Entsprechend der bereits gemachten Aussagen führen die Parameter Zeit und mangelnde Isolierung zum hohen Beitrag am Gesamtverbrauch. Mit rund 30 % des Gesamtenergieverbrauchs des betrachteten Vakuumdestillationsschrittes ist auch die Vakuumerzeugung eine bemerkenswerte Schwachstelle. Um die Größe dieses Schwachpunktes ohne Messung abschätzen zu können, wurden in dieser Arbeit unterschiedliche Vakuumpumpen sowie verschiedene Wasserstrahlpumpen auf ihren Energieverbrauch bzw. Wasserverbrauch hin untersucht (siehe Anhang A.7).

#### 3.4.1.4. Nitrierung von Aromaten - ganzheitliche Betrachtung

Bei der ganzheitlichen Betrachtung der Nitrierung von Aromaten (Kapitel A.5) werden, neben dem bereits besprochenen Energieverbrauch von Reaktion und Aufarbeitung, auch die in den Stoffen beinhaltete Materialenergie sowie die Energie aus den Vorketten der Edukte einbezogen. Zusätzlich betrachtet wird der Energieverbrauch der Eisherstellung und der Verbrauch der Gewinnung von Flüssigstickstoff zur Füllung der Kühlfallen. Dadurch verschieben sich die aus Kapitel 3.4.1.3 bekannten Verhältnisse (Abb. 26).



**Abb. 26: Energieverbrauch Nitrierung von Aromaten - ganzheitliche Betrachtung**

Zur Bereitstellung von Eis im Labor werden durchschnittlich rund 400 kJ elektrische Energie pro Kilogramm Eis benötigt. Unter Berücksichtigung der Herstellung von elektrischem Strom werden gar rund 1200 kJ Primärenergie zur Erzeugung von 1 kg Eis benötigt. Unter diesen Gesichtspunkten ist der Einsatz von Eis in den betrachteten Reaktionen als Schwachpunkt anzusehen. Da zur Kühlung einer Reaktion in manchen Fällen andere Methoden nicht verwendet werden können, ist der Einsatz von Eis - unter Berücksichtigung der Reaktions-sicherheit - auf das gerade notwendige Maß zu beschränken. Ebenso wie das zur Kühlung verwendete Eis trägt aus ganzheitlicher Sicht auch die Erzeugung von flüssigem Stickstoff zur Füllung der Kühlfallen, mit einem Primärenergieverbrauch von rund 5500 kJ/kg Stickstoff, zu einem hohen Energieverbrauch der Reaktionen bei. Auch hier ist es empfehlenswert, durch Anpassen der verwendeten Gerätegrößen den Einsatz von Stickstoff auf das erforderliche Maß zu begrenzen. Diese Anpassung ist auch dann angeraten, wenn Flüssigstickstoff beispielsweise durch Trockeneis/Ethanol ersetzt wird.

In den vorgenommenen Untersuchungen blieben die zur Aufarbeitung benötigten Hilfsstoffe sowie der zu deren Herstellung benötigte Primärenergieaufwand unberücksichtigt. Mit Hilfe der Daten für Cyclohexan, dessen Vorkette bekannt war, soll nun der potenzielle Einfluss der nicht untersuchten Hilfsstoffe auf das Gesamtergebnis dargestellt werden. Unter Einbeziehung der Vorkette von Cyclohexan erhöht sich der Energieverbrauch der Nitrierung von Toluol um rund 2900 kJ. Damit würde diese Nitrierung von der aus energetischer Sicht günstigsten Variante zur ungünstigsten werden. Ähnlich hohe Beiträge wie bei der Toluolnitrierung können z.B. bei der Nitrierung von Benzaldehyd aus den Vorketten von Methyl-tert-butylether, Petrolether und Toluol sowie aus den Vorketten der anorganischen Produkte erwartet werden. Die Anteile des Primärenergieverbrauchs aus den Vorketten der Hilfsstoffe stellen damit einen großen Teil des Gesamtenergieverbrauchs und dadurch eine große allgemeine Schwachstelle von Laborreaktionen dar. Vergleichbar mit bereits festgelegten Optimierungspotenzialen ist es deshalb auch bei der Verwendung von Auxiliaren sinnvoll, diese unter Berücksichtigung der Last ihrer Vorkette auszusuchen und jeweils nur die Menge an Substanz einzusetzen, die zur Durchführung der Aufgabe gerade benötigt wird.

### **3.4.2. Schwachstelle Ressourcenverbrauch**

Die in den untersuchten Reaktionen aufgedeckten Schwachstellen im Ressourcenverbrauch sollen in diesem Kapitel näher beleuchtet werden. Sehr oft, vor allem bei der ganzheitlichen Betrachtung, sind es die selben Schwachpunkte, die bereits bei der Schwachstellenanalyse im Bereich Energieverbrauch identifiziert wurden. Dies lässt sich zum einen auf den Verbrauch von Primärenergieträgern wie Kohle und Gas bei der Bereitstellung von Sekundärenergie, wie z.B. elektrischen Strom, zurückführen, zum anderen auf den Rohstoffbedarf zur Herstellung von Edukten und Auxiliaren. Nachfolgend soll auf die identifizierten Schwachstellen eingegangen werden.

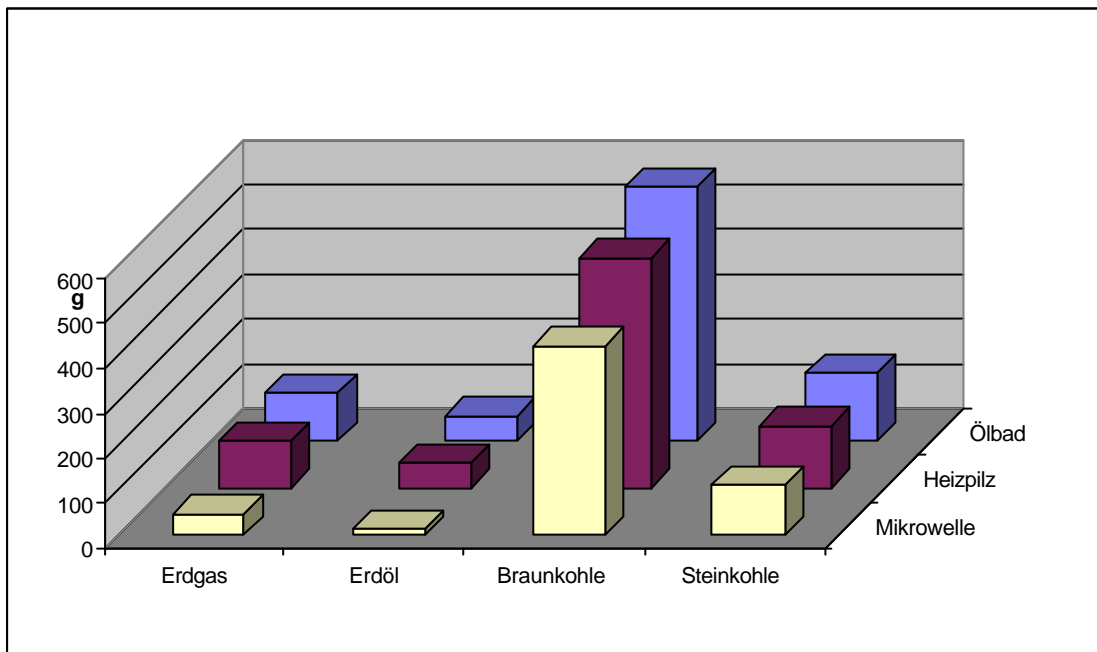
### 3.4.2.1. Acetalisierung - Reaktion und Aufarbeitung

Die untersuchten Varianten mit gleicher Ansatzgröße unterscheiden sich, neben dem Verbrauch an elektrischer Energie, auch deutlich im Einsatz von Hilfsstoffen. Den größten Massenstrom von Reaktion bzw. Aufarbeitung bildet dabei das zur Kühlung der Prozesse verwendete Wasser. Bei den klassischen Varianten der Reaktion wurde ein konstanter Kühlwasserfluss von 0,5 L/min eingestellt. Bedingt durch die lange Reaktionszeit werden dadurch die bereits erwähnten hohen Kühlwassermengen verbraucht. Vor diesem Hintergrund sollte die Reaktionszeit immer mit Berücksichtigung der Kinetik festgelegt werden. Zusätzlich sollte der Kühlwasserfluss soweit als möglich reduziert werden. Zur Kühlung von Laborprozessen werden manchmal auch Kryostaten bzw. Kühlwasserkreisläufe eingesetzt. Anstatt großer Mengen Wasser verbrauchen diese Anordnungen Energie. Welche Art der Kühlung letztlich unter Umweltgesichtspunkten jeweils günstiger ist, kann in dieser Arbeit nicht bewertet werden und sollte Gegenstand künftiger Untersuchungen sein.

Neben dem unterschiedlichen Kühlwasserbedarf der Reaktion der Varianten, fällt vor allem das verfahrensbedingte Fehlen des Schleppmittels Cyclohexan bei der Mikrowellenreaktion auf. Die Reaktionen mit klassischer Energiezufuhr können auf den Einsatz von Schleppmitteln nicht verzichten. Ein großer Teil des verwendeten Schleppmittels findet sich jedoch in der Vorlage bzw. im zu großen Gasraum der Apparatur wieder. Eine auf den Edukteinsatz nicht abgestimmte Versuchsanordnung kann deshalb als weitere Schwachstelle identifiziert werden. Zusätzlich kann davon ausgegangen werden, dass eine zu große Menge Schleppmittel verwendet wurde. Bei einem um 60 % verringerten Schleppmitteleinsatz unterscheiden sich die erzielten Ausbeuten nicht. Somit kann als weitere Schwachstelle die zu große Menge Schleppmittel identifiziert werden. Bei Betrachtung der Sachbilanzergebnisse ist weiterhin der Mehreinsatz von Auxiliaren bei der Aufarbeitung des mit klassischer Reaktionstechnik hergestellten Rohproduktes augenfällig. Dieser ist durch einen zusätzlichen Aufarbeitungsschritt bei den klassischen Reaktionsvarianten verursacht und kann nicht eindeutig als Schwachstelle eingeordnet werden. Grundsätzlich jedoch ist bei der Aufarbeitung zu überprüfen, ob ein weiterer Aufarbeitungsschritt notwendig ist oder ob auf ihn verzichtet werden kann.

### 3.4.2.2. Acetalisierung - ganzheitliche Betrachtung

Neben dem bereits besprochenen hohen Bedarf an Kühlwasser, nimmt die Konsumtion an Primärenergieträgern bei einer ganzheitlichen Betrachtung einen weiteren deutlichen Anteil am Gesamtressourcenverbrauch ein.



**Abb. 27: Verbrauch Primärenergieträger - säurekatalysierte Acetalisierung**

Die Schwachstellen, die ursächlich für den Primärenergieträgeraufwand sind, können im Wesentlichen als jene erkannt werden, die auch bei der Schwachstellenanalyse Energieverbrauch identifiziert wurden. Hintergrund dieser Feststellung ist die bereits erwähnte Tatsache, dass Primärenergieträger überwiegend zur Bereitstellung von Sekundärenergie wie z.B. elektrischem Strom Verwendung finden. Weiterhin findet sich ein großer Teil der benötigten Primärenergieträger als Bestandteil von Edukten und Auxiliaren wieder. Zur Reduktion des Einsatzes von Primärenergieträgern ist es deshalb zweckmäßig, den Energieverbrauch auf den minimal erforderlichen Umfang zu reduzieren und den Einsatz von Auxiliaren an den tatsächlichen Bedarf anzupassen.



Die Anpassung der verwendeten Auxiliarien, beispielsweise der Menge verwendeter Lösungsmittel, an den tatsächlichen Bedarf ist auch im Hinblick auf nicht mit Primärenergieträgern verknüpften Stoffströmen der Vorketten wichtig. Je geringer der Einsatz von Auxiliarien bei Reaktion und Aufarbeitung, desto geringer die Stoffströme in deren Vorkette.

### **3.4.3. Schwachstelle Umweltwirkung der verwendeten Stoffe**

Das Wissen um die Umweltwirkung der eingesetzten Stoffe, der Reaktions- und Nebenprodukte sowie der in Vorketten eingesetzten oder entstehenden Stoffe, ist für die Beurteilung der Gesamtumweltbelastung einer Reaktion unerlässlich. Gleichwohl wurde in dieser Arbeit aus den bereits genannten Gründen - andere Zielstellung, Focus auf Probleme außerhalb der konventionellen Denkhaltung von Chemikern - auf eine detaillierte Wirkungsauswertung verzichtet. Hinzu kommt, dass für die Wirkungsauswertung von Stoffen bereits eine Reihe unterschiedlicher Methoden wie EcoPro (Mosovsky *et al.*, 2000) oder der Eco-Indicator 99 (Goedkoop und Spriensma, 2000) etabliert sind. Für das spezifische Problem, der Beurteilung von Laborsynthesen unter Berücksichtigung der Wirkpotenziale der verwendeten Stoffe, wurde ebenfalls ein Programm entwickelt (Eissen und Metzger, 2001). Allerdings werden die in der vorliegenden Arbeit speziell behandelten Umweltauswirkungen der Energiebereitstellung und der Ansatz der ganzheitlichen Betrachtung bei diesem Programm nicht berücksichtigt. Wenn auch eine spezielle Wirkungsuntersuchung in dieser Arbeit nicht durchgeführt wurde, sollen zumindest einige wenige Anmerkungen dazu gemacht werden.

#### **3.4.3.1. Edukte**

Bei der Auswahl der Edukte für eine spezielle Reaktion ist man nur wenig flexibel. Möchte man auf ein toxisches Edukt verzichten, um eine erkannte Schwachstelle zu beseitigen, bleibt oft nur die Suche nach einer Reaktion, die von anderen Stoffen ausgehend zum gleichen Zielprodukt führt. Um die aus toxischen Edukten oder daraus hervorgehenden Produkten stammenden Umweltlasten zu verringern, kann als weitere Maßnahme die Ansatzgröße der durchzuführenden Reaktion auf das gerade notwendige Maß minimiert werden.

Eine weitere Alternative ist der Einsatz von Katalysatoren. Dadurch lässt sich beispielsweise ein großer Überschuss eines Stoffes reduzieren oder aber die Generierung toxischen Abfalls minimieren. Weitere Optimierungsmöglichkeiten sind zunächst nicht gegeben. Viel besser als die Edukte lassen sich die Lösungsmittel bezüglich ihrer Umweltlasten optimieren.

#### 3.4.3.2. Lösungsmittel

Aufgrund ihres Anteils am Gesamtstoffeinsatz einer Reaktion muss den verwendeten Lösungsmitteln besondere Aufmerksamkeit zu teil werden. Neben den in den Bereichen Energie und Ressourcenverbrauch identifizierten Schwachstellen, lässt sich bei der Auswahl von Lösungsmitteln auch ein Schwachpunkt hinsichtlich ihrer Umweltwirkung ausmachen. Hierbei werden die aus der Verwendung der Lösungsmittel resultierenden Umweltlasten nicht immer berücksichtigt. Vielmehr werden Lösemittel oft aufgrund von Erfahrungswerten ausgesucht. Damit allerdings bleibt der wichtige Aspekt der stofflichen Wirkung unberücksichtigt. Ein Beispiel, wie das für eine Reaktion günstigste Lösungsmittel ermittelt werden kann, zeigen Chen *et al.* (2001). Um eine schnelle Auswahl zu treffen, ist die dort besprochene Vorgehensweise jedoch ungeeignet. Eine einfachere Möglichkeit, Lösungsmittel auch nach ihrer Umweltlast hin auszuwählen, bietet der von Curzons *et al.* (1999) entwickelte „Solvent selection guide“ (Abb. 28). Hier kann aus einer Auswahl von Lösungsmitteln über eine Farbkodierung (rot = schlecht, gelb = mäßig, grün = gut) das günstigste Solvenz ausgesucht werden. Diese Auswahlhilfe umfasst noch nicht die gesamte Bandbreite der zur Verwendung bereitstehenden Lösemittel. Sie wird gegenwärtig aber erweitert und soll künftig neben einer größeren Zahl von Lösemitteln auch noch eine Bewertung im Rahmen einer ganzheitlichen Betrachtung beinhalten. Auf weiterführende Angaben zu allgemeinen Schwachstellen der Laborreaktionen wird nun verzichtet. Nachfolgend werden alle bei der Analyse erkannten Problemfelder von Laborreaktionen zusammengefasst.

Solvent	PROCESS			
	Environmental - Waste	Environmental - Impact	Health	Safety
Toluene	7	8	4	4
Ethanol	8	7	6	6
Heptane	6	8	5	8
Cyclohexane	5	5	6	8
Hexane	5	8	8	8
p xylene	6	4	5	5
Ethylene glycol	4	6	6	6
Methanol	8	6	4	6
Diisopropyl ether	5	8	6	8
Dichloromethane	8	8	8	6
n butanol	5	7	6	6
DMF	4	6	4	7
Isopropanol	8	6	7	7
Ethyl acetate	4	6	7	4
Butyl acetate	7	7	7	6
Acetone	8	7	6	5
THF	8	7	4	8

Abb. 28: „Solvent Selection Guide“ (Curzons, 2001)

### 3.5. Identifizierte Schwachstellen - Zusammenfassung

Bei den Betrachtungen der verschiedenen Reaktionen konnten Schwachstellen ermittelt werden, die für Reaktionen im Labormaßstab offenbar allgemeine Gültigkeit besitzen. Als eine der wichtigsten identifizierten Unzulänglichkeiten muss der - auch bei ganzheitlicher Betrachtungsweise - zu hohe Verbrauch an elektrischer Energie bei Reaktion und Aufarbeitung gelten. Dieser kann ursächlich den hohen Verlusten durch Energieabgabe an die Umgebung zugeschrieben werden. Die Menge der an die Umgebung abgegebenen Energie wird maßgeblich durch folgende Faktoren beeinflusst:

- a) Reaktionsdauer
- b) Reaktionstemperatur
- c) Grad der Isolation der verwendeten Versuchsanordnung
- d) Größe der Apparatur (Energieverluste oberflächenabhängig)

Ein weiterer Faktor, der Einfluss auf den Energieverbrauch einer Reaktion nimmt, ist die Menge der eingesetzten Hilfsstoffe und deren spezifische Wärmekapazität  $c_p$ .

Aus ganzheitlicher Sichtweise erweitert sich der Kreis der, den Energieverbrauch beeinflussenden, Faktoren um die bei der Herstellung der Edukte und Hilfsstoffe verbrauchte Energie. Auch die bei der Erzeugung von elektrischem Strom verbrauchte Energie trägt zu einem hohen Gesamtenergieverbrauch bei.

Aus stofflicher Sicht konnten Schwachpunkte vor allem bei der Menge der eingesetzten Hilfsstoffe ausgemacht werden. Diese tragen nicht nur zu einem erhöhten Ressourcenverbrauch bei, sondern beeinflussen über die genannten Faktoren auch den Energiebedarf von Reaktionen.

Eine weitere eruierte Erkenntnis ist der Einfluss der Aufarbeitung auf die Umweltlast einer Synthese. Bei der Optimierung von Laborreaktionen muss der Aufarbeitung künftig eine größere Bedeutung beigemessen werden.

Die identifizierten Schwachstellen treten offensichtlich allgemein bei Laborreaktionen auf. Um die Größenordnung der Schwachstelle im Vergleich verschiedener Reaktionen zu ermitteln, müssten langwierige Untersuchungen und vor allem Bewertungen durchgeführt werden. Mit Hilfe von Kennzahlen kann der Zeitaufwand für die Beurteilung der allgemeinen Umweltlasten von Reaktionen effektiv abgeschätzt werden. Nachfolgend sollen zur besseren Beschreibung der jeweiligen Schwachpunkte Umweltkennzahlen entwickelt bzw. aus der Praxis entnommen werden, mit deren Hilfe auch ein Vergleich unterschiedlicher Reaktionen erfolgen kann.

## **3.6. Umweltkennzahlen**

Die in den vorangegangenen Kapiteln identifizierten Schwachstellen sind zum großen Teil für die Gesamtumweltlast von Laborreaktionen verantwortlich. Mit der angewendeten Vorgehensweise, angelehnt an die Ökobilanzmethode, konnten diese Schwachstellen erst ermittelt werden. Aufgrund ihrer hohen Komplexität ist die Ökobilanzmethode indes nicht ohne weiteres von einer großen Nutzergruppe anwendbar. Die Anforderungen an die Datenmenge und die Datenqualität sowie der hohe Zeitbedarf bei der Durchführung einer Bilanzierung sprechen gleichfalls gegen eine breite Anwendung dieser Methode (Persson, 2001). Um dennoch eine Aussage über die Auswirkungen einer Reaktion auf die Umwelt machen zu können und um eine schnell zugängliche Entscheidungsgrundlage zu erhalten, müssen andere Methoden entwickelt werden. Eine Möglichkeit bietet die Bewertung mit Hilfe von Umweltkennzahlen.

### **3.6.1. Was sind Umweltkennzahlen**

Analog der betriebswirtschaftlichen Kennzahlen lassen sich Umweltkennzahlen definieren als „eine umweltrelevante Größe in Form einer absoluten oder relativen Zahl, die gezielt einen Sachverhalt mit erhöhtem Erkenntniswert beschreibt“ (Loew und Kottmann, 1996). Eine Auswahl passender Umweltkennzahlen kann folglich, entsprechend der betriebswirtschaftlichen Zahlen, für eine entscheidungsorientierte Datenaufbereitung ein geeignetes Instrument sein. In der Industrie entwickeln sich Umweltkennzahlen derzeit zu wichtigen Instrumenten zur Operationalisierung und Quantifizierung von Umweltschutzbelangen und Nachhaltigkeitsansätzen (Köser *et al*, 2000). Welches jedoch sind passende Kenngrößen? Zur Beantwortung dieser Frage ist eine weitere Differenzierung des Kennzahlensystems notwendig. Betriebliche Umweltkennzahlen können hinsichtlich der Umweltschutzbereiche, der Betrachtungsgegenstände und der Abbildungsebenen differenziert werden (Loew und Hjalmarsson, 1996). Kennzahlen der Abbildungsebene lassen sich zusätzlich differenzieren in Größen der Verursacher-, der Stoff- und der Energiestromebene sowie der Kosten und Wirkungsebene (Loew und Kottmann, 1996). Die Differenzierungsmatrix zeigt Abb. 29.

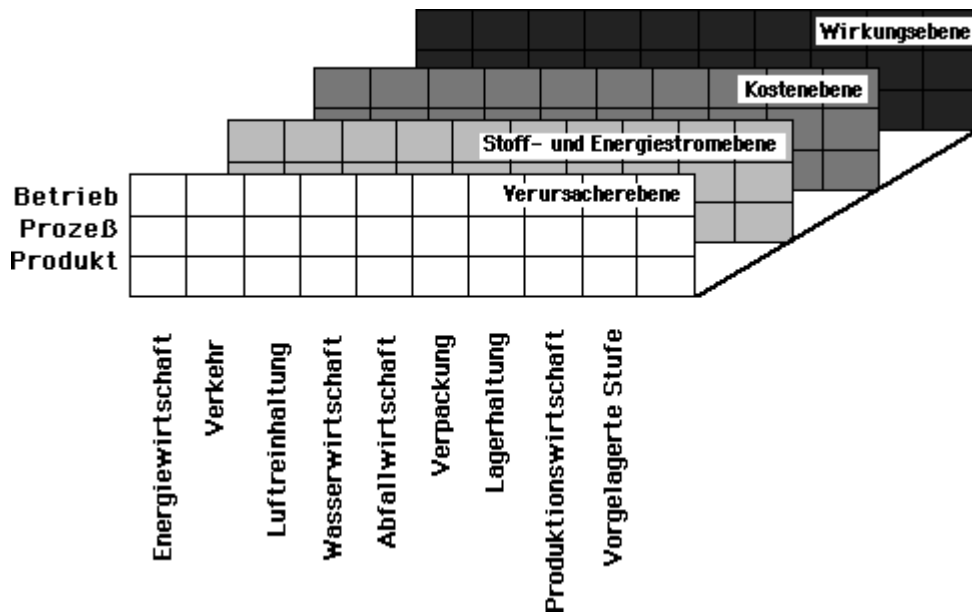


Abb. 29: Differenzierungsmatrix der Umweltkennzahlen (Loew und Hjálmarsdóttir, 1996)

Als Entscheidungskriterium, ob eine Synthese aufgrund ihrer Umweltlasten anzunehmen oder abzulehnen ist, muss eine aus den naturwissenschaftlich relevanten Stoff- und Energieströmen gebildete Kennzahl herangezogen werden. Kennzahlen aus anderen Bereichen sind nicht in der Lage dieses Ziel zu erreichen. Andererseits können mit Hilfe solcher Kennzahlen sehr wohl Aussagen in den Nachhaltigkeitsteilbereichen Ökonomie und Soziologie getroffen werden. So führen z.B. verringerte Abfallmengen oft zu geringeren Beschaffungs- und Entsorgungskosten und eine geringere Umweltlast zu einer höheren Zufriedenheit der Bevölkerung. Nachfolgend sollen geeignete Umweltkennzahlen, einige vom Verfasser dieser Arbeit neu entwickelt, andere bereits lange eingeführt, vorgestellt werden. Dabei ist speziell bei den Energiekennzahlen darauf zu achten, dass zunächst deren Aussagefähigkeit und nicht deren absolute Belastbarkeit aus naturwissenschaftlicher Sicht im Zentrum des Interesses stand.

## 3.6.2. Kennzahlen Stoffstrom

### 3.6.2.1. Ausbeute

Die Ausbeute ist eine der ältesten und für den Chemiker die wohl bekannteste aller, der auch als Umweltkennzahl verwendbaren, Größen (Cave *et al.*, 2001). Sie ist „das Verhältnis der gebildeten Menge eines Reaktionsproduktes P zur eingesetzten Menge der Schlüsselkomponente K“. Mit Hilfe der Kenngröße „Ausbeute“ werden Produkt- und Eduktmengen miteinander verglichen. Aus diesem Grund müssen die stöchiometrischen Verhältniszahlen der Komponenten berücksichtigt werden. Es ergibt sich:

$$A_P = \frac{n_P \cdot \nu_K}{n_K \cdot \nu_P}$$

mit

$A_P$  = Ausbeute

$n_{P(K)}$  = Stoffmenge des gebildeten Produktes P (K)

$\hat{\nu}_{P(K)}$  = Stöchiometrische Verhältniszahl des Reaktionspartners P (K).

Um eine Reaktion genau zu charakterisieren, reicht die Kennzahl „Ausbeute“ jedoch noch nicht aus. Es können z.B. Parallelreaktionen oder Folgereaktionen ablaufen, die zu unerwünschten Nebenprodukten führen. Dieser Tatsache wurde mit der Einführung der Kenngröße „Selektivität“ Rechnung getragen (Hagen und Hopp, 1992).

### 3.6.2.2. Selektivität

Die Kennzahl Selektivität ( $S_P$ ) einer Reaktion wird durch das Verhältnis der Reaktionsgeschwindigkeiten der Edukte zu den entstehenden Produkten und Nebenprodukten bestimmt und hilft, eine Reaktion genauer zu beschreiben.

Sie stellt das „Verhältnis zwischen der gebildeten Menge eines gewünschten Produktes P (Ausbeute  $A_P$ ) und der umgesetzten Menge eines Reaktionspartners K (Umsatz  $U_K$ )“ dar (Hagen und Hopp, 1992):

$$S_P = \frac{A_P}{U_K}$$

mit

$$U_K = \frac{n_{i0} - n_i}{n_{i0}}$$

Sie ist damit ähnlich der Ausbeute ein wichtiger Indikator für die Beurteilung einer Reaktion.

### 3.6.2.3. Atomökonomie

Die Atomökonomie ist im Vergleich zu den bereits vorgestellten Kenngrößen Ausbeute und Selektivität wesentlich jünger. Sie wurde erstmalig von Trost (1991) vorgestellt, später verfeinert (Sheldon, 1994) und ist das Verhältnis der Atommasse des Zielproduktes zu der Summe der Atommassen aller aus der Reaktion hervorgegangenen Stoffe:

$$\text{Atomökonomie} = \frac{M_{\text{Zielprodukt}}}{\sum_{i=1}^n M_{\text{Reaktionsprodukt}_i}}$$

Die Atomökonomie ist als eine Art Massenselektivität zu verstehen. Sie ist immer dann schlecht, wenn ein Prozess z.B. viele Neutralisationsschritte enthält, die zu anorganischen „wertlosen“ Salzen wie Natriumchlorid, Natriumsulfat oder Ammoniumsulfat führen. Die Abspaltung großer Liganden (z.B. Triphenylphosphin) während eines Prozesses führt ebenfalls zu einer schlechten Atomökonomie.



#### 3.6.2.4. Stoffeffizienz

Ähnlich der Atomökonomie ist auch die Stoffeffizienz (E-Faktor) eine Größe, die während einer Reaktion hergestellte Produkte begutachtet. Bei dieser Kenngröße werden allerdings nicht die Molmassen der Produkte ins Verhältnis gesetzt (vgl. Kapitel 3.6.2.3), sondern die absoluten Massen (Sheldon, 1994; Sheldon, 2000). Zusätzlich bietet die Stoffeffizienz auch die Möglichkeit, nicht an der Reaktion teilnehmende Katalysatoren oder Lösungsmittel, die später als Abfall anfallen, aufzunehmen. Darin sind auch die zur Aufarbeitung des Rohproduktes notwendigen Stoffe enthalten. Die Kennzahl wird gebildet, indem die Masse des Abfalls zur Masse des Zielproduktes ins Verhältnis gesetzt wird.

$$E - Faktor = \frac{m_{\text{Abfall/Reststoffe}}}{m_{\text{Zielprodukte}}}$$

Der so gebildete Faktor erlaubt eine Aussage über das Abfallaufkommen pro Masseinheit Zielprodukt. Neben dem reaktionsbezogenen Abfallaufkommen, ist auch der Verbrauch von Stoffen zur Isolierung und Aufreinigung des Zielproduktes eine interessante Kenngröße.

#### 3.6.2.5. Stofflicher Aufarbeitungsaufwand ( $A_S$ )

Ein geringer Aufwand an Stoffen und Energien zur Isolierung und Reinigung des Zielproduktes ist für jede Synthese wünschenswert. Eine ökologisch günstige Synthese liefert ein, aus der Reaktionsmischung leicht abzutrennendes und aufzuarbeitendes, Produkt und verzichtet auf langwierige Trenn- und Reinigungsschritte. Sehr oft allerdings ist die Menge der für die Aufarbeitung benötigten Stoffe und Energien deutlich höher als die zur Herstellung des Rohproduktes. Ebenso verhält es sich mit der Zahl der zur Isolierung notwendigen Arbeitsschritte. Der stoffliche Aufarbeitungsaufwand ( $A_S$ ) ist eine Kennzahl, die eine Aussage über die mit der Aufarbeitung verbundenen Stoffströme ermöglicht. Er wird gebildet, indem die Masse der zur Isolierung und Reinigung des Zielsproduktes verwendeten Stoffe mit der Masse des erhaltenen Zielproduktes ins Verhältnis gesetzt wird.

$$A_s = \frac{m_{\text{StoffeAufarbeitung}}}{m_{\text{Zielprodukt}}}$$

Neben den massebezogenen Kenngrößen gibt es auch Größen, die die bei einem Prozess verbrauchte Energie in eine Stoffgröße transformiert abbilden können. Dadurch kann eine abstrakte Energiegröße anschaulich als Stoffgröße dargestellt werden. Nachfolgend werden zwei solcher Kenngrößen vorgestellt.

### 3.6.3. Transformierte Kennzahlen Energie/Stoffstrom

#### 3.6.3.1. Energieinduzierte Methanäquivalente

Mit Hilfe der Kenngröße „Energieinduzierte Methanäquivalente“, soll die für eine Synthese und deren Aufarbeitung benötigte Energie anschaulich dargestellt werden. Es wird dabei zu Grunde gelegt, dass elektrische Energie in Deutschland mehrheitlich aus der Verbrennung fossiler Energieträger gewonnen wird. Für die Ermittlung der Methanäquivalente wird angenommen, dass elektrischer Strom nur aus der Verbrennung von Methan ( $H_U = 47,5 \text{ MJ/kg}$ ) gewonnen wird. Das Modellkraftwerk arbeitet nicht mit der Methode der Kraft-Wärmekopplung und stellt mit einem Wirkungsgrad von 43 % elektrische Energie zur Verfügung. Es wird nun die Menge Methan in Mol berechnet, die für die Bereitstellung der in der Reaktion, in der Synthese oder in der ganzheitlichen Betrachtung der Reaktion verbrauchten Energie benötigt wird ( $1 \text{ MJ} = 3,052 \text{ mol Methan}$ ). Demnach steht nicht mehr die eigentliche Energie im Vordergrund, sondern es wird die Reaktion



zur Energieerzeugung mit der Laborsynthese verglichen. Mit Hilfe dieser Abstraktion kann die Bedeutung des Energieverbrauchs für die Umweltlast chemischer Reaktionen verdeutlicht werden. Um eine chemische Reaktion im Labor zu ermöglichen, müssen gleichzeitig in einer anderen Reaktion fossile Energieträger umgesetzt werden. Die Kennzahl Methanäquivalente  $K_M$  wird gebildet, in dem die Ausbeute der Reaktion in Mol zu der errechneten Stoffmenge Methan ins Verhältnis gesetzt wird.

$$K_M = \frac{n \text{ Methan}}{n \text{ Zielprodukt}}$$

Mit Hilfe dieser Kennzahl kann die, für viele Chemiker möglicherweise zu abstrakte, Einheit der elektrischen Energie kJ bzw. Wh anschaulich dargestellt werden. Zusätzlich kann mit dieser Kennzahl eine Aussage über den Beitrag der Reaktion zum anthropogen verursachten Treibhauseffekt gemacht werden.

### 3.6.3.2. CO<sub>2</sub>-Äquivalente

Anthropogen erzeugtes Kohlendioxid steht weltweit als (Haupt-)Verursacher des atmosphärischen Treibhauseffektes in Verruf (Bahadir *et al.*, 2000; Raschke und Hollmann, 2001). Mit Hilfe der CO<sub>2</sub>-Äquivalente kann der Beitrag zum Treibhauseffekt bestimmt werden. Die Kennzahl muss nicht gebildet werden, sondern wird aufgrund der Stöchiometrie der Methanverbrennung einfach von der Kennzahl Methanäquivalente übernommen. So entspricht ein Mol zur Energieerzeugung benötigtes Methan genau einem Mol Kohlendioxid.

## 3.6.4. Kennzahlen Energie

### 3.6.4.1. Energieeffizienzfaktor (K<sub>E</sub>)

Eine Möglichkeit, den Energieverbrauch von Prozessen in eine Kennzahl zu fassen, ist die Bildung des Energieeffizienzfaktors K<sub>E</sub>. Diese Kenngröße wird mit dieser Arbeit erstmalig eingeführt und bietet eine Möglichkeit, die Energieeffizienz unterschiedlicher Reaktionen abzuschätzen. Dazu wird die für Reaktion und Aufarbeitung benötigte Sekundärenergie mit der theoretisch für die Reaktion benötigten Energie verglichen. Die theoretisch benötigte Energie einer Reaktion errechnet sich dabei formal aus der Reaktionsenthalpie (Ä<sub>r</sub>H) und der notwendigen Aktivierungsenergie. Zur Bildung des Energieeffizienzfaktors K<sub>E</sub> wird der Wert der Aktivierungsenergie vernachlässigt.

Ein solches Vorgehen ist möglich, da keine thermodynamische Rechnung durchgeführt werden soll, sondern lediglich eine Kennzahl zur ökologischen Bewertung von Reaktionen. Die Aussage der Kennzahl ändert sich durch dieses Vorgehen nicht. Die für die Kennzahlenbildung benötigte Reaktionsenthalpie lässt sich wie folgt aus den Bildungsenthalpien der Edukte und Produkte berechnen:

$$\Delta_r H = \sum_f \Delta_f H \text{ Produkte} - \sum_f \Delta_f H \text{ Edukte} = \left( \sum_k \Delta_f H_k^0 \right) - \left( \sum_i \Delta_f H_i^0 \right) = E_{th.}$$

Die Bildungsenthalpie eines in der Literatur noch nicht beschriebenen Stoffes kann näherungsweise berechnet werden. Das Programm „Parameter Estimation for the Treatment of Reactivity Applications (PETRA)“ (Gasteiger und Kleinoeder, 1998) bietet dazu eine Möglichkeit. Die Kennzahl der Energieeffizienz  $K_E$  des betrachteten Prozesses wird nun berechnet, in dem die theoretisch verbrauchte Energie (Reaktionsenthalpie)  $E_{th.}$  und die tatsächlich zugeführte Sekundärenergie  $E_{zu}$  ins Verhältnis gesetzt werden.

$$K_E = \frac{E_{th.}}{E_{zu}}$$

$E_{zu}$  setzt sich dabei formal aus der theoretisch benötigten Energie  $E_{th.}$  und dem, den Wirkungsgrad der Gesamtenergiebilanz repräsentierenden, energetischen Mehraufwand  $E_M$  zusammen.

$$E_{zu} = E_{th.} + E_M$$

Die bei der Reaktion verbrauchte Energie  $E_{zu}$  wird über Messungen ermittelt und beinhaltet - wie beschrieben - neben der für die eigentliche Reaktion benötigte Energie auch den Energieverbrauch der Aufarbeitungsschritte.

Die Materialenergie sowie die zur Erzeugung der Sekundärenergie notwendige Primärenergie sind darin nicht enthalten. Die Kennzahlbildung für die Effektivitätsbetrachtung einer Reaktion kann auf dem beschriebenen Weg nur erfolgen, wenn die Reaktion endotherm verläuft, d.h. der Reaktion Energie zugeführt werden muss. Die Kennzahl hat einen Wert kleiner 100 %. Sie nähert sich 0% an je schlechter (uneffektiver) die zugeführte Energie genutzt wird bzw. je höher die Energieverluste sind. Die gebildete Kennzahl nähert sich indes bei sehr energieeffizient durchgeführten Reaktionen der 100 % Marke an.

Eine erweiterte Vorgehensweise bei der Kennzahlbildung muss gewählt werden, wenn eine exotherme Reaktion zu untersuchen ist. Formal müsste aus dieser Synthese Energie gewonnen oder zumindest der Gesamtenergieaufwand gesenkt werden können. Um die Kennzahl zu bilden, werden -entsprechend der Gleichung zur Ermittlung der Reaktionsenthalpie - dem Anteil der freiwerdenden Energie negative Vorzeichen zugewiesen.

Dies führt zu negativen Vorzeichen in Nenner und Zähler und, bei der Annahme der vollständigen Nutzung der frei werdenden Energie, zu einer Kennzahl mit dem Wert  $\pm$  Eins (100 %).

$$K_E = \frac{E_{th.}}{E_{rück}}$$

Die Annahme der vollständigen oder auch teilweisen Nutzung der Reaktionsenthalpie trifft im Regelfall jedoch auf chemische Reaktionen im Labor nicht zu. In einigen großtechnischen Prozessen wird ein Teil der abgeführten Wärme zur Dampfgewinnung und zum Einsatz in anderen Prozessen genutzt. Dieser genutzte Energieanteil kann dem eigentlichen Prozess gutgeschrieben werden und vermindert dadurch den Gesamtenergieverbrauch der Synthese. Bei exothermen **Laborreaktionen** wird eine derartige Nutzung meist nicht durchgeführt. Es wird oft vielmehr die freiwerdende Reaktionsenthalpie über verschiedene Kühlmedien, z.B. über Kühlwasser oder Eis, abgeführt. Die Energie bleibt ungenutzt, ist also ein Energieverlust. Dieser Energieverlust aber kann auch als theoretischer Energieverbrauch angesehen werden.

Dies lässt sich auf die Tatsache zurückführen, dass sich die bei der Reaktion verbrauchte Energie bei einer Nutzung der Reaktionsenergie (Gutschrift) um genau deren Betrag vermindert. Energie wird bei exothermen Reaktionen beispielsweise verbraucht, um der Reaktion die notwendige Aktivierungsenergie zuzuführen, um eine gute Durchmischung der Reaktionspartner zu erreichen oder diese zu kühlen. Vor diesem Hintergrund wird die Kennzahl des Energieeffizienzfaktors  $K_E$  bei exothermen Reaktionen wie folgt gebildet:

$$K_E = \frac{E_{th.}}{E_{verbr.}}$$

mit

$$E_{verbr.} = E_{zu} + |E_{th.}| - E_{rück}$$

$E_{verbr.}$  = benötigte Gesamtenergie für die Synthese

$E_{zu}$  = Energieverbrauch für Reaktion und Aufarbeitung

$E_{th.}$  = Reaktionsenthalpie (Aktivierungsenergie vernachlässigt)

$E_{rück}$  = Anteil der genutzten Reaktionsenthalpie

Wird die Kennzahl so erstellt, entsteht eine negative Kennzahl, da der freiwerdenden Enthalpie ein negatives Vorzeichen zugeteilt wird. Um eine positive Kennzahl zu erreichen, wird der Betrag der Reaktionsenthalpie in die Gleichung eingesetzt. Es ergibt sich:

$$K_E = \frac{|E_{th.}|}{E_{zu} + |E_{th.}| + E_{rück}}$$

Mit Hilfe dieser Kennzahl können nun Reaktionen unterschiedlicher Exothermie bezüglich ihrer Gesamtenergieeffizienz miteinander verglichen werden. Dabei wird die Energienutzung optimiert, je näher sich die Kennzahl dem Wert 100 % nähert und umso schlechter, je näher sie sich der 0 % Marke annähert.

Es ist darauf zu achten, dass Kennzahlen, gebildet aus den Ergebnissen endothermer Reaktionen, nicht mit den Kennzahlen exothermer Reaktionen (ohne Energierückgewinnung - Labor) verglichen werden. Ein solcher Vergleich ist aufgrund der Vorgehensweise bei der Kennzahlenbildung nicht möglich (keine thermodynamische Rechnung, sondern eine Kennzahl zum ökologischen Überblick).

#### *Sonderfälle:*

Es gibt einige wenige Sonderfälle, bei der die vorgestellte Vorgehensweise der Kennzahlenbildung nicht einsetzbar ist, bzw. bei der eine andere Herangehensweise erfolgen muss.

#### **a) Kein Energieeintrag bei exothermen Reaktionen:**

Der Sonderfall - kein Energieeintrag für Rühren oder Kühlung - bedeutet eine Kennzahl mit dem Wert Eins bzw. größer als Eins, wenn zusätzlich ein Teil der Reaktionsenthalpie genutzt wird. Diese Möglichkeit (z.B. bei der Energieerzeugung) wird bei der Kennzahlenbildung von Laborreaktionen ausgeschlossen.

#### **b) Zwei oder mehr unterschiedliche Stoffe sind Wertprodukte einer Reaktion:**

Werden aus einer Reaktion zwei oder mehr Wertprodukte gewonnen, welche auch weiter Verwendung finden, dann muss die für die Reaktion verbrauchte Energie den jeweiligen Produkten anteilig zugeschrieben werden. Das Vorgehen bei diesem Allokationsvorgang ist frei wählbar, z.B. nach prozentualem Anteil der Reaktionsmasse, Stoffmenge etc.. Im Verlaufe der Arbeit wird die Allokation der eingesetzten Energien nach Stoffmenge durchgeführt.

### 3.6.4.2. Energieproduktivität ( $P_E$ )

Neben dem Verhältnis der theoretisch notwendigen zur praktisch verbrauchten Energie ist auch der Energieanteil interessant, der zur Erzeugung einer bestimmten Produkteinheit benötigt wird. Die Energieproduktivität ist eine Kennzahl, die diesbezüglich eine Aussage liefern kann. Die Energieproduktivität einer Reaktion errechnet sich aus dem Quotient der Masse reinen Zielproduktes und der für Reaktion und Aufarbeitung benötigten Energie:

$$P_E = \frac{m_{\text{Zielprod.}}}{E_{\text{verbr.}}}$$

Allerdings ist dabei zu beachten, dass die Energieproduktivität verschiedener Reaktionen nicht miteinander verglichen werden darf. Dies hat seinen Grund in dem, für die Reaktionen unterschiedlichen theoretischen, Energieverbrauch. Es dürfen daher nur gleiche Reaktionen, wie etwa die in dieser Arbeit untersuchte Acetalisierung (siehe 3.2), für einen Vergleich herangezogen werden.

### 3.6.4.3. Energetischer Aufarbeitungsaufwand ( $A_E$ )

Die Aufarbeitung eines Reaktionsgemisches nimmt, wie in Kapitel 3.6.2.5 beschrieben, bei der chemischen Synthese einen wesentlichen Teil der Arbeiten ein. Neben den im Vergleich zur Reaktion oft größeren Mengen benötigter Stoffe, wird für die Isolierung und Reinigung sehr oft auch eine große Menge elektrischer Energie benötigt. Die relative Kennzahl „energetischer Aufarbeitungsaufwand  $A_E$ “ erlaubt, eine Aussage über die Höhe des Energieeinsatzes pro Produkteinheit zu treffen. Sie wird gebildet aus dem Verhältnis von für die Aufarbeitung verbrauchter Energie zur Masse des erhaltenen Zielproduktes:

$$A_E = \frac{E_{\text{Aufarbeit.}}}{m_{\text{Zielprod.}}}$$



### 3.6.4.4. Verhältnis Reaktion/Aufarbeitung

Der Energieverbrauch von Reaktion und Aufarbeitung trägt wesentlich zur Gesamtumweltbelastung von Laborreaktionen bei. Interessant ist, dass sehr oft ein Ungleichgewicht des Energieverbrauches auf Seiten der Aufarbeitung liegt. Ursache dafür sind Parallel- und Folgereaktionen sowie im Reaktionsgemisch verbleibende Katalysatoren und Lösungsmittel, die oft über viele Stufen abgetrennt werden müssen. Mit Hilfe des Vergleiches des Energieverbrauches von Reaktion und Aufarbeitung können Aussagen über den Grad der notwendigen Aufarbeitung nach der Reaktion gemacht werden.

$$E_{R/A} = \frac{E_{\text{Aufarbeit.}}}{E_{\text{Reaktion}}}$$

Je kleiner die Kennzahl, desto günstiger ist die Reaktion zu bewerten. Je größer die Kennzahl, desto notwendiger werden Optimierungen der Reaktion, um die Aufarbeitung zu erleichtern. Im folgenden Abschnitt sollen die vorgestellten Kennzahlen nun beispielhaft für den Versuch säurekatalysierte Acetalisierung berechnet werden.

### 3.6.5. Berechnete Kennzahlen für den Versuch „Acetalisierung“

Umweltkennzahlen	Heizpilz	Ölbad	Mikrowelle
Atomökonomie	0,92	0,92	0,92
E-Faktor (Stoffeffizienz)	24,01	24,01	2,70
Aufarbeitungsaufwand stofflich ( $A_S$ )	14,94	14,94	2,62
Methanäquivalente	101,35	145,85	27,19
theor. verbrauchte Energie (kJ)	10,54	10,54	10,54
Energieeffizienzfaktor ( $K_E$ )	0,0079	0,0055	0,0296
Aufarbeitungsaufwand energetisch ( $A_E$ ) (kJ/g)	33,23	52,15	10,15
Energie Aufarbeitung/Reaktion	0,24	0,27	0,29
Energieproduktivität (g/kJ)	0,00587	0,00408	0,02189
Selektivität	100,00	100,00	100,00
Ausbeute	0,80	0,80	0,80

**Tab. 19: Berechnete Kennzahlen - säurekatalysierte Acetalisierung**

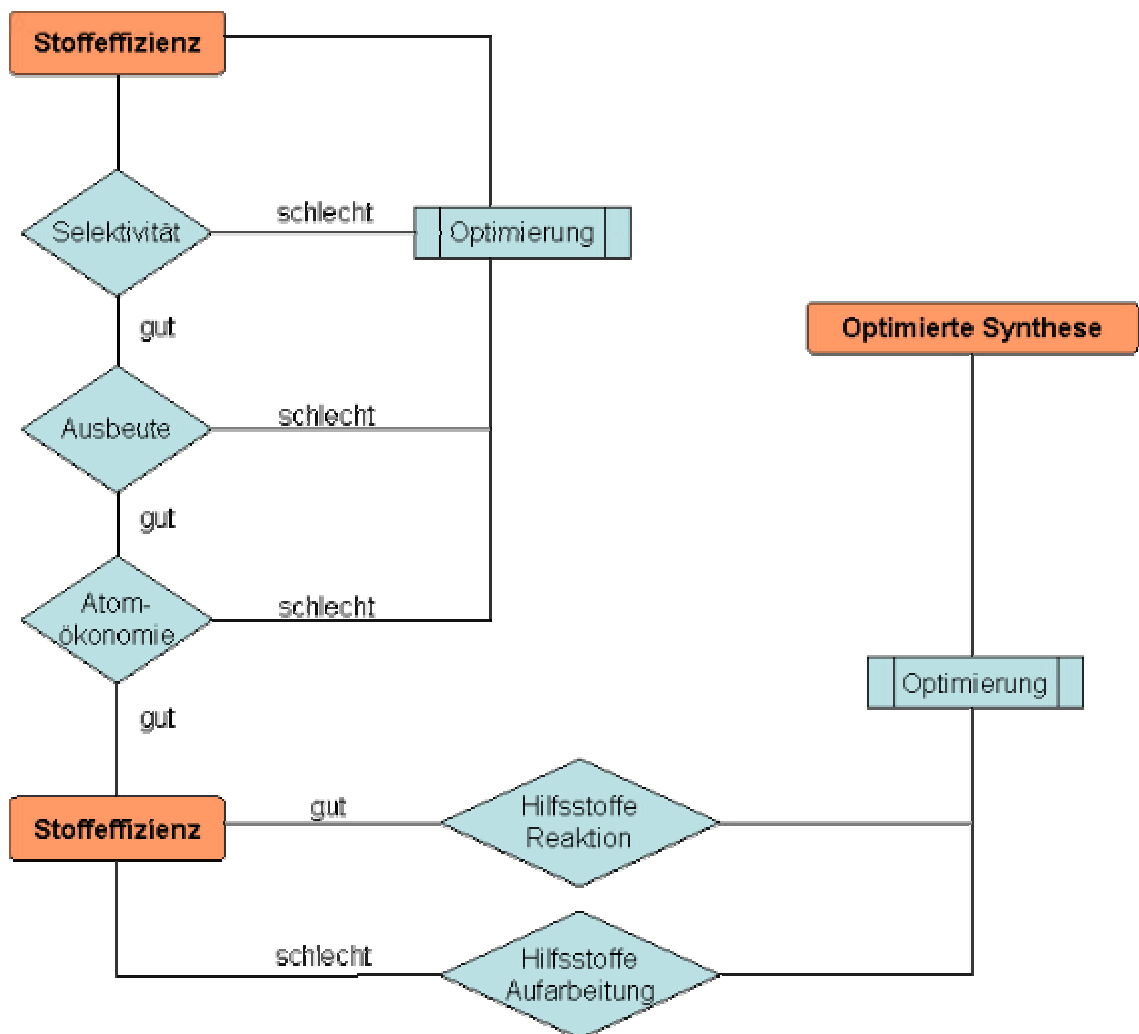
### 3.6.6. Auswertung der Kennzahlen zur Entscheidungsfindung

Die Untersuchung von Reaktionen und die Berechnung von Kennzahlen aus den ermittelten Daten ist nur dann sinnvoll, wenn aus den Ergebnissen bei einem möglichst geringen Aufwand ein möglichst großer Nutzen gezogen werden kann. Im Gegensatz zu bekannten Methoden (siehe Kapitel 3.4.3), wurden die vorgestellten Kennzahlen nicht erstellt, um absolute Aussagen bezüglich der Umweltlast der untersuchten Reaktionen zu treffen. Dies geht nur bei einem, wie in dieser Arbeit durchgeführten, Vergleich einer einzigen Reaktion unter Variation verschiedener Parameter. Die Frage, ob eine Reaktion ökologisch nachhaltig ist, soll und kann mittels der Umweltkennzahlen nicht beantwortet werden. Hierzu ist eine Berücksichtigung der vor- und nachgelagerten Schritte unabdingbar. Sehr wohl beantwortet werden kann damit die Frage, wo Verbesserungen anzusetzen sind, um die Umweltlast der Reaktion zu vermindern und damit die ökologische Nachhaltigkeit zu erhöhen. Unter Verwendung der in Kapitel 1.4.4 eingeführten Nomenklatur bedeutet dies, dass durch eine Optimierung der mit Hilfe der Kennzahlen identifizierten Schwachstellen aus einer beliebigen Reaktion, eine ökologisch nachhaltige Reaktion „S<sup>ökol</sup>“ werden kann. Die Bewertung, welche Schwachpunkte zu optimieren sind, wird dabei dem Bearbeiter überlassen. Dieser muss, unter Berücksichtigung der technischen und finanziellen Möglichkeiten, die Entscheidung selbst treffen. Dabei sind die Anforderungen der nachhaltigen Entwicklung zu beachten. Nachfolgend wird die vom Verfasser zur Optimierung vorgeschlagene Vorgehensweise näher erläutert.

#### 3.6.6.1. Ressourcenverbrauch

Die Kennzahl Stoffeffizienz (3.6.2.4) beschreibt den Ressourcenverbrauch der Reaktion inklusive Aufarbeitung in Bezug auf die Masse des synthetisierten Stoffes. Erscheint der Wert dieser Kennzahl dem Bearbeiter als zu hoch, müssen zunächst die Kennzahlen Selektivität (3.6.2.2) und Ausbeute (3.6.2.1) überprüft und gegebenenfalls Optimierungen vorgenommen werden. Ziel jeder Reaktion muss sein, möglichst hohe Selektivitäten und Ausbeuten zu erreichen. Eine möglichst hohe Atomökonomie (3.6.2.3) ist für den Ressourcenverbrauch einer Reaktion ebenfalls von großer Bedeutung.

Eine andere Synthese mit dem gleichen Stoff als Zielprodukt kann hierbei zu einer verbesserten Atomökonomie führen. Wird der Wert der Stoffeffizienz durch Optimierungen in den genannten Bereichen nicht verbessert, ist der Einsatz von Hilfsstoffen bei Reaktion und Aufarbeitung ursächlich für den hohen Ressourcenverbrauch verantwortlich. Die Kennzahl „stofflicher Aufarbeitungsaufwand“ ermöglicht dabei festzustellen, ob die Schwachstelle im Bereich der Reaktion oder der Aufarbeitung lokalisiert ist. Zur Optimierung der Schwachstellen muss der Einsatz von Auxiliaren soweit als möglich gesenkt werden. Größtes Einsparpotenzial verspricht die Reduktion von verwendeten Lösungsmitteln, die häufig im großen Überschuss zugegeben werden. Folgendes Flussdiagramm (Abb. 30) beschreibt die Vorgehensweise der Optimierung des Ressourcenverbrauchs von Laborsynthesen.



**Abb. 30: Flussdiagramm - Optimierung mit Hilfe von Umweltkennzahlen (Ressourcen)**

### 3.6.6.2. Energieverbrauch

Zur Überprüfung des Energieverbrauchs von Reaktion und Aufarbeitung ist die Energieeffizienz (3.6.4.1) zu berechnen. Sie alleine gibt Aufschluss darüber, ob die für die Synthese eines Stoffes verbrauchte Energie im Wert zu groß ist oder nicht. Wird der Wert des Energieverbrauchs als zu hoch eingeschätzt, müssen Optimierungen vorgenommen werden. Mit Hilfe der Relation des Energieverbrauchs der Aufarbeitung und Reaktion kann nun bestimmt werden, in welchem Bereich die Optimierungen angesetzt werden müssen.

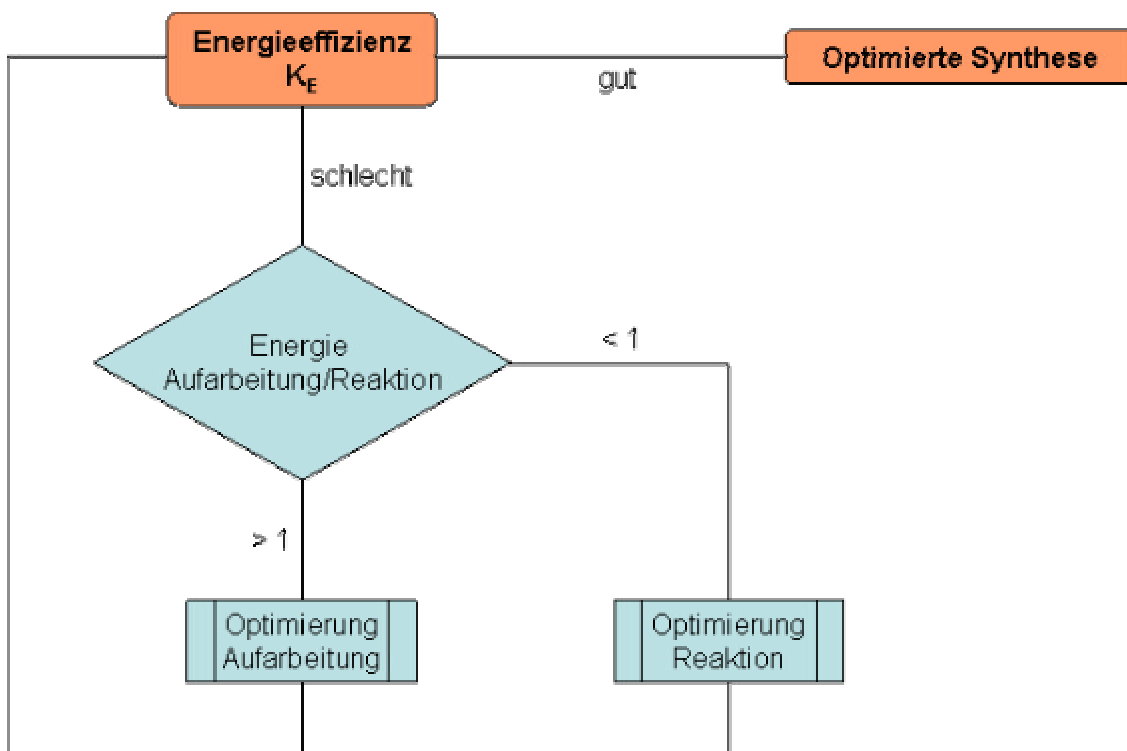


Abb. 31: Flussdiagramm - Optimierung mit Hilfe von Umweltkennzahlen (Energie)

Weitere Kennzahlen, wie der energetische Aufarbeitungsaufwand und die Energieproduktivität, sollen ebenfalls helfen, die Reaktion auf ihren Energieverbrauch hin zu untersuchen.

### 3.6.7. Probleme der Entscheidungsfindung durch Kennzahlen

Mit Hilfe der gezeigten Kennzahlen lassen sich Abschätzungen der Umweltlast offensichtlich adäquat vornehmen, in einigen Bereichen jedoch liefern die gewählten Kennzahlen keine Angaben bzw. ist eine Kennzahlbildung nicht durchführbar. So können keine Aussagen über die Toxizität (Öko- und Humantoxizität) von Stoffen, die in die Umwelt gelangen, gemacht werden. Es gibt zwar einige Methoden, mit deren Hilfe die Wirkungen abgeschätzt werden können (Goedkoop und Spriensma, 1999), aber dazu muss weit mehr und besseres Datenmaterial zur Verfügung stehen, als man es für Laborreaktionen besitzt (Hoffmann *et al*, 2001).

Neben dem Verhalten der verwendeten Chemikalien und ihrer oft unbekanntem Metaboliten in der Umwelt, müssten auch die Mengen der Stoffe, die in die Umwelt gelangen, beurteilt werden. Auch hier fällt die Abschätzung schwer. Beim Arbeiten und Entsorgen nach Vorschrift sollten eigentlich alle Abfälle, nach entsprechender Behandlung, am Ende als inerte Materialien in der Umwelt abgelagert sein. Unfälle, Unachtsamkeit und unsachgemäßer Umgang führen aber immer wieder dazu, dass Stoffe unkontrolliert in die Umwelt gelangen. Wie groß der Anteil der auf diesem Wege frei gesetzten Stoffe ist, kann aufgrund der Vielzahl der Einflussparameter kaum festgestellt werden.

Ein weiterer Kritikpunkt der beschriebenen Kennzahlen ist ihr strikter Bezug auf Reaktion und Aufarbeitung. Zwar ist es nach der Recherche dieser vor- und nachgelagerten Prozesse möglich, Kennzahlen wie den E-Faktor auf diese zu erweitern, aber schon der Energieverbrauch und die Abfallströme dieser Prozesse sind meist nicht dokumentiert und damit nicht zu bewerten. Der für die Recherche benötigte Zeitaufwand wäre mit dem einer ausführlichen und ganzheitlichen Bilanzierung vergleichbar. Für eine Kennzahlbildung erscheint damit der Aufwand als zu hoch.

## **4. Optimierungspotenziale von Laborreaktionen - Sustainable Synthesis Optimisation Rules**

Im Verlaufe dieser Arbeit konnten einige allgemeingültige Schwachstellen von Laborreaktionen ermittelt werden. Die beiden wichtigsten Bereiche waren der Verbrauch elektrischer Energie sowie der Ressourcenverbrauch. Unter Anwendung einer ganzheitlichen Betrachtungsweise lässt sich feststellen, dass diese beiden Schwachstellen unmittelbar verknüpft sind. Hoher Energieverbrauch bedeutet einen erhöhten Verbrauch von Ressourcen, vor allem von Primärenergieträgern wie Erdgas, Erdöl und Kohle, während ein hoher Ressourcenbedarf auch einen erhöhten Verbrauch an Energie bedeutet, die zur Veredlung der Ausgangsmaterialien notwendig ist. Die erkannten allgemeinen Schwachstellen der Laborreaktionen lassen sich mit Hilfe „einfacher“ Maßnahmen optimieren bzw. schon bei der Reaktionsplanung vermeiden. Zu diesem Zweck wurden nachfolgend Optimierungsregeln, die „Sustainable Synthesis Optimisation Rules (SUSOR)“, aufgestellt. Durch konsequente Anwendung dieser Regeln kann ein aus ökologischer Sichtweise bedeutender Beitrag zur nachhaltigen Entwicklung im Bereich der Chemie geleistet werden.

### **4.1. Sustainable Synthesis Optimisation Rules - 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 (vgl. 3.4.1) hat seine Ursache überwiegend in hohen Energieverlusten an die Umgebung. Diese Verluste werden ihrerseits von den in Abschnitt 3.4.1 beschriebenen Faktoren beeinflusst. Nachfolgend werden „Sustainable Synthesis Optimisation Rules“ definiert, deren Anwendung zu einer Reduktion der Energieverluste bei Laborreaktionen führt.

**Thermische Isolation**

Die Versuchsanordnungen sind bestmöglich zu isolieren.

**SUSOR 1: Thermische Isolation**

Durch Isolation kann der 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 (vgl. 3.4.1). 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.

**SUSOR 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.

**SUSOR 3: Geräteauswahl**

Auf den beiden bereits formulierten Regeln 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 Energieeintrages (z.B. Mikrowelle oder Ultraschall) können positive Effekte bewirken.

**SUSOR 4: Energieeintrag**

Neben hohen Energieverlusten durch Abgabe thermischer Energie an die Umgebung, gibt es noch andere Bereiche, die zum Energieverbrauch von Laborsynthesen beitragen. Ein solcher Bereich ist aufgrund der Zusammenhänge beim Aufheizen und halten der Reaktionstemperatur (vgl. 3.4.1) der Einsatz von Hilfsstoffen.

 **$c_p$  Hilfsstoffe**

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

**SUSOR 5: spezifische Wärmekapazität Hilfsstoffe**

Den in dieser Arbeit zur Gruppe der Hilfsstoffe gezählten Lösungsmitteln muss aufgrund des meist hohen Anteils an der Gesamtreaktionsmischung besondere Bedeutung beigemessen werden. Aus diesem Grund werden die Anforderungen an das zu verwendende Lösungsmittel in einer eigenen Regel benannt.

 **$c_p$  Lösungsmittel**

Lösungsmittel sind unter Berücksichtigung der spezifischen Wärmekapazität und der notwendigen Reaktionstemperatur auszuwählen.

**SUSOR 6: spezifische Wärmekapazität Lösungsmittel**

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



## 4.2. Sustainable Synthesis Optimisation Rules - Minimierung Ressourcen- und Energieverbrauch

Ein großer Einsatz von Auxiliaren 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 (vgl. 3.4.1) und wirkt sich aus ganzheitlicher Sicht auf den Ressourcen- und Energieverbrauch in den Vorketten aus. Aus den in dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen konnte abgeleitet werden, dass Hilfsstoffe oft über das notwendige Maß hinaus eingesetzt werden.

*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.

### **SUSOR 7: Hilfsstoffmenge**

Dem Hilfsstoff Kühlwasser kommt, ähnlich der Lösungsmittel, aufgrund seines Anteils am Stoffverbrauch einer Reaktion große Bedeutung zu. Der Kühlwasserverbrauch kann durch den Einsatz eines Kühlkreislaufes oder eines Kryostaten verringert werden, dadurch erhöht sich aber der Energieverbrauch.

*Kühlwasser* Der Kühlwasserfluss ist auf das notwendige Minimum einzustellen. Ein Kühlwasserkreislauf kann sich vorteilhaft auf die Umweltlast einer Reaktion auswirken.

### **SUSOR 8: Kühlwasser**

Wird Eis bei Reaktionen zur Kühlung benötigt (vgl. 3.3), ist der Einsatz aufgrund des hohen Energieverbrauchs bei der Herstellung auf das notwendige Maß zu beschränken.

*Eis* Eis zur Reaktionskühlung ist unter Berücksichtigung der Reaktionssicherheit so sparsam als möglich zu verwenden.

**SUSOR 9: Eis**

Neben der Quantität der eingesetzten Stoffe hat auch die Qualität deutlichen Anteil an der Umweltlast von Laborsynthesen. Obwohl in dieser Arbeit keine speziellen Untersuchungen zur stofflichen Wirkung vorgenommen wurden, können einige Regeln unter besonderer Berücksichtigung der Hilfsstoffe formuliert werden.

### **4.3. Sustainable Synthesis Optimisation Rules - Minimierung Toxizitätspotenziale**

Bei der Formulierung von Optimierungsregeln im Bereich „Minimierung Toxizitätspotenziale“ werden die Edukte nicht berücksichtigt. Zwar wäre eine Optimierung hin zu generell nicht toxischen Ausgangsstoffen wünschenswert, aber eine Variationen der Edukte zum Erreichen 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.

*Toxizität Lösungsmittel* Bei der Auswahl von Lösungsmitteln ist auch deren Toxizitätspotenzial zu berücksichtigen. Die Stoffe dürfen nicht in die Umwelt gelangen.

**SUSOR 10: Toxizität Lösungsmittel**

*Toxizität Hilfsstoffe* Bei der Auswahl von Hilfsstoffen ist deren Toxizitätspotenzial zu berücksichtigen. Nach Gebrauch müssen diese Stoffe recycelt oder umweltgerecht entsorgt werden.

**SUSOR 11: Toxizität Hilfsstoffe**

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

#### **4.4. Sustainable Synthesis Optimisation Rules - 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, außer man beschränkt sich beim Einsatz auf die für die Reaktion gerade notwendige Stoffmenge. 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 vorgelagerten Prozessen sind bei der Stoffauswahl zu berücksichtigen.
------------------	---

##### ***SUSOR 12: Berücksichtigung vorgelagerter Prozesse***

Die Berücksichtigung der aufgestellten Optimierungsregeln kann helfen, den Energie- und Ressourcenverbrauch von Laborreaktionen sowie deren Umweltlasten deutlich zu mindern. Ferner können durch eine konsequente Anwendung der „Sustainable Synthesis Optimisation Rules“ bereits in der Ausbildung spätere Entscheidungsträger für die Belange einer nachhaltigen Entwicklung sensibilisiert werden. In der Ausbildung gibt es weitere Aspekte, die helfen können, den Gedanken des „Sustainable Development“ frühzeitig zu etablieren.

Im Rahmen des Projektes „nachhaltiges organisches Praktikum (NOP)“ (DBU, unveröffentlicht) wurden viele dieser Sachverhalte diskutiert. Ein Vorschlag, wie die einzelnen Bereiche zu verknüpfen und aufzubereiten sind, wurde vom Verfasser dieser Arbeit entwickelt und soll nachfolgend vorgestellt werden. Die Verknüpfung von Inhalt und Form ist dabei ein wesentlicher Punkt.

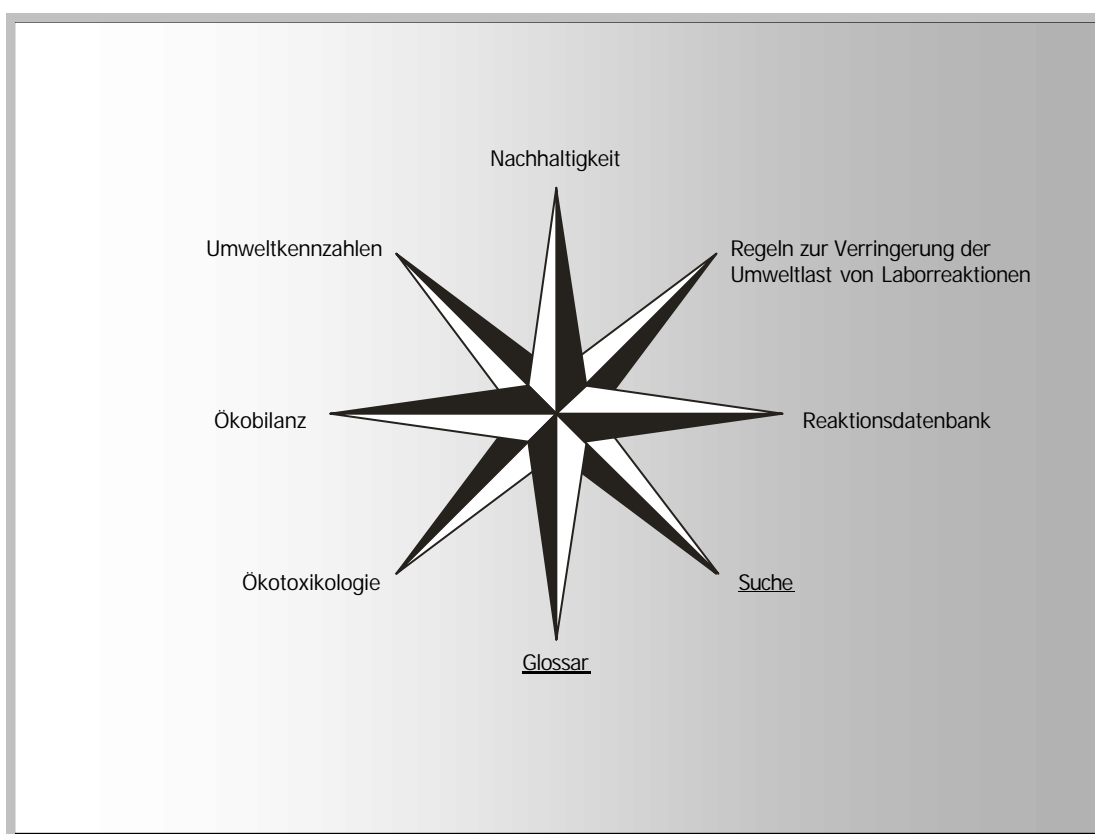
## 5. NOP - Ein Prototyp für die Internetpräsentation

Neben den klassischen Inhalten eines Praktikumsbuches soll das „NOP“ die Belange des „Sustainable Development“ besonders berücksichtigen. Dazu gehört z.B., dass auf die Verwendung toxischer Stoffe weitgehend verzichtet wird, dass alternative und ressourcenschonende Syntheseverfahren entwickelt werden, aber auch, dass die Umweltwirkung von Stoffen bekannt und ihr Entsorgungsweg beschrieben ist. Auch allgemeine, die unterschiedlichen Belange der in diesem „Buch“ aufgeführten Bereiche beschreibende, Texte müssen in einem „nachhaltigen“ Praktikumsbuch zwingend enthalten sein. Weiterhin sollen Beiträge zur Bewertung von Reaktionen - auch aus ganzheitlicher Sichtweise - nicht fehlen. Die in dieser Arbeit vorgestellten Kennzahlen, die identifizierten Schwachstellen sowie die daraus abgeleiteten SUSOR sind Teil dieses Abschnittes Bewertung. Da die unter diesem Themenschwerpunkt zusammengefassten Bereiche in der Internetversion verknüpft sind, wurde dieses Kapitel in die Arbeit aufgenommen. Bevor einige Präsentationsbeispiele des Prototyps für den Internetauftritt vorgestellt werden, soll in einem kurzen Abschnitt der Vorteil des Online-Praktikums im Vergleich zu gedruckten Praktikumsbüchern dargestellt werden.

Der Vorteil, den eine internetbasierte Version des Praktikums im Vergleich zu herkömmlichen „Papierbüchern“ bietet, ist neben der leichten Zugänglichkeit auch die Möglichkeit, sich über viele Buchseiten hinziehende Beschreibungen zu vermeiden. Durch geschicktes Wählen unterschiedlicher Hierarchieebenen kann der Benutzer vielmehr selbst den Grad der Information bestimmen und so gelenkt die chemische Reaktion im Focus belassen. Über zusätzliche Fragen im Auswerteprotokoll lässt sich sicherstellen, dass die wichtigen Inhalte auch bearbeitet wurden. Außerdem erlaubt eine Internetpublikation eine rasche Aktualisierung der Inhalte. Das so gestaltete Praktikum will Vorbild für andere Praktika sein, die direkt oder indirekt einen Beitrag zu einer zukunftsfähigen Entwicklung unserer Gesellschaft leisten. Nachfolgend sollen die wesentlichen Teile der Präsentation in ihrem derzeitigen Ausbaurzustand vorgestellt werden.

## 5.1. Einstiegsseite

Auf der Einstiegsseite sollte explizit dargestellt sein, was auf den folgenden Seiten an Information zu finden ist. Um diesen Überblick zu verschaffen und weiterhin einen leichten Zugang zu den unterschiedlichen Bereichen der im Rahmen des Projektes bearbeiteten Fragestellungen zu erreichen, wurde ein Navigationswerkzeug erstellt (Abb. 32). Über Verknüpfungen lassen sich die unterschiedlichen Bereiche nun direkt anwählen. Um zu vermeiden, dass der Betrachter sich auf tiefer liegenden Hierarchieebenen „verirrt“, besitzen alle diese Ebenen einen Verweis, der direkt zu dieser Einstiegsseite zurückführt und eine erneute Auswahl ermöglicht.



**Abb. 32: Einstiegsseite - Vorschlag Präsentation des Praktikums im Internet**

Durch Anwählen der jeweiligen Themen gelangt man auf tiefer liegende Hierarchieebenen, die Kapiteln in Büchern vergleichbar sind. Nachfolgend soll der Aufbau der unterschiedlichen Hierarchieebenen am Beispiel der Seiten zur Nachhaltigkeit dargestellt werden.

## 5.2. Aufbau und Inhalt der unterschiedlichen Seiten

Durch eine Auswahl der gewünschten Thematik im Navigationsinstrument gelangt man auf die entsprechenden Seiten der ersten Hierarchieebene. Auch hier gibt es zu jeder Thematik wiederum eine Einstiegsseite (Abb. 33), die zum Thema hinführt. Über eine Navigationsleiste im linken Bereich der Seite können nun die unterschiedlichen Beiträge zum Thema ausgewählt werden, die auf der restlichen zur Verfügung stehenden Fläche präsentiert werden (Abb. 34). Auf den Seiten der ersten Hierarchieebene wurde versucht, den Inhalt zwar vollständig jedoch so knapp als möglich zu formulieren. Weiterführende Informationen werden dem Leser bei Interesse in einer anderen Ebene angeboten. Auch hier führen Verknüpfungen zu den entsprechenden Inhalten.

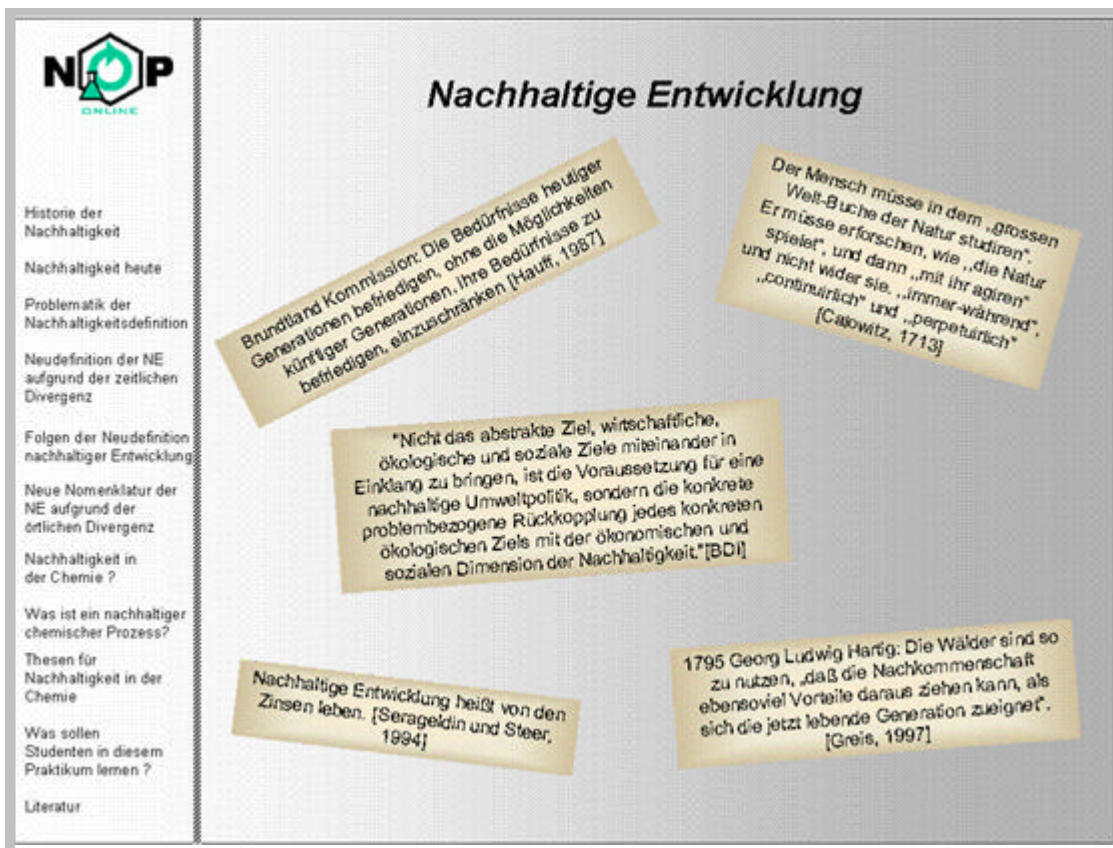


Abb. 33: Hierarchieebene 1 (Einstiegsseite) - Vorschlag Internetpräsentation



**NOIP**  
ONLINE  
Navigation

- Histoire der Nachhaltigkeit
- Nachhaltigkeit heute
- Problematik der Nachhaltigkeitsdefinition
- Neudefinition der NE aufgrund der zeitlichen Divergenz
- Folgen der Neudefinition nachhaltiger Entwicklung
- Neue Nomenklatur der NE aufgrund der örtlichen Divergenz
- Nachhaltigkeit in der Chemie ?
- Was ist ein nachhaltiger chemischer Prozess?
- Thesen für Nachhaltigkeit in der Chemie
- Was sollen Studenten in diesem Praktikum lernen ?
- Literatur

## Nachhaltige Entwicklung heute

Im Juni 2001 trafen die Mitglieder der Europäischen Union in Göteborg zusammen, um über die weitere Zukunft Europas und notwendige politische Leitlinien zu beraten. Dabei wurde unter anderem folgender Beschluss gefasst:

*Nachhaltige Entwicklung, d. h. die Erfüllung der Bedürfnisse der derzeitigen Generation ohne dadurch die Erfüllung der Bedürfnisse künftiger Generationen zu beeinträchtigen, ist ein grundlegendes Ziel der Verträge. Hierzu ist es erforderlich, die Wirtschafts-, Sozial- und Umweltpolitik so zu gestalten, dass sie sich gegenseitig verstärken. Gelingt es nicht, Tendenzen umzukehren, die die künftige Lebensqualität bedrohen, so werden die Kosten für die Gesellschaft drastisch ansteigen oder diese Tendenzen werden unumkehrbar. Der Europäische Rat begrüßt die Vorlage der Mitteilung der Kommission über nachhaltige Entwicklung, in der wichtige Vorschläge enthalten sind, um diesen Tendenzen Einhalt zu gebieten.*

Auch hier werden, wie im Bericht der Enquete-Kommission „Schutz des Menschen und der Umwelt“ des 13. Deutschen Bundestages, Entwicklungsziele, die Neugestaltung der Politik zur Verstärkung der Nachhaltigkeitstendenzen formuliert. Wie in zahlreichen anderen Beschlüssen und Berichten jedoch auch, bleibt die Frage, wie das Ziel erreicht werden soll, ebenso unbeantwortet, wie die Frage nach der Messbarkeit der nachhaltigen Entwicklung. Dazu benötigt man bestimmte **Indikatorparameter**, die für den Bereich der Ökologie zwar gut, für den Bereich der Ökonomie jedoch nur mäßig und für den Bereich der sozialen Nachhaltigkeit nahezu nicht definiert sind [Schvery, 2001].

→ mehr

Abb. 34: Hierarchieebene 1 (Inhalt) - Vorschlag Internetpräsentation

Von diesen tiefer liegenden Ebenen, die ausführliche Informationen zu dem gewünschten Thema liefern, führen Verknüpfungen wieder zurück zur Startseite der ersten Hierarchieebene. Eine Verknüpfung zum Navigationsinstrument auf der Startseite ist nicht vorgesehen.

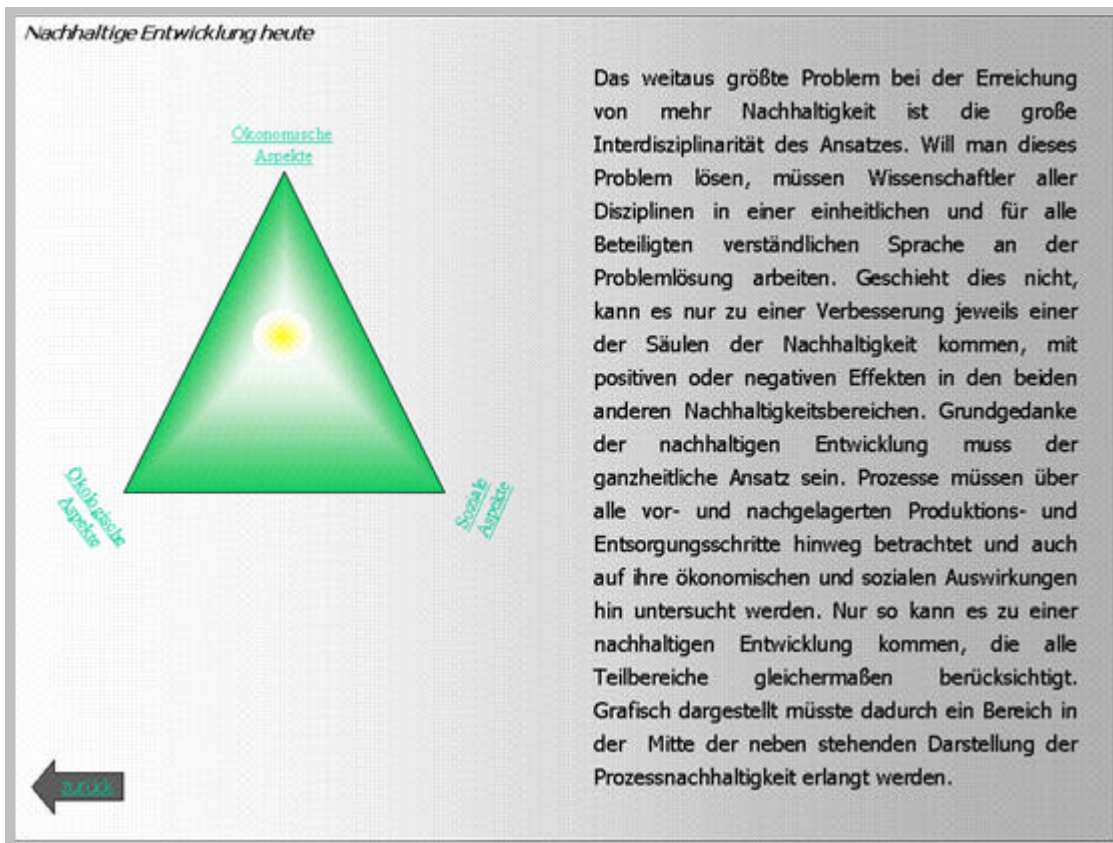


Abb. 35: Hierarchieebene 2 (Inhalt) - Vorschlag Internetpräsentation

### 5.3. Besonderheiten der Präsentation

Eine Präsentation im Internet bezieht ihre Attraktivität unter anderem auch aus der Möglichkeit, verschiedene Inhalte über Verknüpfungen zu verbinden. Dies ist besonders dann interessant, wenn sich verschiedene Bereiche überschneiden. Der hier präsentierte Internetauftritt setzt Verknüpfungen gezielt ein, damit Leser das Informationsangebot optimal nutzen können. Eingefügte Verknüpfungen beispielsweise verbinden zu erklärende Fachtermini mit einem Glossar oder Literaturverweise direkt mit dem entsprechenden Eintrag im Literaturverzeichnis. Wichtigstes Anwendungsbeispiel jedoch ist der Querverweis aus einem Themengebiet in ein anderes.



In der vorliegenden Präsentation wurden solche Querverweise eingefügt, um Wiederholungen zu vermeiden und um sachgebietsübergreifende Anknüpfungspunkte aufzuzeigen. Neben den Verknüpfungen leistet auch die Möglichkeit, verschiedene Sachverhalte mit Bild oder Ton zu animieren, einen didaktisch wertvollen Beitrag zur Attraktivität der Präsentationen im Internet. Solche Animationen sind besonders dann interessant, wenn schwer verständliche Bereiche damit anschaulich dargestellt werden können. Bei der Erstellung des Prototyps des Internetauftritts wurde auf Animation aufgrund des hohen Aufwandes jedoch weitestgehend verzichtet. Die aktuelle Version dieses Prototyps befindet sich auf einer dieser Arbeit beigelegten CD-ROM. Die zwischenzeitlich auf der Grundlage des Prototyps erstellten Internetseiten finden sich unter:

<http://eckehaat.uft.uni-bremen.de/praktikum/?versuch=koe003>

## 6. Diskussion der Ergebnisse

Mit Hilfe der Untersuchungen der ausgewählten Synthesen konnten verschiedene allgemeine Schwachstellen von Laborsynthesen identifiziert werden. Die im Bereich Energieverbrauch erkannten Problembereiche lassen sich vielfach auf die vorherrschende Laborpraxis und die mangelhafte technische Laborausstattung zurückführen. Die ungenügende Laborausrüstung wiederum hat ihre Ursache zum einen in den fehlenden finanziellen Möglichkeiten der Ausbildungslabore, die keine Geräte nach dem Stand der Technik zur Verfügung stellen können. Zum anderen sind die Laborgerätehersteller verantwortlich, die ihre Produkte oft nicht in Hinblick auf Ressourcen- und Energieeinsparungen entwickeln.

Die im Energieverbrauch identifizierten Schwachstellen verdeutlichen den Einfluss, den die gewählte Reaktionstechnik auf die „Nachhaltigkeit“ chemischer Reaktionen nehmen kann. Dieser Einfluss ist auch bei großtechnischen Anlagen von besonderer Bedeutung, die Auswahl der „richtigen“ Reaktionstechnik daher von Interesse (Jiménez-González *et al.*, 2001).

Die Schwachstellen im Ressourcenverbrauch können aufgrund der untersuchten Reaktionen ebenfalls als allgemeingültig angesehen werden. Hier sind vor allem die verschiedenen Schritte der Aufarbeitung Ursache für einen hohen Ressourcenverbrauch. Diese Tatsache scheint zum einen ebenfalls der vorherrschenden Laborpraxis geschuldet. Zum anderen wurden die in dieser Arbeit untersuchten Praktikumsvorschriften nicht mit dem Ziel erstellt, den Energie- und Ressourcenverbrauch zu optimieren. Auf der Grundlage der Ergebnisse kann festgestellt werden, dass dem Bereich der Aufarbeitung neben der eigentlichen Reaktion bei der Optimierung eines Synthesepraktikums besondere Bedeutung beizumessen ist.

Die in den Laborreaktionen ermittelten Schwachstellen sind in ihrer Größe für die Belange der nachhaltigen Entwicklung nicht erheblich. Für das Ziel, ein nachhaltiges und ganzheitliches Denken bereits in der Ausbildung zu integrieren, sind die erkannten Schwachstellen jedoch von hohem Wert.

Die daraus ableitbaren Optimierungsregeln (SUSOR Kapitel 4) sollen helfen, die auch in großtechnischen Anlagen vorhandenen Problemkreise des Energie- und Stoffstrommanagements bereits im Praktikum kennen zu lernen, deren Ursachen zu identifizieren und Optimierungen vorzunehmen. Die in dieser Arbeit aufgestellten „Sustainable Synthesis Optimisation Rules“ entsprechen dabei teilweise den Vorschlägen, die von Wissenschaftlern bereits zur Reduktion der Umweltlast chemischer Synthesen eingebracht wurden. So lassen sich Analogien z.B. mit den von Anastas und Warner (1998) aufgestellten Prinzipien der Green Chemistry ausmachen. In ihrer Aufstellung führen sie unter Punkt 6 aus: „Energy requirements should be recognized for their environmental and economic impacts and should be minimized. Synthetic methods should be conducted at ambient temperature and pressure.“ Die „Sustainable Synthesis Optimisation Rules“ 1-5 beziehen sich entsprechend auf diese Forderung. Auch die Forderung zur Berücksichtigung der Umweltwirkung der in Reaktionen verwendeten Stoffe (SUSOR 10 & SUSOR 11) ist unter diesen Prinzipien zu finden. „Wherever practicable, synthetic methodologies should be designed to use and generate substances that possess little or no toxicity to human health and the environment“. Neben den Vergleichen mit anderen Arbeiten wurden die aufgestellten SUSOR auch im Rahmen des Projektes „NOP“ in einer Art „critical review“ ausführlich diskutiert. Da jedoch die beteiligten Hochschulvertreter mit den in dieser Arbeit aufgestellten Regeln vertraut sind, ist eine weiterführende Diskussion der SUSOR außerhalb dieses Kreises ausdrücklich erwünscht.

Die Lasten der vor- und nachgelagerten Prozesse, die in dieser Arbeit von zentraler Bedeutung waren, bleiben in vielen Arbeiten unberücksichtigt. Gerade aber diese Lasten werden bei der Reduktion der Umweltlasten einer Reaktion künftig eine große Rolle spielen. Erst wenn auch die Prozesse zur Erstellung der Edukte- und Hilfsstoffe optimiert sind, kann eine Reaktion aus ökologischer Sicht den Zustand der Nachhaltigkeit erreichen.

Der Wert von Umweltkennzahlen zur Identifikation von Schwachstellen konnte in dieser Arbeit ebenfalls dargestellt werden. Mit ihrer Hilfe lassen sich Reaktionen auf ihre Umweltlasten untersuchen. Es können damit sowohl besondere Schwachstellen als auch kleinere Abweichungen von der „Optimallinie“ aufgedeckt werden. Die dabei geschaffene Möglichkeit nicht nur die Reaktion als Ganzes zu betrachten, sondern auf verschiedene Bereiche aufzuteilen, schafft eine bessere Transparenz. So können auch Probleme identifiziert werden, die nicht aus der eigentlichen Reaktion stammen, sondern beispielsweise aus einer schlecht gewählten Aufarbeitungsmethode herrühren. Die heutzutage verfügbare Datenbasis in Programmen und Datenbanken, beispielsweise dem „Solvent selection guide“ (Curzons, 2001), ermöglicht und erleichtert ein solches Vorgehen.

Bei der Bewertung der Kennzahlen ist die Frage, auf welcher Grundlage die Entscheidung, ob eine Reaktion zu optimieren ist oder nicht, gefällt werden kann, noch nicht abschließend geklärt. Aufgrund der Unterschiede der eingesetzten Stoffe in ihren physikalischen und chemischen Eigenschaften, kann kein allgemeiner Maßstab zur Entscheidungsfindung generiert werden. Dem Bearbeiter selbst bleibt nach wie vor die Entscheidung überlassen. An diesem Punkt könnten weitere Forschungen angeknüpft werden.

Bezüglich der Berechnung von Umweltkennzahlen sind ebenfalls weitere Arbeiten anzuschließen. Sind Kennzahlen wie Ausbeute, Selektivität und Atomökonomie aufgrund einfacher Messmethoden bzw. Berechnungen leicht möglich, stellen sich spätestens bei der Bewertung des Energieverbrauchs Probleme ein, wenn entsprechende Messinstrumente nicht zur Verfügung stehen. Um dieser Problematik zu entgehen, wird aufbauend auf den Ergebnissen dieser Arbeit im Rahmen einer Diplomarbeit (Pitzel, unveröff.), der Energieverbrauch von Standardlaboroperationen ermittelt werden.

Dazu werden Laboroperationen wie Rühren, Destillieren, Absaugen oder die Nutzung von Vakuum auf ihren Energieverbrauch hin untersucht und als Tabellenwerk bzw. als Datenbank dem Nutzer zur Verfügung gestellt.

Durch Summation des Verbrauchs der einzelnen durchgeführten Schritte, lässt sich daraus der Gesamtenergieverbrauch gut abschätzen und die Kennzahlen daraus bestimmen.

Bei der Optimierung von Reaktionen mit Kennzahlen konnte auch die Frage, in welcher Art und Weise die Vorketten einbezogen werden müssen, noch nicht abschließend geklärt werden. Da die hierzu notwendigen Daten nur in langwierigen Prozessen generiert werden können, die dem Ziel einer schnell zu erstellenden Kennzahl konträr ist, muss wohl auch künftig auf die Berücksichtigung der Vorketten verzichtet werden.

## 7. Literatur

- Anastas, P.T. und Warner, J.C. (1998). *Green Chemistry - Theory and Practice*. Oxford: Oxford University Press.
- Bahadir, M., Parlar, H. und Spitteller, M. (2000). *Springer-Umweltlexikon* (2. Aufl.). Berlin: Springer-Verlag.
- BASF (1999). *Die Ökoeffizienz-Analyse der BASF* [On-line]. Ludwigshafen: BASF AG. Available: <http://www.basf.de/de/umwelt/oekoeffizienz/>
- BASF (2000). *Umweltbericht 2000*. Ludwigshafen: BASF AG.
- Bayer (2001). *Sustainable Development Report 2001*. Leverkusen: Bayer AG.
- Beck, A., Scheringer, M. und Hungerbühler, K. (2000). Fate modelling within LCA. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 5(2000), 1-10.
- Binswanger, H.C. (1998). Der Frevel Erysichthons als Ursprung der ökologischen Krise. In Binswanger, H.C., *Die Glaubensgemeinschaft der Ökonomen*. München: Gerling Akademie Verlag.
- BMBF-Verbundvorhaben (1998). *Ganzheitliche Bilanzierung/Bewertung von Reinigungs-/ Vorbehandlungstechnologien in der Oberflächenbehandlung* (FKZ: 01ZH9410/6 und ZH 941 C1) Endbericht, Hannover.
- Braun, S. (1999). Kriterien für nachhaltiges Wirtschaften. *UMIS-MAGAZIN* [On-line]. Available: <http://www.umis.de>
- Burgess, A.A. und Brennan, D.J. (2001). Application of life cycle assessment to chemical processes. *Chemical Engineering Science*, 56(2001), 2589-2604.

- Cave, G.W.V., Raston, C.L. und Scott, L. (2001). Recent advances in solventless organic reactions: towards benign synthesis with remarkable versatility. *CHEMICAL COMMUNICATIONS*, 21, 2159-2169.
- CEFIC (2000). *CEFIC Statement on an integrated approach towards Sustainable development*. Brüssel: European Chemical Industry Council (CEFIC).
- Chen, H., Barna, B.A., Rogers, T.N. und Shonnard, D.R. (2001). A screening methodology for improved solvent selection using economic and environmental assessments. *Clean Products and Processes*, 3(3), 290-302.
- CMA (1998). *Responsible Care: A Public Commitment*. Washington D.C.: Chemical Manufacturer Association.
- Curran, M.A. (2000). Life Cycle Assessment: An International Experience. *Environmental Progress*, 19(2), 65-71.
- Curzons, A.D. (2001). Design for Sustainability Toolkit. *Book of Lectures - International Conference Sustainable Chemistry - Metrics and Measurements*. Frankfurt a.M.: DECHEMA e.V.
- Curzons, A.D., Constable, D.C. und Cunningham, V.L. (1999). Solvent selection guide: a guide to the integration of environmental, health and safety criteria into the selection of solvents. *Clean Products and Processes*, 1(2), 82-90.
- DBU unveröffentlicht. *Erarbeitung eines Organisch-Chemischen Praktikums für das neue Jahrtausend - Ein Beitrag zu mehr Nachhaltigkeit*. Osnabrück: Deutsche Bundesstiftung Umwelt.
- Deutscher Bundestag (Hrsg.) (1997). Enquete-Kommission „Schutz des Menschen und der Umwelt“ des 13. Deutschen Bundestages. *Zur Sache 1/97, Konzept Nachhaltigkeit - Fundamente für die Gesellschaft von morgen*. Berlin: Deutscher Bundestag, Referat Öffentlichkeitsarbeit.

- Deutscher Bundestag (Hrsg.) (1998). Enquete-Kommission „Schutz des Menschen und der Umwelt“ des 13. Deutschen Bundestages. *Konzept Nachhaltigkeit - Vom Leitbild zur Umsetzung*. Berlin: Deutscher Bundestag, Referat Öffentlichkeitsarbeit.
- Diehlmann, A. und Kreisel, G. (2002). Rate the Sustainability Grade of Your Scientific Work. *Green Chemistry*. London: The Royal Society of Chemistry, 02/2002. 15-17.
- Eissen, M. und Metzger, J.O. (2001). *EATOS - Environmental Assessment Tool for Organic Synthesis* [On-line]. Oldenburg: Universität Oldenburg. Available: <http://www.chemie.uni-oldenburg.de/oc/metzger>
- Eissen, M., Metzger, J.O., Schmidt, E. und Schneidewind, U. (2002). 10 Jahre nach Rio - Konzepte zum Beitrag der Chemie zu einer nachhaltigen Entwicklung. *Angewandte Chemie*, 114 (3), 402-425.
- Elsom, D.M. (1992). *Atmospheric Pollution - A Global Problem* (2nd. ed.). Oxford: Blackwell Publishers.
- Europäischer Rat (2001). *Schlussfolgerungen des Vorsitzes Europäischer Rat (Göteborg) 15. und 16 Juni 2001* [On-line]. Göteborg: Europäischer Rat. Available: [http://www.bundesregierung.de/Anlage6951/Schlussfolgerungen\\_incl\\_Anhang.pdf](http://www.bundesregierung.de/Anlage6951/Schlussfolgerungen_incl_Anhang.pdf)
- Gasteiger, J. und Kleinoeder, T. (1998). *Parameter Estimation for the Treatment of Reactivity Applications - PETRA* [On-line]. Available: <http://www2.chemie.uni-erlangen.de/software/petra/>
- Goedkoop, M. und Spriensma, R. (1999). *The Eco-indicator 99 - A damage oriented method for Life Cycle Impact Assessment. Methodology Report*. NL-Amersfoort: PRé Consultants B.V..
- Goedkoop, M. Spriensma, R. (2000). *The Eco-indicator 99 - A damage oriented method for Life Cycle Impact Assessment. Methodology Report* (2. Aufl.). NL-Amersfoort: PRé Consultants B.V..



- Grassmann, P., Widmer, F. und Sinn, H. (1997). *Einführung in die thermische Verfahrenstechnik* (3. Aufl.). Berlin: Verlag Walter de Gruyter.
- Greis, F. (1997). *Wörterbuch zur lokalen Agenda 21* [On-line]. Available: <http://www.uni-mainz.de/~forum/infos/lexikon.html>
- Grober, U. (1999). Der Erfinder der Nachhaltigkeit. *Die Zeit*, 25.11.99, 98, Hamburg: Zeit-Verlag.
- Hagen, J. und Hopp, V. (Hrsg.) (1992). *Chemische Reaktionstechnik - Eine Einführung mit Übungen*. Weinheim: VCH Verlagsgesellschaft.
- Hauf, V. (Hrsg.) (1987). *Unsere gemeinsame Zukunft. Der Brundtland-Bericht der Weltkommission für Umwelt und Entwicklung*. Greven: Eggenkamp.
- Held, M. (2000). Geschichte der Nachhaltigkeit. *Natur und Kultur*, 1/1, 17-31.
- Hoffmann, V. H., Hungerbühler, K. und McRae, G. J. (2001). Multiobjective Screening and Evaluation of Chemical Process Technologies. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 40 (21), 4513-4524.
- Hofmeister, S. (2001). Zwischen Klugheits- und Moralgebot: Das Leitbild Nachhaltige Entwicklung als Herausforderung zur Erneuerung der Ökonomie jenseits ihrer Bindungen an die dichotomen Konstrukte des sozialen Geschlechter- und Naturverhältnisses. In Altner, G. und Michelsen, G. (Hrsg.), *Ethik und Nachhaltigkeit. Band 5*, 155-17. Frankfurt a.M.: Verlag für Akademische Schriften.
- Hungerbühler, K. (2001). Assessment of Environmental Impacts in Early Stages of Chemical Process Design. *Book of Lectures. International Conference - Sustainable Chemistry - Metrics and Measurements*. Frankfurt a.M.: DECHEMA e.V.
- ICCA (2002). *The ICCA Chemical Sector Report to UNEP for the World Summit on Sustainable Development*. International Council of Chemical Associations. Available: <http://www.icca-chem.org>

- IDARio. Interdepartementaler Ausschuss Rio (Hrsg.) (2001). *Für eine Schweiz mit Zukunft - Standortbestimmung und Perspektiven*. CH-Bern: Direktion für Entwicklung und Zusammenarbeit.
- IFU und IFEU (2001). *Umberto. Ein interaktives Programm zur Erstellung von Ökobilanzen auf der Basis von Stoffstromnetzen (Version 4.0)*. Institut für Umweltinformatik Hamburg GmbH (IFU), Institut für Energie- und Umweltforschung Heidelberg GmbH (IFEU).
- ISO/EN/DIN 14040 (1997). *Umweltmanagement, Ökobilanz, Prinzipien und allgemeine Anforderungen*. Berlin: Deutsches Institut für Normung e.V..
- ISO/EN/DIN 14041 (1998). *Umweltmanagement, Produkt-Ökobilanz, Festlegung des Ziels und des Untersuchungsrahmens sowie Sachbilanz*. Berlin: Deutsches Institut für Normung e.V..
- ISO/EN/DIN 14042 (2000). *Umweltmanagement, Ökobilanz, Wirkungsabschätzung*. Berlin: Deutsches Institut für Normung e.V..
- ISO/EN/DIN 14043 (2000). *Umweltmanagement, Ökobilanz, Auswertung*. Berlin: Deutsches Institut für Normung e.V..
- Jiménez-González, C., Curzons, A.D., Constable, D.J.C., Overcash, M.R. und Cunningham, V.L. (2001). How do you select the "greenest" technology? Development of guidance for the pharmaceutical industry. *Clean Products and Processes*, 3(2001), 35-41.
- Köser, H., Taplick, R. und von Rozycki, C. (2000). Nachhaltigkeitskriterien und Umweltkennzahlen für den betrieblichen Umweltschutz am Beispiel der chemisch-pharmazeutischen Industrie. In H. U. Zabel (Hrsg.) *Sammelband UZU - Band 4: Sustainability als interdisziplinäre Herausforderung (1-14)*. Halle: Universität Halle.
- Kreisel, G. und Diehlmann, A. (2002). Definition einer ökologisch nachhaltigen Chemie. unveröffentlicht. Jena: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Institut für Technische Chemie und Umweltchemie, Chemisch-Geowissenschaftliche Fakultät.

- Krott, M. (2001). Sonderdruck Zukunft Holz - Die Wurzeln des Prinzips der Nachhaltigkeit. *Die Welt*, 17.10.2001, 16, Berlin: Axel Springer.
- Kuhenn, H. und Staudt, E. (Hrsg.) (1997). *Ökobilanzen: Ursachen, Ausprägungen und Auswirkungen von Freiräumen auf den Einsatz von Ökobilanzen durch Unternehmen*. Bochum: Institut für angewandte Innovationsforschung.
- Loew, T. und Hjálmarsdóttir, H. (1996). Umweltkennzahlen für das betriebliche Umweltmanagement. *Schriftenreihe des IöW 99/96*. Berlin: Institut für ökologische Wirtschaftsforschung GmbH.
- Loew, T. und Kottmann, H. 1996. Umweltkennzahlen im Umweltmanagement [On-line]. *UMIS-MAGAZIN*. Available: <http://www.umis.de>
- Mauch Consulting, INFRAS und Ernst Baseler+Partner AG (2001). *Politik der nachhaltigen Entwicklung in der Schweiz: Standortbestimmung und Perspektiven - Hauptbericht*. CH-Oberlunkhofen: Mauch Consulting.
- Meadows, De., Meadows, Do., Zahn, E. und Milling, P. (1973). *Die Grenzen des Wachstums*. Hamburg: Rohwolt Verlag.
- Mergelsberg, T. (2000). *Nachhaltigkeit - Was ist eigentlich Nachhaltigkeit* [On-line]. Available: <http://mergelsberg.purespace.de/nachhaltigkeit/nachhaltigkeit.htm>
- Mosovsky, J., Dickinson, D. und Morabito, J. (2000). Creating competitive advantage through resource productivity, eco-efficiency, and sustainability in the supply chain. *Proceedings of the 2000 IEEE International Symposium on Electronics and the Environment* (230-237). Piscataway: New York.
- Persson, J.-G. (2001). Eco-indicators in product development. *PROCEEDINGS OF THE INSTITUTION OF MECHANICAL ENGINEERS PART B-JOURNAL OF ENGINEERING MANUFACTURE*, 215(5), 627-635. Bury St. Edmunds: Professional Engineering Publishing LTD.

- Pitzel, C. unveröff. Diplomarbeit, Friedrich-Schiller-Universität Jena, Institut für Technische Chemie und Umweltchemie, Chemisch-Geowissenschaftliche Fakultät.
- Raschke, E. und Hollmann, R. (2001). Strahlungsenergieübertragung in der Atmosphäre: Modellierung und Messung. In *DECHEMA-Kolloquium, CO<sub>2</sub>-Anstieg in der Atmosphäre: Ursache für die Globale Erwärmung?* Frankfurt a.M.: DECHEMA e.V.
- Sachs, W. (2001). Das Kyoto-Protokoll: Lohnt sich seine Rettung? In *Blätter für deutsche und Internationale Politik*, 7/01, 847-857. Bonn: Blätter Verlagsgesellschaft mbh. Available: <http://www.blaetter.de>
- Schering (2000). *Konzern-Umweltbericht*. Berlin: Schering AG.
- Schrott, W. und Saling, P. (2000). Eco-efficiency analysis - testing products for their value to the customer. *Melliand International*, 6, 70-73.
- Schwery, R. und von Burg, D. (2001). *Das Anomiebarometer: Ein Instrument zur Messung der Nachhaltigkeit von Entwicklungsprozessen* [On-line]. Available: <http://www.sad.ch/>
- Sheldon, R. A. (1994). Consider the environmental quotient. *CHEMTECH*, 03(94), 38 - 47.
- Sheldon, R. A. (2000). Atom utilisation, E factors and the catalytic solution. *COMPTES RENDUS DE L ACADEMIE DES SCIENCES SERIE II FASCICULE C-CHIMIE*, 3(7), 541-551.
- Stern, A.C., Boubel, R.W., Turner, D.B. und Fox, D.L. (1984). *Fundamentals of Air Pollution* (2. Aufl.). London: Academic Press. 2.
- Striegel, G. (2000). *Entwicklung von Methodenbausteinen für die Ökobilanzierung technischer Verfahren am Beispiel von zwei Fallstudien*. Unveröff. Dissertation, Friedrich-Schiller-Universität Jena, Institut für Technische Chemie und Umweltchemie, Chemisch-Geowissenschaftliche Fakultät.

- Trost, B.M. (1991). The atom economy - a search for synthetic efficiency. *Science*, 251, 1471-1477.
- Tundo, P. und Anastas, P. (Hrsg.). (2000). *Green Chemistry - Challenging Perspectives*. Oxford: Oxford University Press.
- Umweltbundesamt (1992). *Ökobilanzen für Produkte, Bedeutung-Sachstand-Persepektiven*. Berlin: Umweltbundesamt.
- Umweltbundesamt (1997). *Nachhaltiges Deutschland, Wege zu einer dauerhaft umweltgerechten Entwicklung*. Berlin: Umweltbundesamt.
- United Nations Commission on Sustainable Development (2002). *Indicators of Sustainable Developments*. New York: United Nations.
- United Nations (1992). *Report of the United Nations Conference on Environment and Development* [On-line].  
Available: <http://www.un.org/esa/sustdev>  
deutsche Fassung: *Umweltpolitik, Konferenz der Vereinten Nationen für Umwelt und Entwicklung im Juni 1992 in Rio de Janeiro*. Bonn: Der Bundesminister für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (Hrsg.).
- VCI (1999). *VCI - Info, Sustainable Development: Wegweiser für die Zukunft*. Frankfurt a.M: Verband der Chemischen Industrie e.V.
- VCI (2001). *Responsible Care Bericht 2001- Daten der chemischen Industrie zu Sicherheit, Gesundheit, Umweltschutz* Frankfurt a.M.: Verband der Chemischen Industrie e.V.
- VKE (2001). *Kunststoff ist Klimaschutz - Energiesparen, Ressourcen schonen*. Frankfurt a.M.: Verband Kunststoffherzeugende Industrie (VKE).
- Vögler, G. (2000). Dachte man in der Antike ökologisch? Mensch und Umwelt im Spiegel antiker Literatur [On-line]. *Forum Classicum*. 4/2000.  
Available: <http://www.forum-classicum.de/>

WBCSD (2002). *Case Studies* [On-line]. Genf: World Buisness Council of Sustainable Development

Available: <http://www.wbcsd.ch/casestud/index-list.htm>

## A. Anhang

### A.1. Arbeitsvorschriften säurekatalysierte Acetalisierung

#### A.1.1. Klassische Umsetzung

**Geräte:** 250 mL Rundkolben, Wasserabscheider, Rückflusskühler, heizbarer Magnetrührer, Ölbad (Heizpilz), Schütteltrichter, Absaugflasche, Exsikkator, Büchnertrichter, Erlenmeyerkolben, Uhrglas

**Chemikalien:** 3-Nitrobenzaldehyd, Ethylenglykol, 4-Toluolsulfonsäure-Monohydrat, Cyclohexan, Natriumhydrogensulfit, Natriumsulfat, Diethylether, Petrolether (40-60).

**Versuchsvorschrift:** In einer trockenen Apparatur, bestehend aus 250 mL Rundkolben mit Magnetrührer, Wasserabscheider und Rückflusskühler werden 3,42 g Ethylenglykol, 7,56 g 3-Nitrobenzaldehyd und 0,40 g 4-Toluolsulfonsäure-Monohydrat in 90 mL Cyclohexan so lange am Wasserabscheider zum Sieden erhitzt, bis sich kein Wasser mehr abscheidet (ca. 2 h).

**Aufarbeitung:** Die noch heiße Reaktionsmischung wird sofort vom öligen Rückstand in einen 250 mL Erlenmeyerkolben abdekantiert und der Erlenmeyerkolben mit einem Uhrglas abgedeckt. Beim Abkühlen kristallisiert das Rohprodukt aus, zur Vervollständigung der Kristallisation wird noch im kalten Wasserbad (ca. 5-10°C) gekühlt. Das Rohprodukt wird abgesaugt und im Exsikkator bei vermindertem Druck (ca. 20 hPa) bis zur Gewichtskonstanz getrocknet. Rohausbeute 9,3 g, Smp. 51 - 53°C. Zur Entfernung von nicht umgesetztem Aldehyd wird das Rohprodukt in 120 mL Diethylether gelöst und mit 20 mL gesättigter Natriumhydrogensulfit-Lösung ausgeschüttelt. Von der organischen Lösung wird nach Trocknen mit Natriumsulfat das Lösungsmittel abgezogen. Der Rückstand wird aus etwa 30 mL einer 1:1 Mischung von Petrolether und Diethylether umkristallisiert. Nach der vollständigen Kristallisation im Eisbad wird über einen Büchnertrichter abgesaugt und im Exsikkator bei vermindertem Druck (ca. 20 hPa) bis zur Gewichtskonstanz getrocknet. Ausbeute 7,8 g (40 mmol, 80%), Smp. 54 - 55°C. Reinheit > 99 %.

### A.1.2. Mikrowellen unterstützte Umsetzung

**Geräte:** 100 mL Zweihalskolben, Glasrohr (NS 29, l: 40 cm) und Magnetrührer; Mikrowellensystem ETHOS 1600, Saugflasche mit Büchnertrichter

**Chemikalien:** 3-Nitrobenzaldehyd; Ethylenglykol; 4-Toluolsulfonsäure-Monohydrat; Petrolether (40-60); Diethylether.

**Versuchsvorschrift:** In einem 100 mL-Zweihalskolben mit Kreuzrührer werden 7,55 g 3-Nitrobenzaldehyd, 3,42 g Ethylenglykol sowie 0,4 g 4-Toluolsulfonsäure-Monohydrat eingewogen und das Reaktionsgefäß im Mikrowellengerät installiert. Der Ansatz wird 5 Minuten mit 900 W bestrahlt. Dabei wird in einem ersten Programmschritt mit Temperaturrampe in 2 Minuten von 110°C auf 130°C hochgeheizt und die obere Solltemperatur für 3 Minuten gehalten. Danach lässt man das Reaktionsgemisch ca. 10 Minuten unter Rühren abkühlen. Das entstandene ölige Produkt wird mit 50 mL kaltem Wasser 15 Minuten gut gerührt. Das ausgefallene Rohprodukt wird abgesaugt und im Exsikkator bei vermindertem Druck (ca. 20 hPa) bis zur Massekonstanz getrocknet.

**Aufarbeitung:** Zur Reinigung wird das Rohprodukt aus einer 1:1 Mischung von Petrolether und Diethylether umkristallisiert. Nach der vollständigen Kristallisation im Eisbad wird über einen Büchnertrichter abgesaugt und im Exsikkator bei vermindertem Druck (ca. 20 hPa) bis zur Massekonstanz getrocknet. Ausbeute: 80 % (7,8 g; 40 mmol), Smp. 54 - 55°C.



## A.2. Arbeitsvorschriften Aromatennitrierung

### A.2.1. Arbeitsvorschrift - Nitrierung von Benzaldehyd

**Geräte:** 250 mL Dreihalskolben, Innenthermometer, Tropftrichter; Magnet-  
heizrührer, Rotationsverdampfer

**Chemikalien:** Benzaldehyd, konz. Schwefelsäure, rauchende Salpetersäure,  
Methyl-t-butylether, NaHCO<sub>3</sub> (5% Lsg.).

**Versuchsvorschrift:** In einem 250 mL Dreihalskolben mit Innenthermometer  
und Tropftrichter werden 19,4 mL konz. Schwefelsäure vorgelegt. Unter  
Eisbadkühlung werden 8,7 mL rauchende Salpetersäure unter Rühren  
zugetropft. Die Temperatur wird unter 10°C gehalten. Innerhalb einer Stunde  
werden in die Nitriersäure 2,2 mL Benzaldehyd so zugetropft, dass die  
Temperatur bei 15°C konstant gehalten werden kann. Das Eisbad wird entfernt  
und die Reaktionsmischung über Nacht verschlossen bei Raumtemperatur  
aufbewahrt.

**Aufarbeitung:** Die Reaktionsmischung wird auf 150 g Eis gegossen, der gelbe  
Niederschlag bei 16 hPa über einen Büchnertrichter abgesaugt und mit 50 mL  
kaltem Wasser gewaschen. Die Rohproduktausbeute beträgt 2,87 g. Der  
feuchte Rückstand wird mit 25 mL Methyl-t-butylether aufgenommen und mit  
25 mL NaHCO<sub>3</sub> (5 % Lsg.) ausgeschüttelt. Die organische Phase wird über  
Natriumsulfat getrocknet und das Solvens am Rotationsverdampfer  
(Bad T 35°C, 300 hPa) abdestilliert. Die Produktausbeute beträgt 1,39 g. Der  
Rückstand wird in 20 mL Wasser umkristallisiert. Nach der Umkristallisation  
können 0,49 g 3-Nitrobenzaldehyd (15.53 %, Smp. 56°C) isoliert werden.

## A.2.2. Arbeitsvorschrift - Nitrierung Toluol

**Geräte:** 250 mL Erlenmeyerweithalskolben, 250 mL Dreihalskolben, Schütteltrichter, Thermometer, Tropftrichter, Destillationsapparatur, Rundkolben, Destillationsaufsatz, Thermometer, Spinne, Magnetprü�rer mit Heizplatte, Ölbad

**Chemikalien:** Toluol, konz. Schwefelsäure, rauch. Salpetersäure, Cyclohexan, Ethanol, Methanol,  $\text{NaHCO}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ .

**Versuchsvorschrift:** In einem 100 mL Erlenmeyerkolben werden 10,6 mL rauch. Salpetersäure vorgelegt und langsam unter Eiskühlung portionsweise mit 12,5 mL konz. Schwefelsäure versetzt. Dabei wird magnetisch gerührt. In einem 250 mL Dreihalskolben mit Innenthermometer und Tropftrichter wird 10,6 mL über Natrium destilliertes Toluol mit einer Eis-Kochsalz Kältemischung auf etwa  $-10^\circ\text{C}$  gekühlt. Die auf  $-5^\circ\text{C}$  gekühlte Nitriersäure wird innerhalb von 50 Minuten unter Eiskühlung und unter Rühren (Magnetprü�rer) der Reaktionsmischung so zugetropft, dass die Innentemperatur  $10^\circ\text{C}$  nicht überschritt. Die Temperatur der Reaktionsmischung am Ende der Nitriersäurezugabe soll  $-5^\circ\text{C}$  betragen. Das Eisbad wird entfernt und die Mischung zwei Stunden gerührt.

**Aufarbeitung:** Die Reaktionsmischung wird auf 50 g Eis gegossen, das Reaktionsprodukt einmal mit 40 mL und zweimal mit 10 mL Cyclohexan ausgeschüttelt. Die organische Phase wird mit 10 mL Wasser und ges.  $\text{NaHCO}_3$ -Lsg. gewaschen. Danach wird wieder mit 10 mL Wasser gewaschen, die organische Phase mit 15 g  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  über Nacht getrocknet, das Trockenmittel abfiltriert und das Solvens am Rotationsverdampfer abdestilliert. Der ölige Rückstand wird bei vermindertem Druck im Siedebereich von  $100 - 130^\circ\text{C}$  (7 hPa) destilliert. Zur sauberen Trennung von 2-Nitrotoluol und 4-Nitrotoluol wird nochmals über eine 20 cm Kolonne fraktioniert destilliert (6,5 g 2-Nitrotoluol, Kp.  $105 - 115^\circ\text{C}$  /7hPa; 0,9 g 4-Nitrotoluol, Kp.  $128 - 132^\circ\text{C}$  /7hPa). Der feste Rückstand der ersten Destillation wird aus 10 mL Ethanol umkristallisiert und heiß filtriert. Nach Abkühlung werden die feinen Nadeln des 2,4-Dinitrotoluols abgesaugt und im Exsikkator getrocknet (0,58 g 2,4 Dinitrotoluol, Smp.  $67 - 69^\circ\text{C}$ ).

### A.2.3. Arbeitsvorschrift - Nitrierung Phenol

**Geräte:** 250 mL Dreihalskolben, Innenthermometer, Tropftrichter, Gasableitungsrohr, Destillationsapparatur zur Wasserdampfdestillation, bestehend aus Destillationsbrücke, Dreihalskolben, 250 mL Einhalskolben, Thermometer, Magnetrührer mit Heizplatte, Büchnertrichter, Saugflasche, Filterpapier, Vakuumpumpe

**Chemikalien:** Phenol, Salpetersäure 65 %, Salzsäure (2n), Aktivkohle.

**Versuchsvorschrift:** In einem 250 mL Dreihalskolben werden 12 mL Wasser vorgelegt und unter Rühren 21 mL 65 % ige Salpetersäure zugegeben. Die Nitriersäure wird im Eisbad abgekühlt (0 - 5°C) und das in 40 mL Wasser gelöste Phenol sehr langsam zugetropft (ca. 2h). Die Innentemperatur sollte dabei 5°C nicht übersteigen. Nach beendeter Zugabe wird noch 30 Minuten im Eisbad und weitere 30 Minuten bis zur Erwärmung auf Raumtemperatur gerührt. Die Reaktionsmischung bleibt über Nacht bei Raumtemperatur stehen.

**Aufarbeitung:** Die Nitriersäure wird vom halbfesten Gemisch der Nitrophenole abgossen, der Rückstand dreimal mit 30 mL kaltem Wasser gewaschen. Der dunkle harzige Rückstand wird zur Trennung der Isomeren der Wasserdampfdestillation unterzogen (ca. 1h). Vor Beginn der Destillation werden dem Reaktionsgemisch 40 mL Wasser zugegeben. Das Destillat wird mit Eis gekühlt. Der gebildete gelbe Feststoff wird abgesaugt mit wenig Wasser gewaschen und im Exsikkator getrocknet. Ausbeute: 3,68 g 2-Nitrophenol (26,5 % d. Th.), Smp. 45 - 46°C. Der erkaltete Rückstand der Wasserdampfdestillation wird abgesaugt und aus 20 mL HCl (2n) mit 0,5 g Aktivkohle umkristallisiert. Es bilden sich feine helle Nadeln. Diese werden abgesaugt mit wenig Wasser gewaschen. Ausbeute: 1,1 g 4-Nitrophenol (= 7,9 % d. Th.), Smp. 110 - 112°C.

## A.3. Stoffstromnetze

Nachfolgend sind die Subnetze der unterschiedlichen Primärnetze der untersuchten Reaktionen aufgezeigt. Subnetze die in mehreren Primärnetzen vertreten aber ihrem Aufbau identisch sind - z.B. die Bereitstellung von Eis zur Kühlung oder flüssigem Stickstoff für Kühlfallen - werden nur einmal aufgeführt. Zum besseren Verständnis zeigt Kapitel A.3.1 eine Legende der Stoffstromnetze.

### A.3.1. Legende der Stoffstromnetze



P1

**Input-Stellen:** An dieser Stelle werden dem Prozess Stoffe und/oder Energien zugeführt.



P1

**Output-Stellen:** An dieser Stelle verlassen Stoffe und/oder Energien den Prozess.



T1

**Transitionen:** An dieser Stelle wird im Prozess ein Gut umgewandelt oder transportiert.



P1

**Connection:** Verbindet zwei Transitionen miteinander.

### A.3.2. Stoffstromsubnetze - säurekatalysierte Acetalisierung

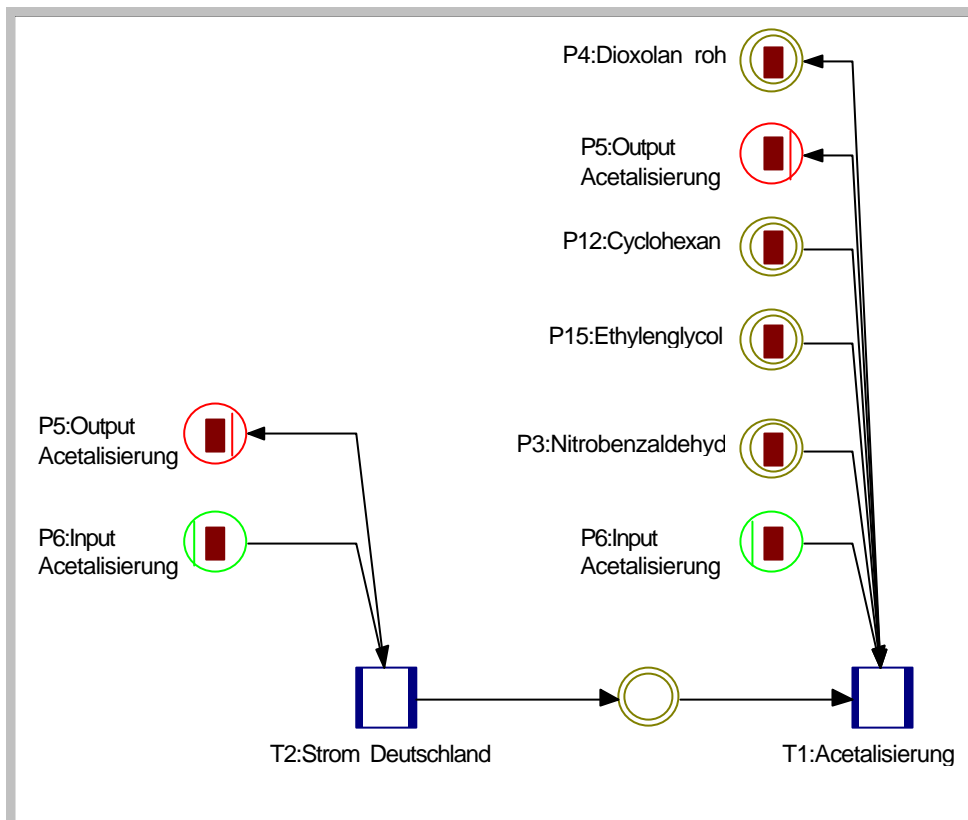


Abb. A 1: Stoffstromsubnetze Acetalisierung - Reaktion (Ölbad & Heizpilz)

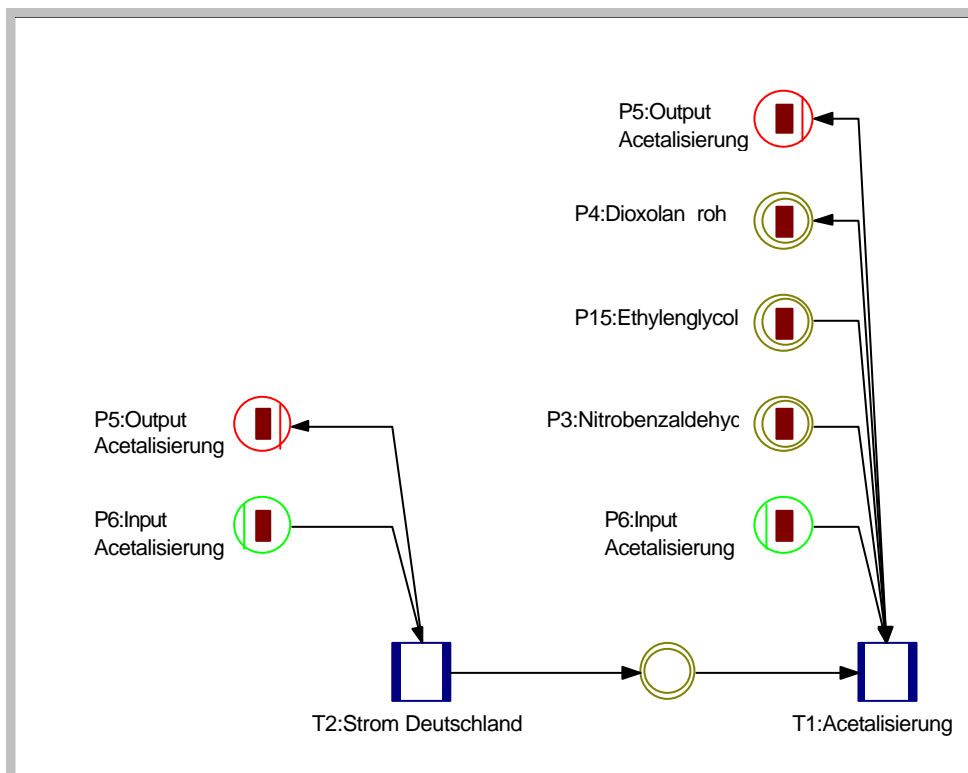
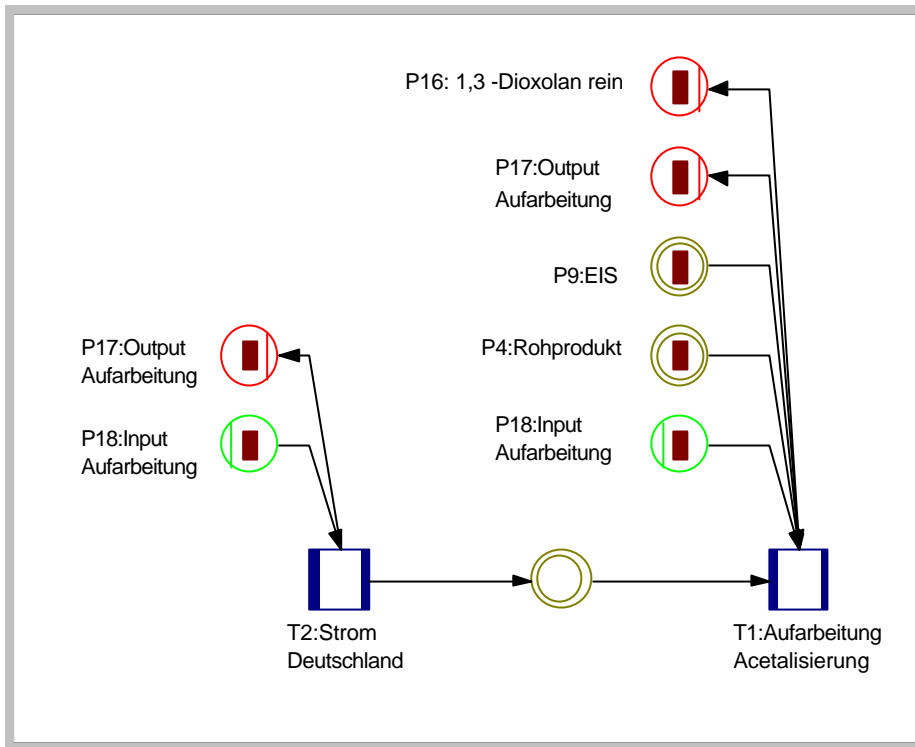
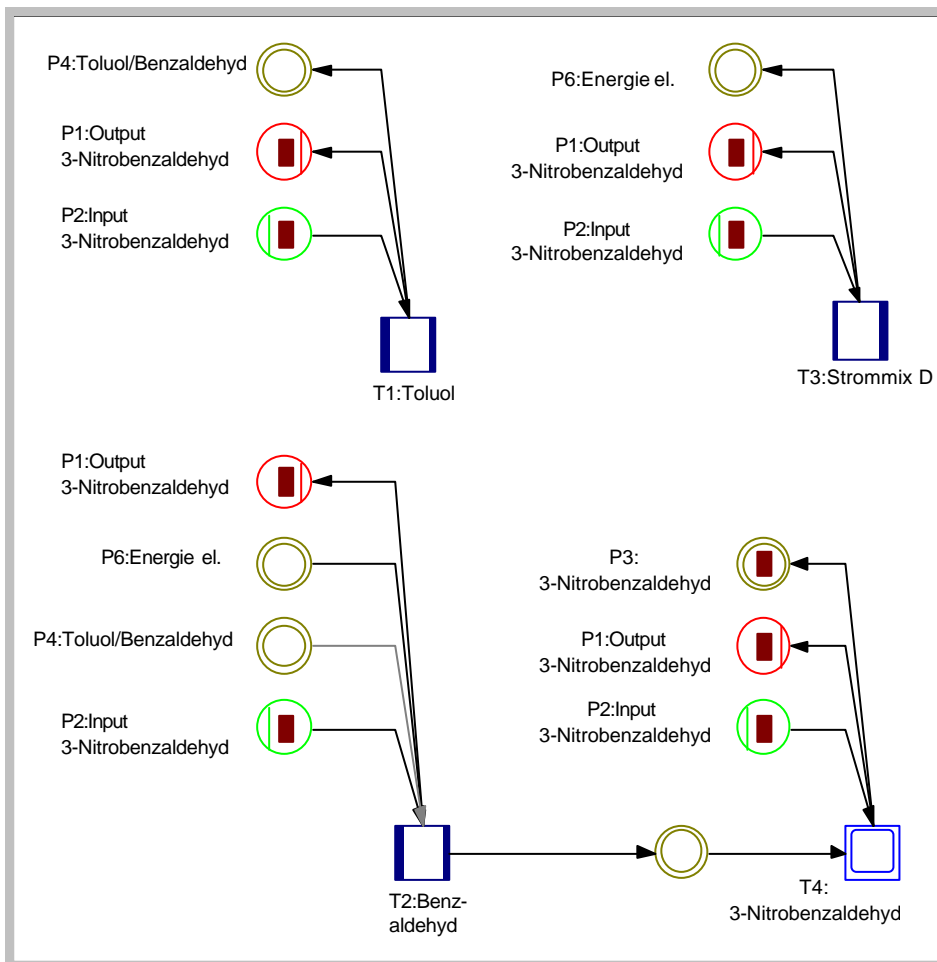


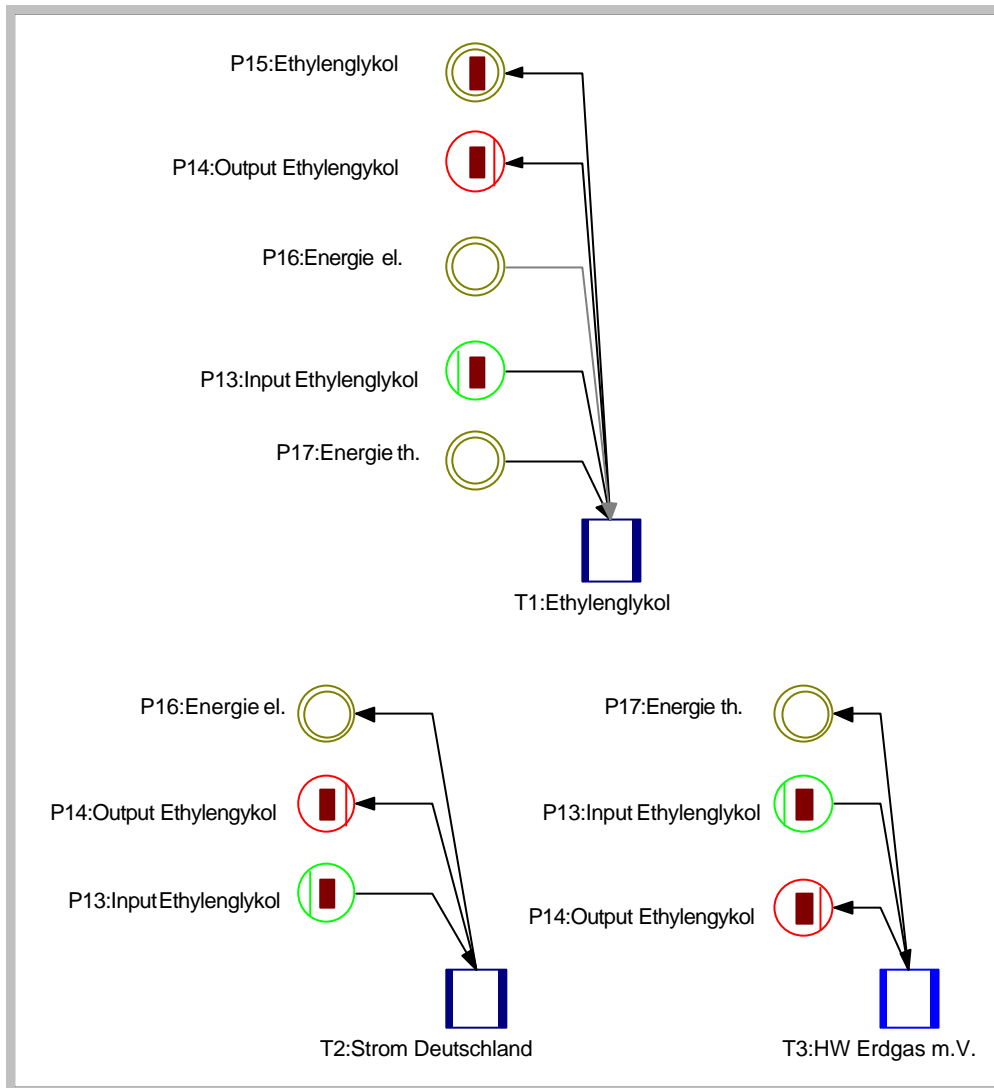
Abb. A 2: Stoffstromsubnetze Acetalisierung - Reaktion (Mikrowelle)



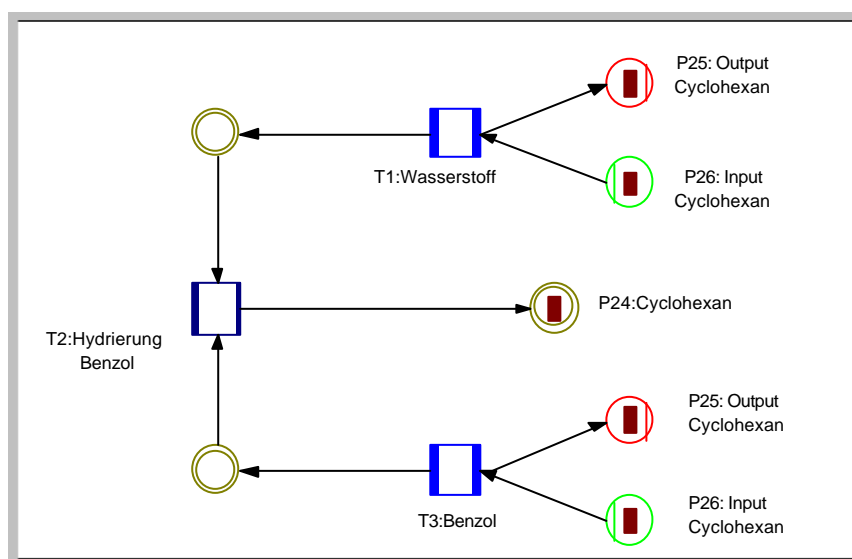
**Abb. A 3: Stoffstromsubnetze Acetalisierung - Aufarbeitung**



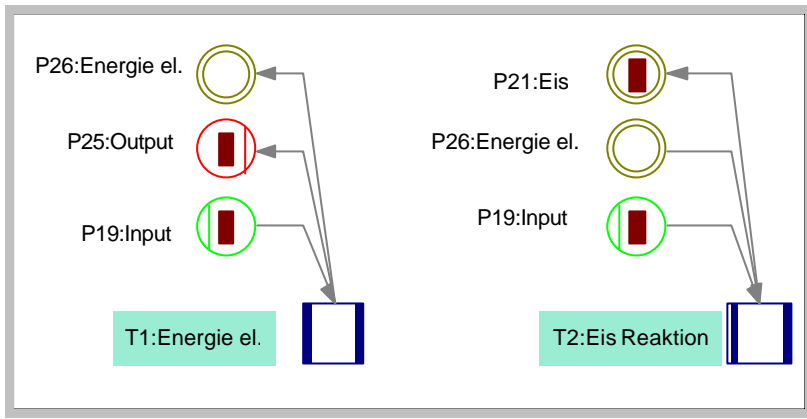
**Abb. A 4: Stoffstromsubnetze Acetalisierung - Herstellung 3-Nitrobenzaldehyd**



**Abb. A 5: Stoffstromsubnetze Acetalisierung - Ethylenglykol**



**Abb. A 6 Stoffstromsubnetze Acetalisierung - Cyclohexan**



**Abb. A 7: Stoffstromsubnetze Acetalisierung - Eis**



### A.3.3. Stoffstromsubnetze - Nitrierung von Benzaldehyd

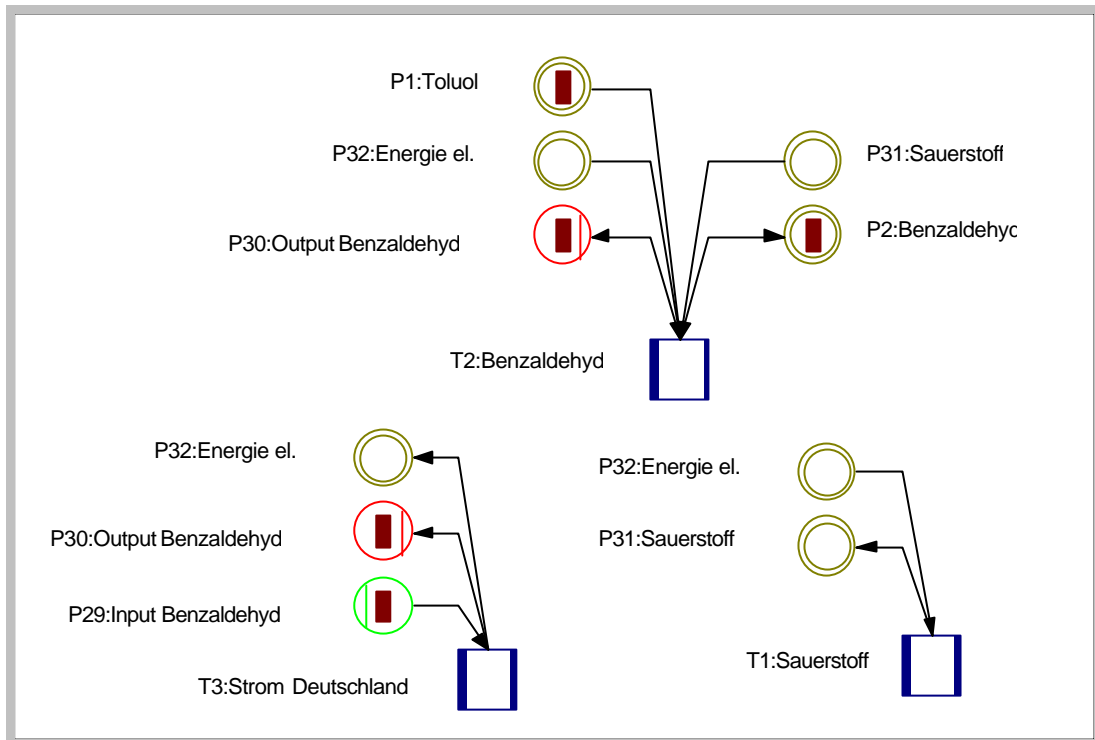


Abb. A 8: Nitrierung Benzaldehyd - Stoffstromsubnetz Herstellung Benzaldehyd

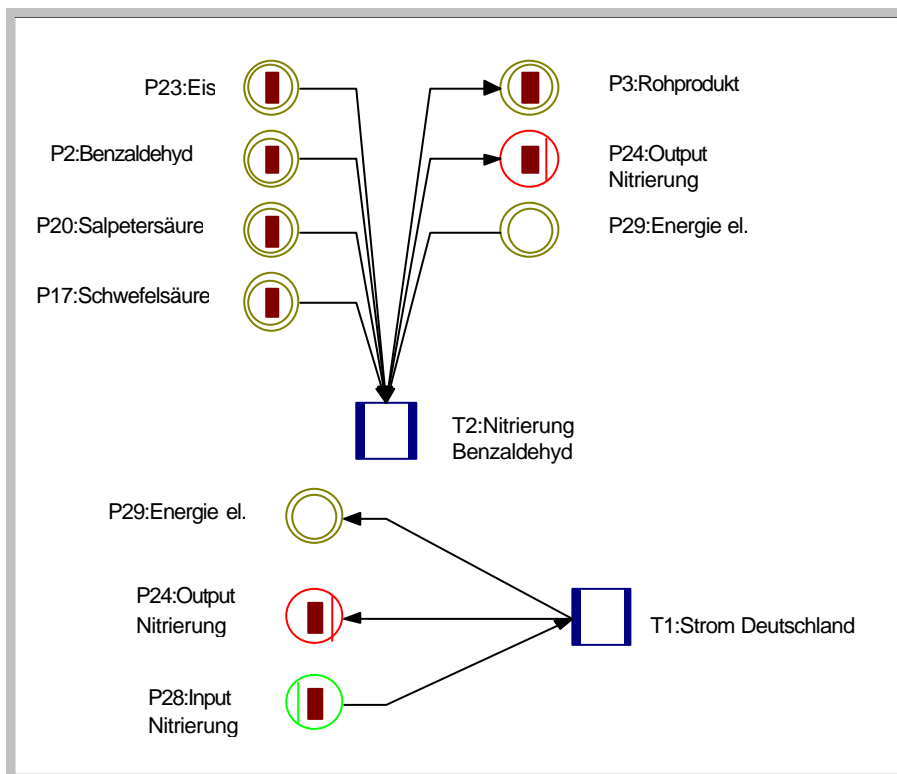


Abb. A 9: Nitrierung Benzaldehyd - Stoffstromsubnetz Nitrierung Benzaldehyd

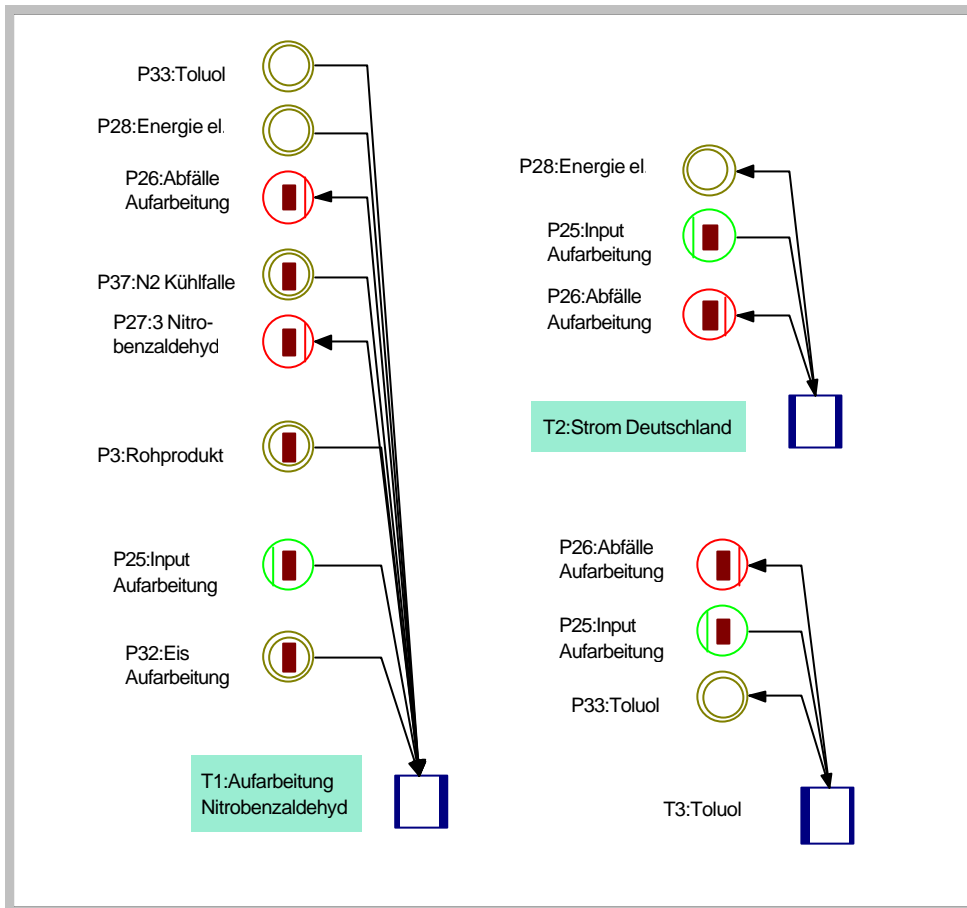


Abb. A 10: Nitrierung Benzaldehyd - Stoffstromsubnetz Aufarbeitung Nitrobenzaldehyd

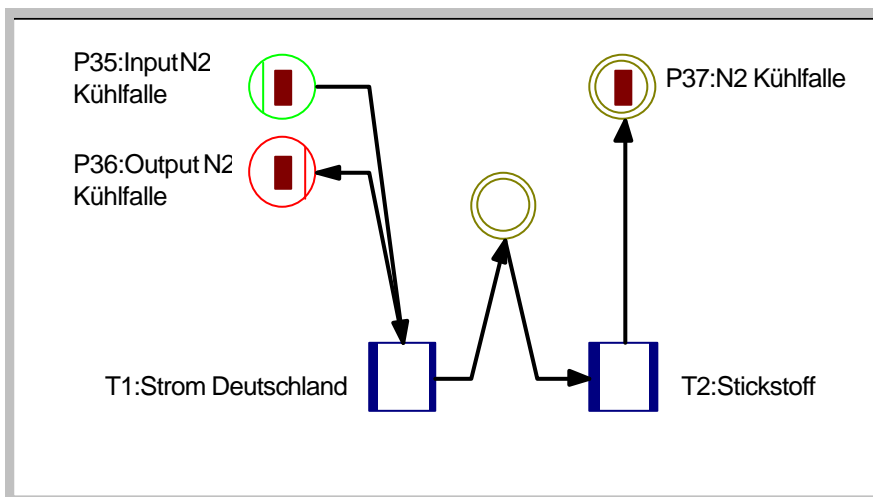


Abb. A 11: Nitrierung Benzaldehyd - Stoffstromsubnetz N<sub>2</sub> flüssig für Kühlfalle

### A.3.4. Stoffstromsubnetze - Nitrierung von Phenol

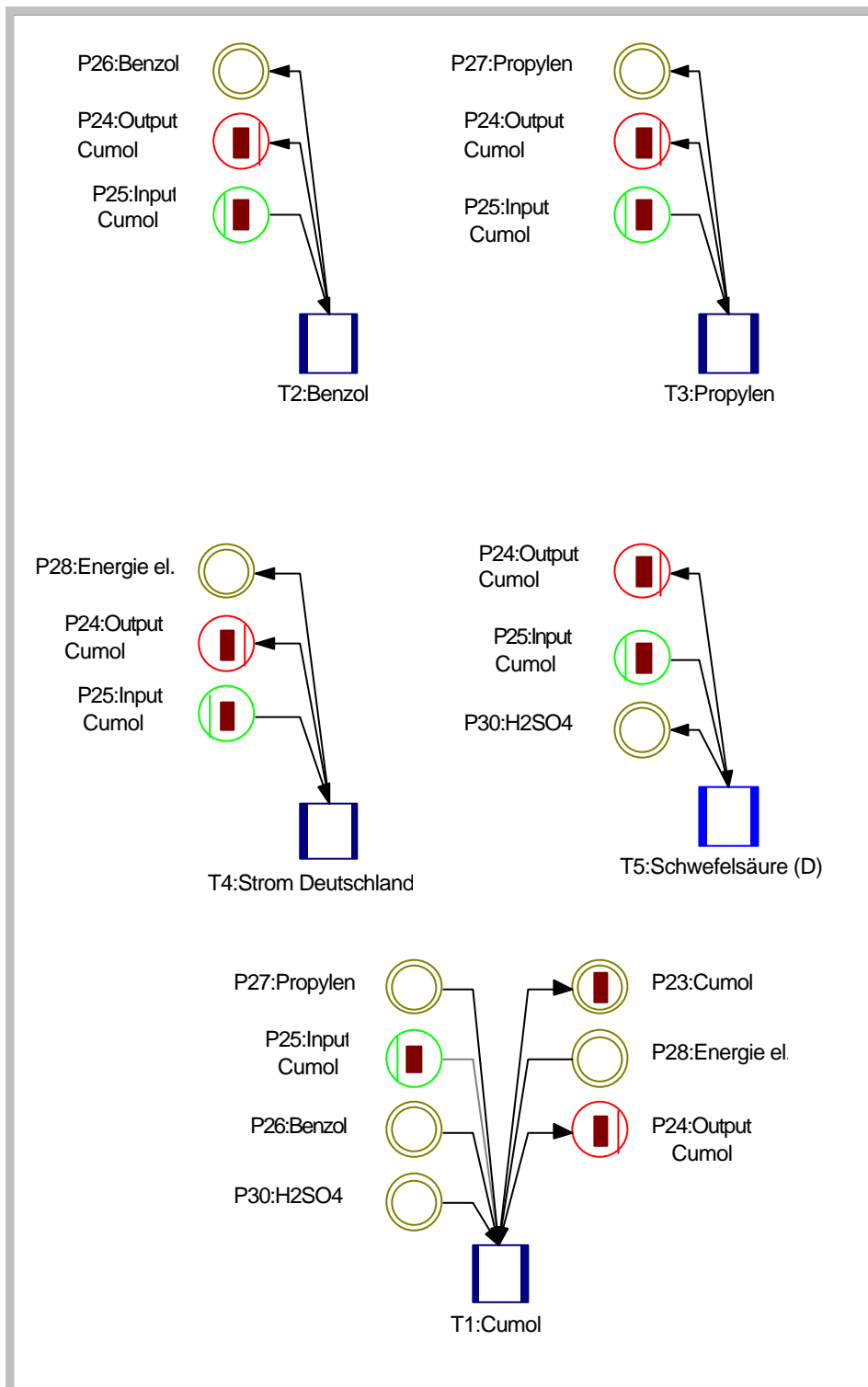


Abb. A 12: Nitrierung Phenol - Stoffstromsubnetz Herstellung Cumol

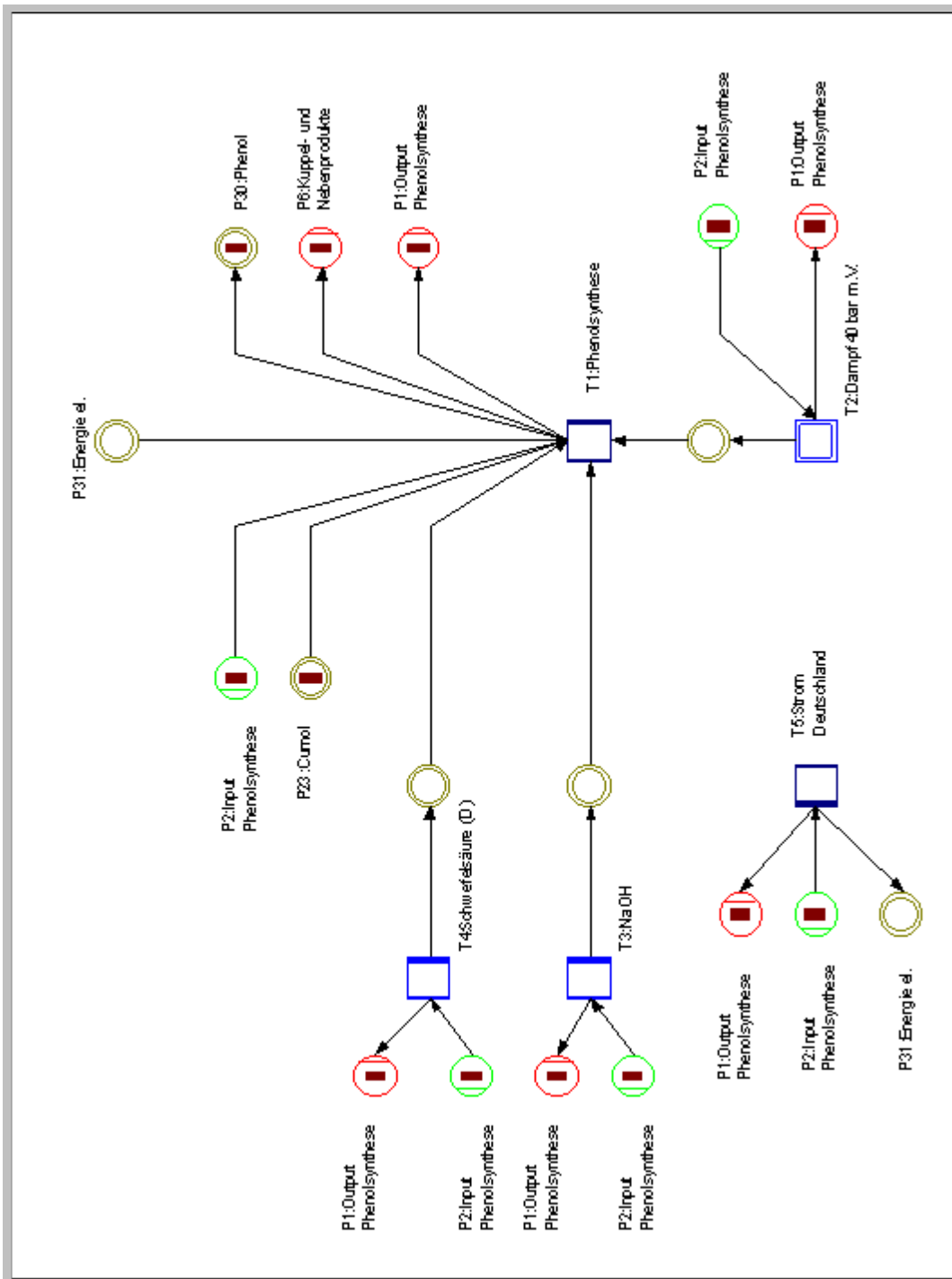
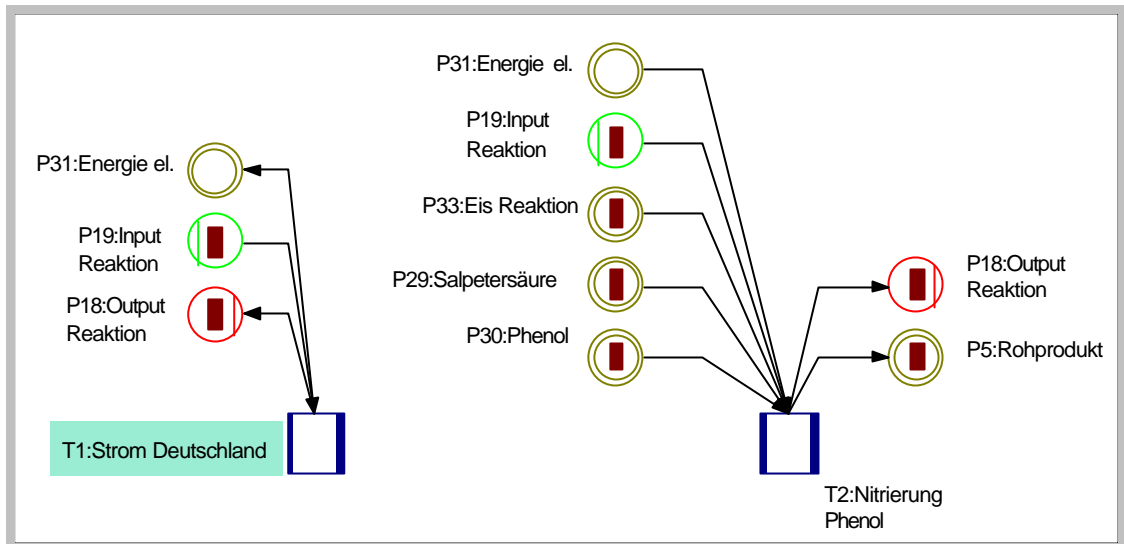
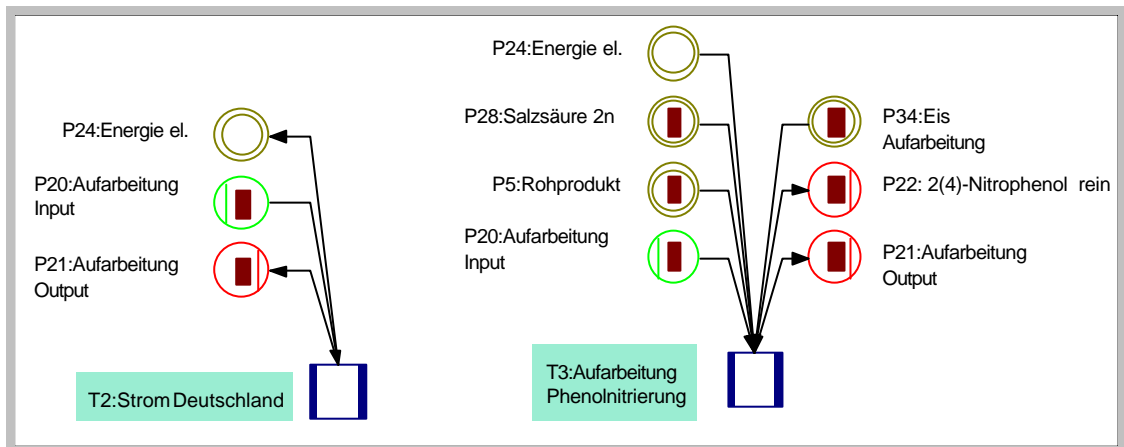


Abb. A 13: Nitrierung Phenol - Stoffstromsubnetz Herstellung Phenol

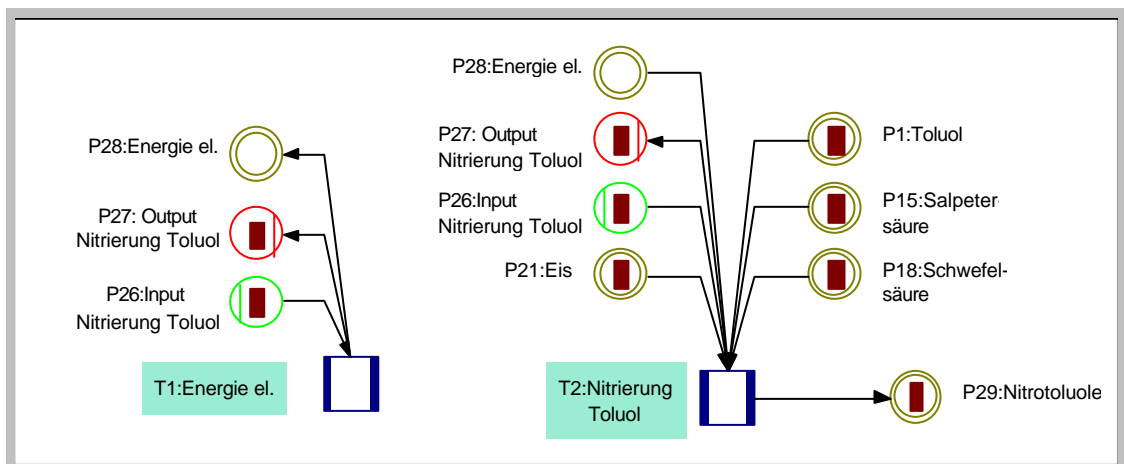


**Abb. A 14: Nitrierung Phenol - Stoffstromsubnetz Nitrierung Phenol**

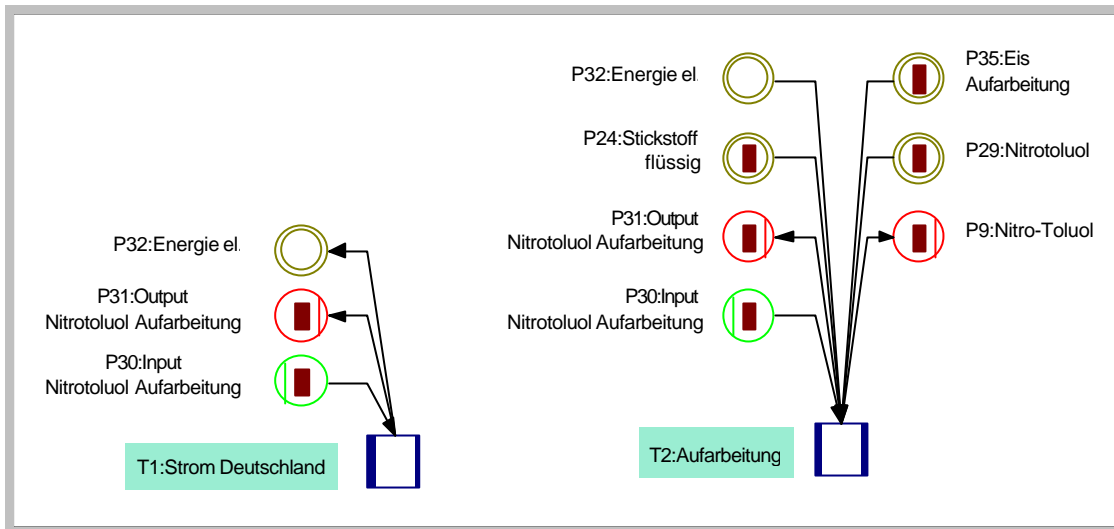


**Abb. A 15: Nitrierung Phenol - Stoffstromsubnetz Aufarbeitung Nitrophenol**

### A.3.5. Stoffstromsubnetze - Nitrierung von Toluol



**Abb. A 16: Nitrierung Toluol - Stoffstromsubnetz Nitrierung Toluol**



**Abb. A 17: Nitrierung Toluol - Stoffstromsubnetz Aufarbeitung Nitrotoluole**

## A.4. Daten Sachbilanz Acetalisierung von 3-Nitrobenzaldehyd

### A.4.1. Input Materialien

Item	Quantity	Unit
Chemische Grundstoffe		
Chem. Grundstoffe, anorg.		
Ä Natriumhydrogencarbonat		
Acetalisierung Ölbad	5.39	g
Acetalisierung Heizpilz	5.39	g
Acetalisierung Mikrowelle	5.39	g
Ä Natriumhydrogensulfit		
Acetalisierung Ölbad	0.44	g
Acetalisierung Heizpilz	0.44	g
Ä Sauerstoff		
Acetalisierung Ölbad	3.87	g
Acetalisierung Heizpilz	3.87	g
Acetalisierung Mikrowelle	3.87	g
Ä Stickstoff		
Acetalisierung Ölbad	0.23	g
Acetalisierung Heizpilz	0.23	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.23	g
Chem. Grundstoffe, org.		
Ä Diethylether		
Acetalisierung Ölbad	96.31	g
Acetalisierung Heizpilz	96.31	g
Acetalisierung Mikrowelle	10.70	g
Ä Petrolether		
Acetalisierung Ölbad	9.75	g
Acetalisierung Heizpilz	9.75	g
Acetalisierung Mikrowelle	9.75	g

Item	Quantity	Unit
Ä Methyl-t-butylether		
Acetalisierung Ölbad	79.81	g
Acetalisierung Heizpilz	79.81	g
Acetalisierung Mikrowelle	79.81	g
Emissionen (Luft)		
Verbindungen, anorg. (L)		
Kohlendioxid (L)		
Ä Kohlendioxid, regenerativ		
Acetalisierung Ölbad	3.24	mg
Acetalisierung Heizpilz	3.24	mg
Acetalisierung Mikrowelle	3.24	mg
Feinchemikalien		
Ä 4ToluolsulfonsäureMonohydrat		
Acetalisierung Ölbad	400.00	mg
Acetalisierung Heizpilz	400.00	mg
Acetalisierung Mikrowelle	400.00	mg
Kumulierter Energieaufwand (KEA)		
Ä KEA (Kernenergie)		
Acetalisierung Ölbad	6879.15	kJ
Acetalisierung Heizpilz	6209.20	kJ
Acetalisierung Mikrowelle	5051.91	kJ
Ä KEA (Wasserkraft)		
Acetalisierung Ölbad	18.08	kJ
Acetalisierung Heizpilz	16.96	kJ
Acetalisierung Mikrowelle	10.18	kJ
Ä KEA, fossil gesamt		
Acetalisierung Ölbad	16136.43	kJ
Acetalisierung Heizpilz	15085.31	kJ
Acetalisierung Mikrowelle	9072.11	kJ



Item	Quantity	Unit
Ä KEA, regenerativ		
Acetalisierung Ölbad	0.18	kJ
Acetalisierung Heizpilz	0.18	kJ
Acetalisierung Mikrowelle	0.18	kJ
Ä KEA, sonst. regenerative		
Acetalisierung Ölbad	204.73	kJ
Acetalisierung Heizpilz	184.62	kJ
Acetalisierung Mikrowelle	151.10	kJ
Ä KEA, sonstige		
Acetalisierung Ölbad	1.06	kJ
Acetalisierung Heizpilz	1.06	kJ
Acetalisierung Mikrowelle	1.06	kJ
Ä KEA, un spez.		
Acetalisierung Ölbad	1,13	kJ
Acetalisierung Heizpilz	1.14	kJ
Acetalisierung Mikrowelle	0.13	kJ
Metalle		
Mineralien		
Ä Natriumsulfat		
Acetalisierung Ölbad	53.14	g
Acetalisierung Heizpilz	53.14	g
Acetalisierung Mikrowelle	43.14	g
Mineralien und Erze		
Ä Schwefel		
Acetalisierung Ölbad	0.15	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.15	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.15	mg

Item	Quantity	Unit
Rohstoffe in Lagerstätten (RiL)		
Energieträger (RiL)		
Ä Erdgas		
Acetalisierung Ölbad	107.38	g
Acetalisierung Heizpilz	103.84	g
Acetalisierung Mikrowelle	46.33	g
Ä Erdöl		
Acetalisierung Ölbad	56.55	g
Acetalisierung Heizpilz	56.30	g
Acetalisierung Mikrowelle	11.99	g
Kohlen (RiL)		
Ä Braunkohle		
Acetalisierung Ölbad	568.17	g
Acetalisierung Heizpilz	512.53	g
Acetalisierung Mikrowelle	419.69	g
Ä Steinkohle		
Acetalisierung Ölbad	152.33	g
Acetalisierung Heizpilz	137.63	g
Acetalisierung Mikrowelle	111.17	g
Ä Uran		
Acetalisierung Ölbad	0.01	g
Acetalisierung Heizpilz	0.01	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.01	g
Nichtenergieträger (RiL)		
Ä Eisen		
Acetalisierung Ölbad	47.62	mg
Acetalisierung Heizpilz	47.62	mg
Mineralien und Erze (RiL)		
Ä Bauxit		
Acetalisierung Ölbad	0.03	g
Acetalisierung Heizpilz	0.03	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.01	g

Item	Quantity	Unit
Ä Bentonit		
Acetalisierung Ölbad	0.01	g
Acetalisierung Heizpilz	0.01	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.00	g
Ä Kalkstein		
Acetalisierung Ölbad	22.41	g
Acetalisierung Heizpilz	20.22	g
Acetalisierung Mikrowelle	16.50	g
Ä Natriumchlorid		
Acetalisierung Ölbad	0.20	g
Acetalisierung Heizpilz	0.19	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.11	g
Ä Sand		
Acetalisierung Ölbad	0.45	g
Acetalisierung Heizpilz	0.41	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.33	g
Rohstoffe, elementar		
Ä Schwefel		
Acetalisierung Ölbad	0.04	kg
Acetalisierung Heizpilz	0.04	kg
Acetalisierung Mikrowelle	0.04	kg
Stoffe, diverse		
Ä Luft		
Acetalisierung Ölbad	1.04	kg
Acetalisierung Heizpilz	1.04	kg
Acetalisierung Mikrowelle	1.04	kg
Wasser		
Brauch/Trinkwasser		
Ä Kühlwasser		
Acetalisierung Ölbad	458.54	kg
Acetalisierung Heizpilz	420.79	kg
Acetalisierung Mikrowelle	289.06	kg

<b>Item</b>	<b>Quantity</b>	<b>Unit</b>
Ä Wasser (Kesselspeise)		
Acetalisierung Ölbad	97.10	kg
Acetalisierung Heizpilz	87.56	kg
Acetalisierung Mikrowelle	71.67	kg
Ä Wasser (Prozess)		
Acetalisierung Ölbad	0.20	kg
Acetalisierung Heizpilz	0.18	kg
Acetalisierung Mikrowelle	0.15	kg
Ä Wasser, un spez.		
Acetalisierung Ölbad	7.20	kg
Acetalisierung Heizpilz	7.20	kg
Acetalisierung Mikrowelle	7.03	kg
<b>Sum</b>	<b>Quantity</b>	<b>Unit</b>
kJ	59025.90	kJ
kg	1452.88	kg

#### A.4.2. Output Materialien

Item	Quantity	Unit
Abfälle		
Abfälle zur Beseitigung (AzB)		
Ä Abfälle zur Verbrennung		
Acetalisierung Ölbad	190.19	g
Acetalisierung Heizpilz	190.19	g
Acetalisierung Mikrowelle	24.03	g
Ä Abfälle, hausmüllähnlich		
Acetalisierung Ölbad	0.06	g
Acetalisierung Heizpilz	0.06	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.01	g
Ä Abfälle, unspezifiziert		
Acetalisierung Ölbad	0.19	g
Acetalisierung Heizpilz	0.19	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.13	g
Ä Abraum		
Acetalisierung Ölbad	4.98	kg
Acetalisierung Heizpilz	4.49	kg
Acetalisierung Mikrowelle	3.68	kg
Ä Aschen u. Schlacken		
Acetalisierung Ölbad	0.14	g
Acetalisierung Heizpilz	0.14	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.02	g
Ä Sonderabfall		
Acetalisierung Ölbad	0.01	g
Acetalisierung Heizpilz	0.01	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.01	g
Ä Sondermüll		
Acetalisierung Ölbad	0.03	g
Acetalisierung Heizpilz	0.03	g

Item	Quantity	Unit
Abfälle zur Verwertung (AzV)		
Ä Filterstaub		
Acetalisierung Ölbad	3.80	g
Acetalisierung Heizpilz	3.43	g
Acetalisierung Mikrowelle	2.81	g
Ä Gips (REA)		
Acetalisierung Ölbad	13.11	g
Acetalisierung Heizpilz	11.82	g
Acetalisierung Mikrowelle	9.68	g
Ä Grobasche		
Acetalisierung Ölbad	0.57	g
Acetalisierung Heizpilz	0.51	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.42	g
Ä Natriumsulfat		
Acetalisierung Ölbad	0.12	g
Acetalisierung Heizpilz	0.11	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.09	g
Ä Schmelzkammergranulat		
Acetalisierung Ölbad	4.76	g
Acetalisierung Heizpilz	4.30	g
Acetalisierung Mikrowelle	3.52	g
Ä Wertstoffe, gemischt		
Acetalisierung Ölbad	10.41	mg
Acetalisierung Heizpilz	10.41	mg
Ä Wirbelschichttasche		
Acetalisierung Ölbad	0.38	g
Acetalisierung Heizpilz	0.34	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.28	g
Ä Abfälle, unspezifiziert		
Acetalisierung Ölbad	0.01	g
Acetalisierung Heizpilz	0.01	g
Acetalisierung Mikrowelle	0.01	g

Item	Quantity	Unit
Ä verd. Nitriersäure mit Nitratspuren		
Acetalisierung Ölbad	1075.51	g
Acetalisierung Heizpilz	1075.51	g
Acetalisierung Mikrowelle	1075.51	g
Chemische Grundstoffe		
Chem. Grundstoffe, anorg.		
Ä Natriumhydrogencarbonat		
Acetalisierung Ölbad	5.39	g
Acetalisierung Heizpilz	5.39	g
Acetalisierung Mikrowelle	5.39	g
Chem. Grundstoffe, org.		
Ä Benzoesäure		
Acetalisierung Ölbad	2272.18	mg
Acetalisierung Heizpilz	2272.18	mg
Acetalisierung Mikrowelle	2272.18	mg
Ä Maleinsäure		
Acetalisierung Ölbad	2272.18	mg
Acetalisierung Heizpilz	2272.18	mg
Acetalisierung Mikrowelle	2272.18	mg
Ä Methyl-t-butylether		
Acetalisierung Ölbad	79.81	g
Acetalisierung Heizpilz	79.81	g
Acetalisierung Mikrowelle	79.81	g
Emissionen (Luft)		
Ä Abwärme	26600.19	kJ
Acetalisierung Ölbad	10076.45	kJ
Acetalisierung Heizpilz	9086.68	kJ
Acetalisierung Mikrowelle	7437.06	kJ
Ä Partikel		
Acetalisierung Ölbad	0.14	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.14	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.14	mg

Item	Quantity	Unit
Ä Staub		
Acetalisierung Ölbad	69.70	mg
Acetalisierung Heizpilz	69.70	mg
Acetalisierung Mikrowelle	12.28	mg
Ä Staub (>PM10)		
Acetalisierung Ölbad	15.45	mg
Acetalisierung Heizpilz	13.94	mg
Acetalisierung Mikrowelle	11.41	mg
Ä Staub (PM10)		
Acetalisierung Ölbad	36.11	mg
Acetalisierung Heizpilz	32.56	mg
Acetalisierung Mikrowelle	26.65	mg
Verbindungen, anorg. (L)		
Ä Ammoniak		
Acetalisierung Ölbad	24.53	mg
Acetalisierung Heizpilz	23.61	mg
Acetalisierung Mikrowelle	19.53	mg
Ä Chlorwasserstoff		
Acetalisierung Ölbad	35.19	mg
Acetalisierung Heizpilz	31.88	mg
Acetalisierung Mikrowelle	25.17	mg
Ä Distickstoffmonoxid		
Acetalisierung Ölbad	486.42	mg
Acetalisierung Heizpilz	485.11	mg
Acetalisierung Mikrowelle	482.94	mg
Ä Fluorwasserstoff		
Acetalisierung Ölbad	4.78	mg
Acetalisierung Heizpilz	4.31	mg
Acetalisierung Mikrowelle	3.53	mg



Item	Quantity	Unit
Kohlendioxid (L)		
Ä Kohlendioxid, fossil		
Acetalisierung Ölbad	1193221.79	mg
Acetalisierung Heizpilz	1090408.77	mg
Acetalisierung Mikrowelle	823254.68	mg
Ä Kohlenmonoxid		
Acetalisierung Ölbad	365.03	mg
Acetalisierung Heizpilz	341.56	mg
Acetalisierung Mikrowelle	201.40	mg
Metalle (L)		
Ä Metalle, un spez.		
Acetalisierung Ölbad	0.16	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.16	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.02	mg
Ä Nickel		
Acetalisierung Ölbad	0.12	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.10	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.09	mg
Ä Selen		
Acetalisierung Ölbad	0.14	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.13	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.11	mg
Ä NOx	0.01	kg
Acetalisierung Ölbad	2286.99	mg
Acetalisierung Heizpilz	2140.37	mg
Acetalisierung Mikrowelle	1466.37	mg
Radionuklide (L)		
Ä Radionuklide, gesamt		
Acetalisierung Ölbad	713122.06	Bq
Acetalisierung Heizpilz	643074.92	Bq
Acetalisierung Mikrowelle	526329.68	Bq

Item	Quantity	Unit
Ä Schwefeldioxid		
Acetalisierung Ölbad	1976.14	mg
Acetalisierung Heizpilz	1896.54	mg
Acetalisierung Mikrowelle	1451.16	mg
Ä Wasserstoff		
Acetalisierung Ölbad	1.56	mg
Acetalisierung Heizpilz	1.56	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.65	mg
VOC (L)		
Ä Methan		
Acetalisierung Ölbad	2575.95	mg
Acetalisierung Heizpilz	2375.74	mg
Acetalisierung Mikrowelle	1599.59	mg
NMVOC (L)		
Ä NMVOC, aromat., unspez.		
Acetalisierung Ölbad	4.39	mg
Acetalisierung Heizpilz	4.39	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.74	mg
NMVOC, nichthalog. (L)		
Aldehyde (L)		
Ä Formaldehyd		
Acetalisierung Ölbad	0.10	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.10	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.09	mg
Alkane (L)		
Ä Hexan		
Acetalisierung Ölbad	0.19	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.17	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.14	mg

Item	Quantity	Unit
andere S (und O)haltige Verb. (L)		
Aromatische Verbindungen (L)		
aromatische KW (L)		
Ä Benzol		
Acetalisierung Ölbad	0.08	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.07	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.07	mg
Ä NMVOC, un spez.		
Acetalisierung Ölbad	157.50	mg
Acetalisierung Heizpilz	154.16	mg
Acetalisierung Mikrowelle	148.60	mg
Ä VOC (Kohlenwasserstoffe)		
Acetalisierung Ölbad	108.74	mg
Acetalisierung Heizpilz	108.74	mg
Ä VOC, un spez.		
Acetalisierung Ölbad	22.60	mg
Acetalisierung Heizpilz	22.60	mg
Acetalisierung Mikrowelle	22.60	mg
Emissionen (Wasser)		
Emissionen (W)		
Ä Abwärme		
Acetalisierung Ölbad	2225.58	kJ
Acetalisierung Heizpilz	2006.97	kJ
Acetalisierung Mikrowelle	1642.62	kJ
Ä Feststoffe, gelöst		
Acetalisierung Ölbad	10.78	mg
Acetalisierung Heizpilz	10.78	mg
Acetalisierung Mikrowelle	3.57	mg
Ä Feststoffe, suspendiert		
Acetalisierung Ölbad	15.95	mg
Acetalisierung Heizpilz	15.95	mg
Acetalisierung Mikrowelle	3.18	mg

Item	Quantity	Unit
Verbindungen, anorganisch (W)		
Ä Carbonat		
Acetalisierung Ölbad	13.66	mg
Acetalisierung Heizpilz	13.66	mg
Acetalisierung Mikrowelle	1.95	mg
Ä Chlor		
Acetalisierung Ölbad	1.44	mg
Acetalisierung Heizpilz	1.30	mg
Acetalisierung Mikrowelle	1.07	mg
Ä Chlorid		
Acetalisierung Ölbad	155.60	mg
Acetalisierung Heizpilz	146.79	mg
Acetalisierung Mikrowelle	79.72	mg
Ä Fluorid		
Acetalisierung Ölbad	0.22	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.20	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.16	mg
Metalle (W)		
Ä Aluminium		
Acetalisierung Ölbad	1.65	mg
Acetalisierung Heizpilz	1.65	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.60	mg
Ä Arsen		
Acetalisierung Ölbad	0.00	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.00	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.00	mg
Ä Blei		
Acetalisierung Ölbad	0.49	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.44	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.36	mg

Item	Quantity	Unit
Ä Mangan		
Acetalisierung Ölbad	0.97	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.87	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.71	mg
Ä Metalle, unspez.		
Acetalisierung Ölbad	21.88	mg
Acetalisierung Heizpilz	21.88	mg
Acetalisierung Mikrowelle	5.32	mg
Ä Molybdän		
Acetalisierung Ölbad	0.12	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.11	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.09	mg
Ä Natrium		
Acetalisierung Ölbad	14.84	mg
Acetalisierung Heizpilz	14.84	mg
Acetalisierung Mikrowelle	3.13	mg
Ä Uran		
Acetalisierung Ölbad	0.16	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.14	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.12	mg
Ä Vanadium		
Acetalisierung Ölbad	0.09	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.08	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.07	mg
Radionuklide (W)		
Ä Radionuklide, gesamt		
Acetalisierung Ölbad	4246.18	kBq
Acetalisierung Heizpilz	3829.09	kBq
Acetalisierung Mikrowelle	3133.95	kBq

Item	Quantity	Unit
Ä Säuren als H(+)		
Acetalisierung Ölbad	4.05	mg
Acetalisierung Heizpilz	4.05	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.62	mg
Stickstoffverbindungen (W)		
Ä Ammoniak		
Acetalisierung Ölbad	0.48	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.43	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.36	mg
Ä Ammonium		
Acetalisierung Ölbad	2.16	mg
Acetalisierung Heizpilz	1.97	mg
Acetalisierung Mikrowelle	1.41	mg
Ä Nitrat		
Acetalisierung Ölbad	0.58	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.56	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.25	mg
Ä Stickstoffverb., unspez.		
Acetalisierung Ölbad	0.43	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.43	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.11	mg
Ä Sulfat		
Acetalisierung Ölbad	1023.78	mg
Acetalisierung Heizpilz	925.25	mg
Acetalisierung Mikrowelle	742.85	mg
Verbindungen, organisch (W)		
Ä Detergenzien, Öl		
Acetalisierung Ölbad	4.02	mg
Acetalisierung Heizpilz	4.02	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.44	mg

Item	Quantity	Unit
Kohlenwasserstoffe (W)		
Ä KW, un spez.		
Acetalisierung Ölbad	0.65	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.65	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.65	mg
nichthalog. org. Verbindungen (W)		
KW (w)		
Ä Kohlenwasserstoffe, un spez.		
Acetalisierung Ölbad	3.03	mg
Acetalisierung Heizpilz	3.03	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.42	mg
PAK (W)	0.00	kg
Ä Phenole		
Acetalisierung Ölbad	0.08	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.08	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.01	mg
Ä Verbindungen, org., gelöst		
Acetalisierung Ölbad	1.41	mg
Acetalisierung Heizpilz	1.41	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.24	mg
Ä Verbindungen, org., un spez.		
Acetalisierung Ölbad	0.14	mg
Acetalisierung Heizpilz	0.14	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.01	mg
Indikatorparameter		
Ä BSB5		
Acetalisierung Ölbad	2.56	mg
Acetalisierung Heizpilz	2.56	mg
Acetalisierung Mikrowelle	0.72	mg

Item	Quantity	Unit
Ä CSB		
Acetalisierung Ölbad	15.96	mg
Acetalisierung Heizpilz	15.91	mg
Acetalisierung Mikrowelle	4.11	mg
Ä TOC		
Acetalisierung Ölbad	2.26	mg
Acetalisierung Heizpilz	2.04	mg
Acetalisierung Mikrowelle	1.67	mg
Mineralien		
Ä Natriumsulfat		
Acetalisierung Ölbad	43.14	g
Acetalisierung Heizpilz	43.14	g
Acetalisierung Mikrowelle	43.14	g
Wasser	1445.07	kg
Abwasser	776.63	kg
Ä Abwasser (Kesselabschlammung)	256.33	kg
Acetalisierung Ölbad	97.10	kg
Acetalisierung Heizpilz	87.56	kg
Acetalisierung Mikrowelle	71.67	kg
Ä Abwasser (Kühlwasser)	520.16	kg
Acetalisierung Ölbad	212.98	kg
Acetalisierung Heizpilz	199.35	kg
Acetalisierung Mikrowelle	107.83	kg
Ä Abwasser (Prozess)	0.13	kg
Acetalisierung Ölbad	0.05	kg
Acetalisierung Heizpilz	0.04	kg
Acetalisierung Mikrowelle	0.04	kg
Ä Abwasser, un spez.	18.80	kg
Acetalisierung Ölbad	6324.31	g
Acetalisierung Heizpilz	6324.31	g
Acetalisierung Mikrowelle	6154.03	g



<b>Item</b>	<b>Quantity</b>	<b>Unit</b>
Ä Wasserdampf	649.64	kg
Acetalisierung Ölbad	246.09	kg
Acetalisierung Heizpilz	221.92	kg
Acetalisierung Mikrowelle	181.63	kg
<b>Sum</b>	<b>Quantity</b>	<b>Unit</b>
	kJ	32475.36
	kg	1465.47

## A.5. Daten Sachbilanz Nitrierung von Aromaten

### A.5.1. Input Materialien

Item	Quantity	Unit
Chemische Grundstoffe		
Chem. Grundstoffe, anorg.		
G Natrium		
Toluol (100 mmol)	2.00	g
G Sauerstoff		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.73	mg
Toluol (100 mmol)	0.27	mg
Phenol (100 mmol)	0.26	mg
G Luft		
Benzaldehyd (100 mmol)	1.48	g
Toluol (100 mmol)	0.55	g
Phenol (100 mmol)	0.85	g
Emissionen (Luft)		
Verbindungen, anorg. (L)		
Kohlendioxid (L)		
B Kohlendioxid, regenerativ		
Benzaldehyd (100 mmol)	7.24	mg
Toluol (100 mmol)	2.68	mg
Phenol (100 mmol)	3.10	mg
Hilfsstoffe Reaktion/Aufarbeitung		
G Aktivkohle		
Phenol (100 mmol)	0.50	g
G Cyclohexan		
Toluol (100 mmol)	46.74	g

Item	Quantity	Unit
G Ethanol		
Toluol (100 mmol)	7.89	g
G Methyl-t-butylether		
Benzaldehyd (100 mmol)	110.66	g
G Natriumchlorid		
Toluol (100 mmol)	200.00	g
G Natriumhydrogencarbonat		
Benzaldehyd (100 mmol)	6.22	g
Toluol (100 mmol)	3.20	g
G Natriumsulfat		
Benzaldehyd (100 mmol)	19.91	g
Toluol (100 mmol)	15.00	g
G Petrolether		
Benzaldehyd (100 mmol)	23.14	g
G Stickstoff		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.51	g
Toluol (100 mmol)	0.19	g
Phenol (100 mmol)	0.31	g
Kumulierter Energieaufwand (KEA)		
G KEA (Kernenergie)		
Benzaldehyd (100 mmol)	1684.54	kJ
Toluol (100 mmol)	2592.24	kJ
Phenol (100 mmol)	1521.68	kJ
G KEA (Wasserkraft)		
Benzaldehyd (100 mmol)	5.41	kJ
Toluol (100 mmol)	4.90	kJ
Phenol (100 mmol)	5.98	kJ
G KEA, fossil gesamt		
Benzaldehyd (100 mmol)	4780.69	kJ
Toluol (100 mmol)	4785.16	kJ
Phenol (100 mmol)	3521.34	kJ

Item	Quantity	Unit
G KEA, regenerativ		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.07	kJ
Toluol (100 mmol)	0.03	kJ
Phenol (100 mmol)	0.03	kJ
G KEA, sonst. regenerativ		
Benzaldehyd (100 mmol)	49.77	kJ
Toluol (100 mmol)	77.60	kJ
Phenol (100 mmol)	45.03	kJ
G KEA, sonstige		
Benzaldehyd (100 mmol)	1.66	kJ
Toluol (100 mmol)	0.62	kJ
Phenol (100 mmol)	0.55	kJ
G KEA, unspez.		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.28	kJ
Toluol (100 mmol)	0.11	kJ
Phenol (100 mmol)	0.81	kJ
Metalle		
Mineralien		
G Schwefel		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.33	mg
Toluol (100 mmol)	0.12	mg
Phenol (100 mmol)	0.37	mg
Rohstoffe in Lagerstätten (RiL)		
Energieträger (RiL)		
G Braunkohle		
Benzaldehyd (100 mmol)	139.64	g
Toluol (100 mmol)	215.01	g
Phenol (100 mmol)	124.49	g
G Erdgas		
Benzaldehyd (100 mmol)	39.53	g
Toluol (100 mmol)	23.70	g
Phenol (100 mmol)	22.25	g

Item	Quantity	Unit
G Erdöl		
Benzaldehyd (100 mmol)	19.41	g
Toluol (100 mmol)	7.50	g
Phenol (100 mmol)	12.13	g
G Holz		
Phenol (100 mmol)	0.00	g
G Steinkohle		
Benzaldehyd (100 mmol)	37.42	g
Toluol (100 mmol)	57.01	g
Phenol (100 mmol)	33.98	g
Nichtenergieträger (RiL)		
G Bauxit		
Benzaldehyd (100 mmol)	21.20	mg
Toluol (100 mmol)	7.84	mg
Phenol (100 mmol)	5.62	mg
G Bentonit		
Benzaldehyd (100 mmol)	5.09	mg
Toluol (100 mmol)	1.88	mg
Phenol (100 mmol)	2.09	mg
G Calciumsulfat		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.51	mg
Toluol (100 mmol)	0.19	mg
Phenol (100 mmol)	0.21	mg
G Dolomit		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.20	mg
Toluol (100 mmol)	0.08	mg
Phenol (100 mmol)	0.09	mg

Item	Quantity	Unit
G Kalkstein		
Benzaldehyd (100 mmol)	5.45	g
Toluol (100 mmol)	8.48	g
Phenol (100 mmol)	4.97	g
G Kies		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.06	mg
Toluol (100 mmol)	0.02	mg
Phenol (100 mmol)	0.03	mg
Metalle (RiL)		
G Blei (Pb)		
Benzaldehyd (100 mmol)	1974.51	ng
Toluol (100 mmol)	730.21	ng
Phenol (100 mmol)	930.01	ng
G Eisen (Fe)		
Benzaldehyd (100 mmol)	18.32	g
Toluol (100 mmol)	6.77	g
Phenol (100 mmol)	10.06	g
G Ferromangan		
Benzaldehyd (100 mmol)	15.12	mg
Toluol (100 mmol)	5.59	mg
Phenol (100 mmol)	6.23	mg
G Nickel (Ni)		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.10	ng
Toluol (100 mmol)	0.04	ng
Phenol (100 mmol)	0.13	ng
G Zink (Zn)		
Benzaldehyd (100 mmol)	74.24	ng
Toluol (100 mmol)	27.46	ng
Phenol (100 mmol)	34.97	ng

Item	Quantity	Unit
Mineralien (RiL)		
G Flußspat		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.20	mg
Toluol (100 mmol)	0.07	mg
Phenol (100 mmol)	0.00	mg
G Kaliumchlorid		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.02	mg
Toluol (100 mmol)	0.01	mg
Phenol (100 mmol)	0.03	mg
Mineralien und Erze (RiL)		
G Natriumchlorid		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.07	g
Toluol (100 mmol)	0.06	g
Phenol (100 mmol)	3.61	g
G Olivin		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.16	mg
Toluol (100 mmol)	0.06	mg
Phenol (100 mmol)	0.06	mg
G Sand		
Benzaldehyd (100 mmol)	110.02	mg
Toluol (100 mmol)	169.10	mg
Phenol (100 mmol)	99.44	mg
G Schiefer		
Benzaldehyd (100 mmol)	1.44	mg
Toluol (100 mmol)	0.53	mg
Phenol (100 mmol)	0.59	mg
G Schwefel		
Benzaldehyd (100 mmol)	37.31	g
Toluol (100 mmol)	5.29	g
Phenol (100 mmol)	0.08	g

<b>Item</b>	<b>Quantity</b>	<b>Unit</b>
G Ton		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.34	mg
Toluol (100 mmol)	0.12	mg
Phenol (100 mmol)	0.24	mg
Wasser		
Brauch-/Trinkwasser		
G Wasser (Kesselspeise)		
Benzaldehyd (100 mmol)	23606.86	g
Toluol (100 mmol)	36806.13	g
Phenol (100 mmol)	21315.50	g
G Kühlwasser		
Benzaldehyd (100 mmol)	96578.75	g
Toluol (100 mmol)	146840.50	g
Phenol (100 mmol)	85818.79	g
G Wasser (Prozess)		
Benzaldehyd (100 mmol)	104.16	g
Toluol (100 mmol)	87.30	g
Phenol (100 mmol)	119.34	g
G Wasser, un spez.		
Benzaldehyd (100 mmol)	1943.28	g
Toluol (100 mmol)	682.81	g
Phenol (100 mmol)	2100.24	g
<hr/>		
<b>Sum</b>	<b>Quantity</b>	<b>Unit</b>
kJ	19078.49	kJ
kg	417.24	kg



## A.5.2. Output Materialien

Item	Quantity	Unit
Abfälle		
Abfälle zur Beseitigung (AzB)		
B Abfälle aus chem. Industrie, inert		
Benzaldehyd (100 mmol)	19.75	mg
Toluol (100 mmol)	7.30	mg
Phenol (100 mmol)	5.97	mg
B Abfälle zur Verbrennung		
Benzaldehyd (100 mmol)	36098.41	mg
Toluol (100 mmol)	4.41	mg
Phenol (100 mmol)	279.77	mg
B Abfälle, hausmüllähnlich		
Benzaldehyd (100 mmol)	14.16	mg
Toluol (100 mmol)	5.24	mg
Phenol (100 mmol)	15.17	mg
B Abfälle, unspezifiziert		
Benzaldehyd (100 mmol)	1.32	mg
Toluol (100 mmol)	0.49	mg
Phenol (100 mmol)	36.42	mg
B Abraum		
Benzaldehyd (100 mmol)	1211.59	g
Toluol (100 mmol)	1888.80	g
Phenol (100 mmol)	1094.10	g
B Aschen u. Schlacken		
Benzaldehyd (100 mmol)	38.21	mg
Toluol (100 mmol)	14.13	mg
Phenol (100 mmol)	56.96	mg

Item	Quantity	Unit
Kunststoffe (AzB)		
B Kunststoffe, un spez.		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.03	mg
Toluol (100 mmol)	0.01	mg
Phenol (100 mmol)	0.07	mg
B Papier, Pappe		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.00	mg
Toluol (100 mmol)	0.00	mg
Phenol (100 mmol)	0.00	mg
B Sonderabfall		
Benzaldehyd (100 mmol)	14.44	mg
Toluol (100 mmol)	6.72	mg
Phenol (100 mmol)	9.28	mg
Abfälle zur Verwertung (AzV)		
Abfälle, sonstige (AzV)		
B Filterstaub		
Benzaldehyd (100 mmol)	923.97	mg
Toluol (100 mmol)	1440.58	mg
Phenol (100 mmol)	834.28	mg
B Gips (REA)		
Benzaldehyd (100 mmol)	3187.59	mg
Toluol (100 mmol)	4969.86	mg
Phenol (100 mmol)	2878.19	mg
B Grobasche		
Benzaldehyd (100 mmol)	138.11	mg
Toluol (100 mmol)	215.34	mg
Phenol (100 mmol)	124.71	mg
Metalle (AzV)		
B Metalle, un spez.		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.19	mg
Toluol (100 mmol)	0.07	mg
Phenol (100 mmol)	0.08	mg

Item	Quantity	Unit
B Natriumsulfat		
Benzaldehyd (100 mmol)	19942.83	mg
Toluol (100 mmol)	15047.25	mg
Phenol (100 mmol)	27.36	mg
B Schmelzkammergranulat		
Benzaldehyd (100 mmol)	1157.98	mg
Toluol (100 mmol)	1805.44	mg
Phenol (100 mmol)	1045.58	mg
B Wertstoffe, gemischt		
Benzaldehyd (100 mmol)	1.05	mg
Toluol (100 mmol)	0.39	mg
Phenol (100 mmol)	1.61	mg
B Wirbelschichttasche		
Benzaldehyd (100 mmol)	92.40	mg
Toluol (100 mmol)	144.06	mg
Phenol (100 mmol)	83.43	mg
B Abfälle, unspezifiziert		
Phenol (100 mmol)	29.72	mg
B Abfälle, wässrig, nitrathaltig		
Benzaldehyd (100 mmol)	959.23	g
Toluol (100 mmol)	120.18	g
Phenol (100 mmol)	693.72	g
B verd. Nitriersäure mit Nitratspuren		
Benzaldehyd (100 mmol)	227.44	g
Phenol (100 mmol)	84.97	g
Chemische Grundstoffe		
Chem. Grundstoffe, anorg.		
B Natrium		
Toluol (100 mmol)	2.00	g

Item	Quantity	Unit
Chem. Grundstoffe, org.		
G 2,4-Dinitrotoluol		
Toluol (100 mmol)	580.00	mg
G 2-Nitrophenol		
Phenol (100 mmol)	3.68	mg
G 2-Nitrotoluol		
Toluol (100 mmol)	6500.00	mg
G 3-(p)- Nitrobenzaldehyd		
Benzaldehyd (100 mmol)	6471.57	mg
G 4-Nitrophenol		
Phenol (100 mmol)	1100.00	mg
G 4-Nitrotoluol		
Toluol (100 mmol)	900.00	mg
G Aceton		
Phenol (100 mmol)	5935.22	mg
G Benzoessäure		
Benzaldehyd (100 mmol)	2440.68	mg
G Maleinsäure		
Benzaldehyd (100 mmol)	2440.68	mg
G Luft		
Phenol (100 mmol)	3.63	g
Emissionen (Boden)		
Metalle (W)		
B Aluminium		
Benzaldehyd (100 mmol)	1.29	mg
Toluol (100 mmol)	0.49	mg
Phenol (100 mmol)	0.15	mg
B Blei	0.00	kg
Benzaldehyd (100 mmol)	0.12	mg
Toluol (100 mmol)	0.19	mg
Phenol (100 mmol)	0.11	mg

Item	Quantity	Unit
B Mangan		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.23	mg
Toluol (100 mmol)	0.37	mg
Phenol (100 mmol)	0.21	mg
B Metalle, unspez.		
Benzaldehyd (100 mmol)	11.89	mg
Toluol (100 mmol)	4.40	mg
Phenol (100 mmol)	3.12	mg
B Molybdän		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.03	mg
Toluol (100 mmol)	0.05	mg
Phenol (100 mmol)	0.03	mg
B Natrium		
Benzaldehyd (100 mmol)	6.99	mg
Toluol (100 mmol)	2.59	mg
Phenol (100 mmol)	11.11	mg
B Uran		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.04	mg
Toluol (100 mmol)	0.06	mg
Phenol (100 mmol)	0.03	mg
Emissionen (Luft)		
B Abwärme		
Benzaldehyd (100 mmol)	2449.75	kJ
Toluol (100 mmol)	3819.47	kJ
Phenol (100 mmol)	2211.97	kJ
B Partikel		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.28	mg
Toluol (100 mmol)	0.06	mg
Phenol (100 mmol)	0.09	mg

Item	Quantity	Unit
B Staub		
Benzaldehyd (100 mmol)	19.36	mg
Toluol (100 mmol)	6.94	mg
Phenol (100 mmol)	22.05	mg
B Staub (>PM10)		
Benzaldehyd (100 mmol)	3.76	mg
Toluol (100 mmol)	5.86	mg
Phenol (100 mmol)	3.39	mg
B Staub (PM10)		
Benzaldehyd (100 mmol)	8.78	mg
Toluol (100 mmol)	13.69	mg
Phenol (100 mmol)	7.93	mg
Verbindungen, anorg. (L)		
B Ammoniak		
Benzaldehyd (100 mmol)	17.36	mg
Toluol (100 mmol)	7.13	mg
Phenol (100 mmol)	9.13	mg
B Chlorwasserstoff		
Benzaldehyd (100 mmol)	8.69	mg
Toluol (100 mmol)	12.91	mg
Phenol (100 mmol)	8.06	mg
B Distickstoffmonoxid		
Benzaldehyd (100 mmol)	569.09	mg
Toluol (100 mmol)	138.90	mg
Phenol (100 mmol)	268.09	mg
B Fluorwasserstoff		
Benzaldehyd (100 mmol)	1.17	mg
Toluol (100 mmol)	1.81	mg
Phenol (100 mmol)	1.05	mg

Item	Quantity	Unit
Kohlendioxid (L)		
B Kohlendioxid, fossil		
Benzaldehyd (100 mmol)	326866.74	mg
Toluol (100 mmol)	418376.43	mg
Phenol (100 mmol)	267742.83	mg
B Kohlenmonoxid		
Benzaldehyd (100 mmol)	98.56	mg
Toluol (100 mmol)	103.52	mg
Phenol (100 mmol)	78.98	mg
Metalle (L)		
B Metalle, unspez.		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.05	mg
Toluol (100 mmol)	0.02	mg
Phenol (100 mmol)	0.04	mg
B Nickel		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.03	mg
Toluol (100 mmol)	0.04	mg
Phenol (100 mmol)	0.03	mg
B Quecksilber		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.01	mg
Toluol (100 mmol)	0.01	mg
Phenol (100 mmol)	0.01	mg
B Selen		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.04	mg
Toluol (100 mmol)	0.05	mg
Phenol (100 mmol)	0.03	mg
B NOx		
Benzaldehyd (100 mmol)	847.28	mg
Toluol (100 mmol)	699.83	mg
Phenol (100 mmol)	597.67	mg

Item	Quantity	Unit
Radionuklide (L)		
B Radionuklide, gesamt		
Benzaldehyd (100 mmol)	173371.57	Bq
Toluol (100 mmol)	270308.47	Bq
Phenol (100 mmol)	156543.52	Bq
B Schwefeldioxid		
Benzaldehyd (100 mmol)	1169.45	mg
Toluol (100 mmol)	473.44	mg
Phenol (100 mmol)	311.22	mg
B Wasserstoff		
Benzaldehyd (100 mmol)	1.45	mg
Toluol (100 mmol)	0.54	mg
Phenol (100 mmol)	0.43	mg
B Methan		
Benzaldehyd (100 mmol)	673.33	mg
Toluol (100 mmol)	830.67	mg
Phenol (100 mmol)	549.38	mg
NMVOC (L)		
B Benzol		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.06	mg
Toluol (100 mmol)	0.03	mg
Phenol (100 mmol)	0.03	mg
B NMVOC, aromat., un spez.		
Benzaldehyd (100 mmol)	1.66	mg
Toluol (100 mmol)	0.61	mg
Phenol (100 mmol)	0.52	mg
NMVOC, halog. (L)		
NMVOC, chlor. (L)		
NMVOC, nichthalog. (L)		
Akohole (L)		
B Methanol		
Phenol (100 mmol)	0.29	mg



Item	Quantity	Unit
Alkane (L)		
B Hexan		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.05	mg
Toluol (100 mmol)	0.07	mg
Phenol (100 mmol)	0.04	mg
Ketone (L)		
B Aceton		
Phenol (100 mmol)	0.28	mg
NMVOC, sauerstoffh. (L)		
B Formaldehyd		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.08	mg
Toluol (100 mmol)	0.04	mg
Phenol (100 mmol)	0.04	mg
B NMVOC, unspez.		
Benzaldehyd (100 mmol)	11.64	mg
Toluol (100 mmol)	13.65	mg
Phenol (100 mmol)	10.03	mg
B VOC (Kohlenwasserstoffe)		
Phenol (100 mmol)	18.78	mg
B VOC, unspez.		
Benzaldehyd (100 mmol)	50.55	mg
Toluol (100 mmol)	18.69	mg
Phenol (100 mmol)	20.31	mg
Emissionen (Wasser)		
Emissionen (W)		
B Abwärme		
Benzaldehyd (100 mmol)	541.07	kJ
Toluol (100 mmol)	843.60	kJ
Phenol (100 mmol)	488.56	kJ

Item	Quantity	Unit
B Carbonat		
Benzaldehyd (100 mmol)	4.37	mg
Toluol (100 mmol)	1.61	mg
Phenol (100 mmol)	2.12	mg
B Chlorid		
Benzaldehyd (100 mmol)	51.66	mg
Toluol (100 mmol)	45.04	mg
Phenol (100 mmol)	149.61	mg
B Feststoffe, gelöst		
Benzaldehyd (100 mmol)	2.03	mg
Toluol (100 mmol)	0.75	mg
Phenol (100 mmol)	1.96	mg
B Feststoffe, suspendiert		
Benzaldehyd (100 mmol)	5.65	mg
Toluol (100 mmol)	2.09	mg
Phenol (100 mmol)	8.58	mg
B Fluorid		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.06	mg
Toluol (100 mmol)	0.08	mg
Phenol (100 mmol)	0.05	mg
B Säuren als H(+)		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.93	mg
Toluol (100 mmol)	0.34	mg
Phenol (100 mmol)	1.54	mg
Stickstoffverbindungen (W)		
B Ammoniak		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.12	mg
Toluol (100 mmol)	0.18	mg
Phenol (100 mmol)	0.11	mg

Item	Quantity	Unit
B Ammonium		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.53	mg
Toluol (100 mmol)	0.74	mg
Phenol (100 mmol)	0.46	mg
B Nitrat		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.19	mg
Toluol (100 mmol)	0.15	mg
Phenol (100 mmol)	0.10	mg
B Salpetersäure		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.01	mg
Toluol (100 mmol)	0.01	mg
Phenol (100 mmol)	0.00	mg
B Stickstoffverb., unspez.		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.24	mg
Toluol (100 mmol)	0.09	mg
Phenol (100 mmol)	0.05	mg
B Stickstoffverbind. als N		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.01	mg
Toluol (100 mmol)	0.02	mg
Phenol (100 mmol)	0.01	mg
B Sulfat		
Benzaldehyd (100 mmol)	249.41	mg
Toluol (100 mmol)	382.28	mg
Phenol (100 mmol)	244.53	mg
Verbindungen, anorganisch (W)		
B Chlor		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.35	mg
Toluol (100 mmol)	0.55	mg
Phenol (100 mmol)	0.32	mg

Item	Quantity	Unit
Radionuklide (W)		
B Radionuklide, gesamt		
Benzaldehyd (100 mmol)	1032.32	kBq
Toluol (100 mmol)	1609.51	kBq
Phenol (100 mmol)	932.12	kBq
Verbindungen, organisch (W)		
B Detergenzien, Öl		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.98	mg
Toluol (100 mmol)	0.36	mg
Phenol (100 mmol)	1.02	mg
halog. org. Verbindungen (W)		
chlor. org. Verbindungen (W)		
chlor. Verbindungen, aliph. (W)		
Kohlenwasserstoffe (W)		
B Kohlenwasserstoffe, unspesz.		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.94	mg
Toluol (100 mmol)	0.35	mg
Phenol (100 mmol)	0.61	mg
B Phenole		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.03	mg
Toluol (100 mmol)	0.01	mg
Phenol (100 mmol)	0.02	mg
B Verbindungen, org., gelöst		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.54	mg
Toluol (100 mmol)	0.20	mg
Phenol (100 mmol)	0.31	mg
Indikatorparameter		
B BSB-5		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.30	mg
Toluol (100 mmol)	0.13	mg
Phenol (100 mmol)	0.37	mg

Item	Quantity	Unit
B CSB		
Benzaldehyd (100 mmol)	7.13	mg
Toluol (100 mmol)	2.76	mg
Phenol (100 mmol)	23.57	mg
B TOC		
Benzaldehyd (100 mmol)	0.55	mg
Toluol (100 mmol)	0.86	mg
Phenol (100 mmol)	0.50	mg
Hilfsstoffe Reaktion/Aufarbeitung		
G Cyclohexan		
Toluol (100 mmol)	46.74	g
G Ethanol		
Toluol (100 mmol)	7.89	g
G Methyl-t-butylether		
Benzaldehyd (100 mmol)	110.66	g
G Natriumhydrogencarbonat		
Toluol (100 mmol)	3.20	g
G Stickstoff		
Toluol (100 mmol)	200.00	g
Wasser		
Abwasser		
B Abwasser (Kesselabschlammung)		
Benzaldehyd (100 mmol)	23.61	kg
Toluol (100 mmol)	36.81	kg
Phenol (100 mmol)	21.32	kg
B Abwasser, geklärt		
Benzaldehyd (100 mmol)	393.23	mg
Toluol (100 mmol)	613.09	mg
Phenol (100 mmol)	355.06	mg

<b>Item</b>	<b>Quantity</b>	<b>Unit</b>
B Abwasser (Kühlwasser)		
Benzaldehyd (100 mmol)	36.88	kg
Toluol (100 mmol)	53.76	kg
Phenol (100 mmol)	31.91	kg
B Abwasser (Prozess)		
Benzaldehyd (100 mmol)	67.55	g
Toluol (100 mmol)	30.21	g
Phenol (100 mmol)	34.28	g
B Abwasser, unspez.		
Benzaldehyd (100 mmol)	995.63	g
Toluol (100 mmol)	800.00	g
Phenol (100 mmol)	1403.99	g
B Sickerwasser, diffus		
Benzaldehyd (100 mmol)	46.65	mg
Toluol (100 mmol)	72.73	mg
Phenol (100 mmol)	42.12	mg
B Sickerwasser, gefasst		
Benzaldehyd (100 mmol)	9.48	mg
Toluol (100 mmol)	14.78	mg
Phenol (100 mmol)	8.56	mg
B Wasserdampf		
Benzaldehyd (100 mmol)	5982.85	g
Toluol (100 mmol)	9328.02	g
Phenol (100 mmol)	5402.13	g
<hr/>		
<b>Sum</b>	<b>Quantity</b>	<b>Unit</b>
kBq	4174.17	kBq
kJ	10354.42	kJ
kg	422.55	kg

## A.6. Berechnung des Energieverlustes der Apparaturen

### A.6.1. Berechnung der abstrahlenden Fläche der Apparaturen

#### A.6.1.1. Heizpilz

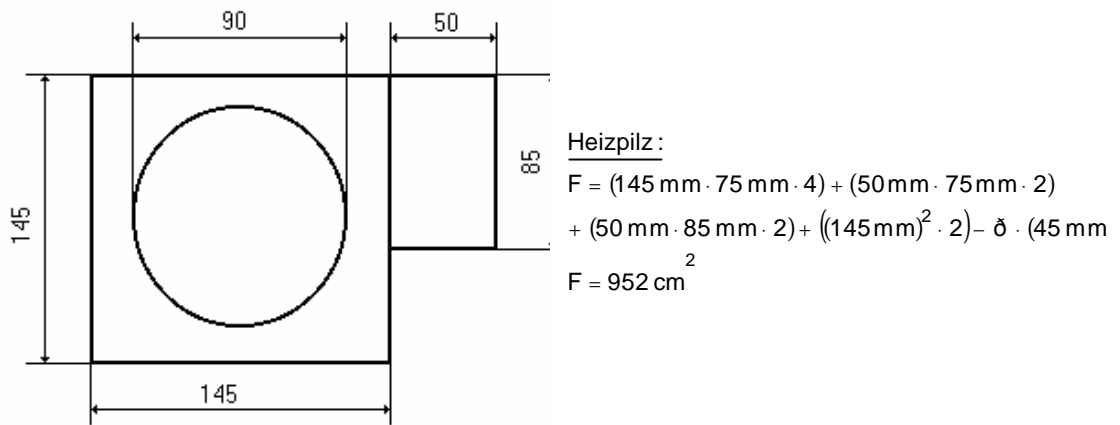
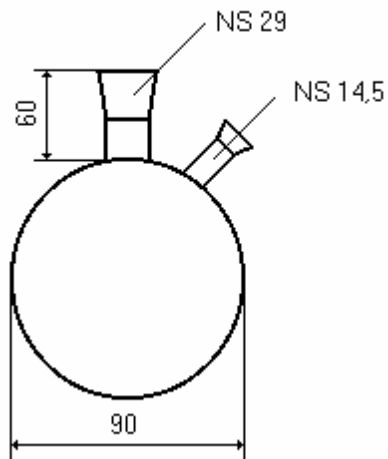


Abbildung 1: Skizze Heizpilz

#### A.6.1.2. Reaktionskolben



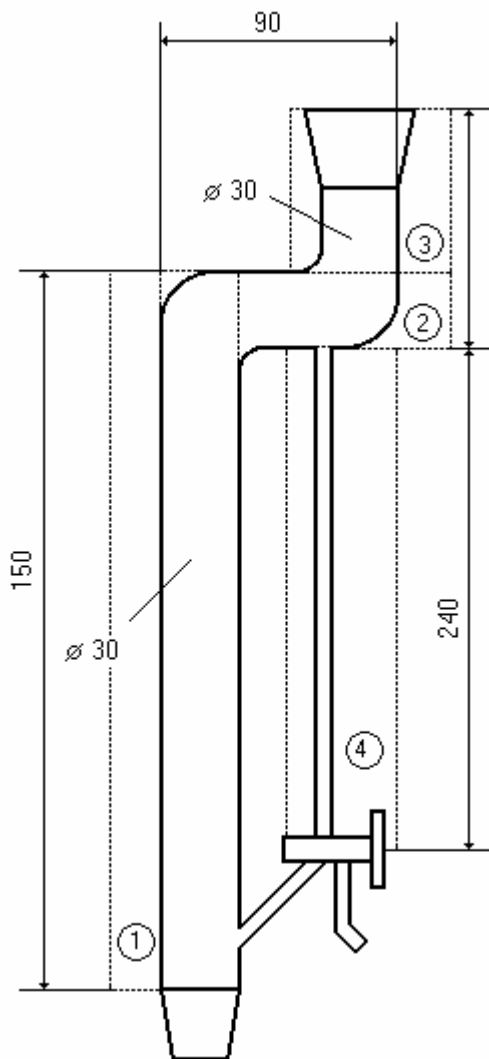
Reaktionskolben :

a) Halbkugel :  $\frac{4 \cdot \delta \cdot r^2}{2} = \frac{4 \cdot \delta \cdot (45 \text{ mm})^2}{2} = 127 \text{ cm}^2$

b) Schliff :  $2 \cdot \delta \cdot r \cdot h = 2 \cdot \delta \cdot 15 \text{ mm} \cdot 60 \text{ mm} = 57 \text{ cm}^2$

Abbildung 2: Skizze Reaktionskolben

### A.6.1.3. Wasserabscheider



Wasserabscheider :

$$1 \Rightarrow 2 \cdot \delta \cdot r \cdot h = 2 \cdot \delta \cdot 15 \text{ mm} \cdot 240 \text{ mm} = 226 \text{ cm}^2$$

$$2 \Rightarrow 2 \cdot \delta \cdot r \cdot h = 2 \cdot \delta \cdot 15 \text{ mm} \cdot 60 \text{ mm} = 57 \text{ cm}^2$$

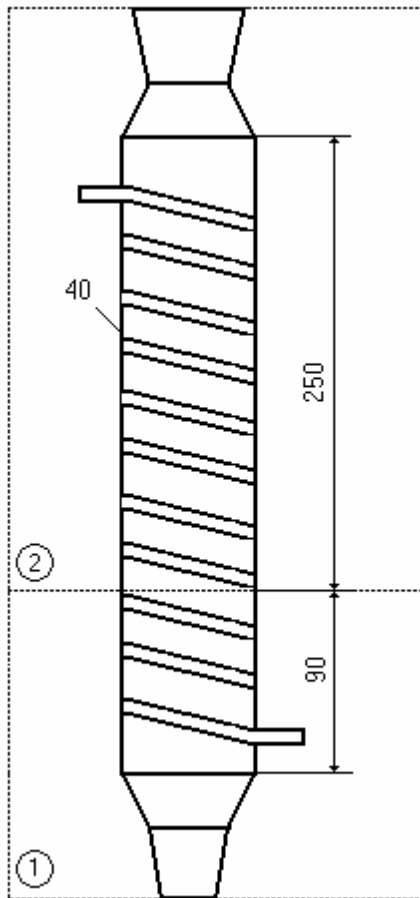
$$3 \Rightarrow 2 \cdot \delta \cdot r \cdot h = 2 \cdot \delta \cdot 15 \text{ mm} \cdot 50 \text{ mm} = 47 \text{ cm}^2$$

$$4 \Rightarrow 2 \cdot \delta \cdot r \cdot h = 2 \cdot \delta \cdot 150 \text{ mm} \cdot 7,5 \text{ mm} = 71 \text{ cm}^2$$

**Abbildung 3: Skizze Wasserabscheider**



#### A.6.1.4. Kühler



Kühler:

$$1 \Rightarrow 2 \cdot \delta \cdot r \cdot h = 2 \cdot \delta \cdot 20 \text{ mm} \cdot 90 \text{ mm} = 113 \text{ cm}^2$$

$$2 \Rightarrow 2 \cdot \delta \cdot r \cdot h = 2 \cdot \delta \cdot 20 \text{ mm} \cdot 270 \text{ mm} = 339 \text{ cm}^2$$

**Abbildung 4: Skizze Kühler**

#### A.6.1.5. Heizplatte und Ölbad

Heizplatte:

$$F = F_{\text{oben}} - F_{\text{ölbad}} + F_{\text{unten}} + F_{\text{seite}}$$

$$F = 2 \cdot (\delta \cdot (67,5 \text{ mm})^2) - (57,5 \text{ mm})^2 \cdot \delta + 2 \cdot \delta \cdot 67,5 \text{ mm} \cdot 15 \text{ mm}$$

$$F = 316,7 \text{ cm}^2$$

$$F_{\text{spalte}} = 2 \cdot \delta \cdot 67,5 \text{ mm} \cdot 6 \text{ mm} = 25 \text{ cm}^2$$

Ölbad:

$$\text{Seitenfläche} = 2 \cdot \delta \cdot r \cdot h = 235 \text{ cm}^2$$

## A.6.2. Energieverluste der Apparatur „Ölbad“

Stoffwerte :

$$\dot{a}_{\text{Glas}} = 0,9$$

$$\dot{a}_{\text{markierte.Fläche}} = 1,0$$

$$c_B = 5,67 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}^4}$$

$$\dot{a} = 5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}}$$

$$Q = (\dot{a} \cdot A \cdot \Delta T) + \left( c_B \cdot \dot{a} \cdot \left( \left( \frac{T_2}{100} \right)^4 - \left( \frac{T_1}{100} \right)^4 \right) \right)$$

a) Kühler – Kondensationsbereich :

$$Q = 5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \cdot 0,0113 \text{ m}^2 \cdot 50 \text{ K} + 5,67 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}^4} \cdot 0,9 \cdot \left( 3,43 \text{ K}^4 - 2,93 \text{ K}^4 \right) \cdot 0,0113 \text{ m}^2$$

$$Q = 6,5566 \text{ W}$$

b) Wasserabscheider – Paket 1 – 3 :

$$Q = 5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \cdot 0,033 \text{ m}^2 \cdot 50 \text{ K} + 5,67 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}^4} \cdot 0,9 \cdot \left( 3,43 \text{ K}^4 - 2,93 \text{ K}^4 \right) \cdot 0,033 \text{ m}^2$$

$$Q = 19,1475 \text{ W}$$

c) Kolben – uneingetaucht :

$$Q = 5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \cdot 0,0184 \text{ m}^2 \cdot 50 \text{ K} + 5,67 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}^4} \cdot 0,9 \cdot \left( 3,43 \text{ K}^4 - 2,93 \text{ K}^4 \right) \cdot 0,0184 \text{ m}^2$$

$$Q = 10,6762 \text{ W}$$

d) Ölbad :

$$Q = 5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \cdot 0,0235 \text{ m}^2 \cdot 111 \text{ K} + 5,67 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}^4} \cdot 0,9 \cdot \left( 4,04 \text{ K}^4 - 2,93 \text{ K}^4 \right) \cdot 0,0235 \text{ m}^2$$

$$Q = 36,1505 \text{ W}$$

e) Heizplatte – schwarzer Strahler :

$$Q = 5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \cdot 0,0317 \text{ m}^2 \cdot 170 \text{ K} + 5,67 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}^4} \cdot 1 \cdot \left( 4,63 \text{ K}^4 - 2,93 \text{ K}^4 \right) \cdot 0,0317 \text{ m}^2$$

$$Q = 96,2955 \text{ W} \approx 57\%$$

$\Sigma$  *Verluste* = 168,8263 W  $\hat{=}$  338 Wh bei 2h Reaktionszeit

### A.6.3. Energieverluste der Apparatur „Heizpilz“

$$Q = \dot{a} \cdot A \cdot \Delta T + c \cdot \dot{a} \cdot \left( \left( \frac{T_2}{100} \right)^4 - \left( \frac{T_1}{100} \right)^4 \right)$$

a) Kühlerbere ich.1:

$$Q = 5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \cdot 0,0113 \text{ m}^2 \cdot 50 \text{ K} + 5,67 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}^4} \cdot 0,9 \cdot \left( 3,43 \text{ K}^4 - 2,93 \text{ K}^4 \right) \cdot 0,0113 \text{ m}^2$$

$$Q = 6,56 \text{ W}$$

b) Wasserabscheider – Paket 1 – 3 :

$$Q = 5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \cdot 0,033 \text{ m}^2 \cdot 50 \text{ K} + 5,67 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}^4} \cdot 0,9 \cdot \left( 3,43 \text{ K}^4 - 2,93 \text{ K}^4 \right) \cdot 0,033 \text{ m}^2$$

$$Q = 19,15 \text{ W}$$

c) Wasserabscheider – Paket 4 :

$$Q = 5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \cdot 0,0071 \text{ m}^2 \cdot 12 \text{ K} + 5,67 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}^4} \cdot 0,9 \cdot \left( 3,05 \text{ K}^4 - 2,93 \text{ K}^4 \right) \cdot 0,0071 \text{ m}^2$$

$$Q = 0,89 \text{ W}$$

d) Kolben + Schliff :

$$Q = 5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \cdot 0,0184 \text{ m}^2 \cdot 50 \text{ K} + 5,67 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}^4} \cdot 0,9 \cdot \left( 3,43 \text{ K}^4 - 2,93 \text{ K}^4 \right) \cdot 0,0184 \text{ m}^2$$

$$Q = 10,68 \text{ W}$$

e) Heizpilz :

$$Q = 5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \cdot 0,0952 \text{ m}^2 \cdot 30 \text{ K} + 5,67 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}^4} \cdot 1 \cdot \left( 3,23 \text{ K}^4 - 2,93 \text{ K}^4 \right) \cdot 0,0952 \text{ m}^2$$

$$Q = 33,25 \text{ W} \quad \approx 47\%$$

$$\sum \text{Verluste} = 70,53 \text{ W} \quad \hat{=} 141,1 \text{ Wh bei 2h Reaktionszeit}$$

#### A.6.4. Energieverluste durch Kühlwasser

$$Q = m \cdot c_p \cdot \Delta T = 12,1 \text{ kg} \cdot 4,179 \frac{\text{kJ}}{\text{kg} \cdot \text{K}} \cdot 8 \text{ K}$$

$$Q = 112,4 \text{ Wh}$$

#### A.6.5. Energiebilanz - Acetalisierung Heizpilz:

Stoffwerte :

$$c_{p,\text{Cyclohexan}} = 156 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$c_{p,\text{Ethylenglycol}} = 150 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$M_{\text{Cyclohexan}} = 84,16 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$\text{Ethylenglycol} = 55,1 \text{ mmol} = 0,0551 \text{ mol}$$

$$\text{Cyclohexan} = 0,833 \text{ mol}$$

$$T_1 = 20^\circ \text{C}$$

$$T_2 = 79^\circ \text{C}$$

$$\Rightarrow Q_{\text{Cyclohexan}} = 0,8933 \text{ mol} \cdot 156 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 59 \text{ K} = 2,13 \text{ Wh}$$

$$\Rightarrow Q_{\text{Ethylenglycol}} = 0,0551 \text{ mol} \cdot 150 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 59 \text{ K} = 0,14 \text{ Wh}$$

Aufheizen: 2,5 Wh

Kühlwasser 112,4 Wh

Apparatur 141,1 Wh

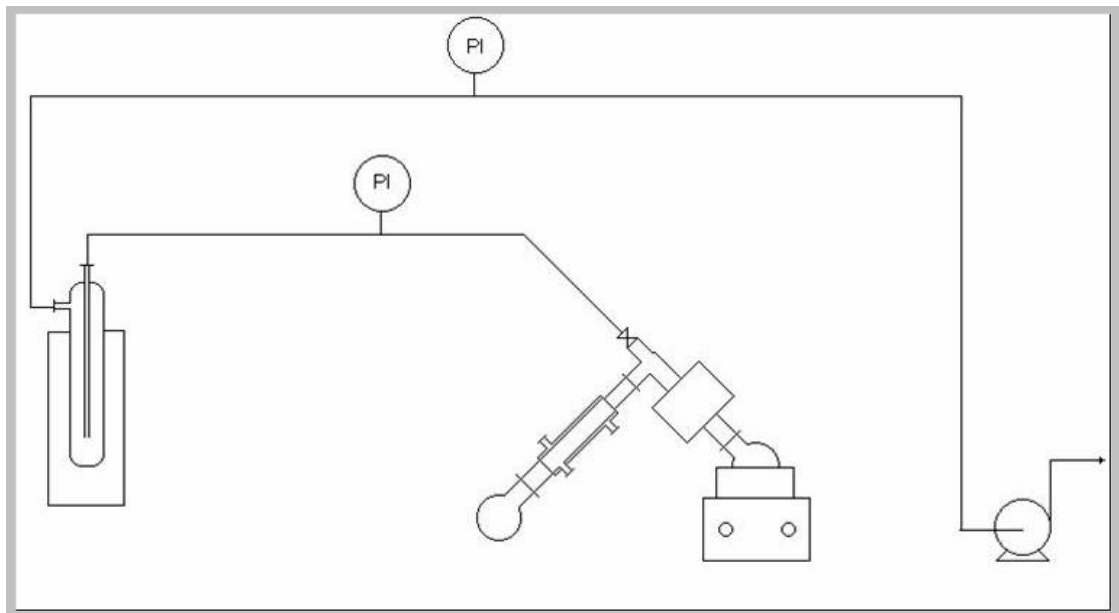
Summe: 256,0 Wh

## A.7. Verbrauchstabellen Vakuumerzeugung

Zur Abschätzung der Spanne des Energie- bzw. Wasserverbrauchs unterschiedlicher Methoden der Vakuumerzeugung wurden drei verschiedene Vakuumpumpen und drei unterschiedliche Modelle von Wasserstrahlpumpen untersucht. Nachfolgend werden zunächst die Ergebnisse der Untersuchung der Vakuumpumpen vorgestellt, im Anschluss daran die Wasserstrahlpumpen.

### A.7.1. Vakuumpumpen - Energieverbrauchstabellen

Für die Untersuchungen zum Energieverbrauch der ausgewählten Vakuumpumpen wurde jeweils eine gleiche Versuchsanordnung gewählt (Abbildung 5).



**Abbildung 5: Aufbau zur Messung des Energieverbrauchs von Vakuumpumpen**

Die Ergebnisse der Messungen werden nachfolgend dargestellt.

#### A.7.1.1. Vacuubrand Modell „MZ 2C/1,7“

Das Modell Vacuubrand MZ 2C/1,7 ist eine klassische Membranpumpe. Bei voller Gasbelastung weist die Pumpe einen Verbrauch von rund 3,1 Wh/min auf, ohne Gasbelastung bei einem erreichten maximalen Druck von 60 hPa rund 2,6 Wh/min. Der Energieverbrauch mit und ohne Gasbelastung ist als annähernd gleich anzusehen. Der Pumpe wird deshalb ein von der Gasbelastung unabhängiger durchschnittlicher Energieverbrauch von 2,8 Wh/min zugewiesen.

Vacuubrand Modell MZ 2C/1,7			
Verbrauch (Wh/min)	Versuch Nr.	1013 mbar	60 mbar
	1	3,08	2,58
	2	3,10	2,52
	3	3,06	2,61
	4	3,07	2,53
	5	3,04	2,51
	6	3,07	2,63
	7	3,03	2,56
	8	3,04	2,60

**Tabelle 1: Energieverbrauch Vakuumpumpe Vacuubrand MZ 2C/1,7**

### A.7.1.2. Ölpumpe Leybold/Heraeus Modell "trivac D2A"

Die untersuchte Ölpumpe Leybold/Heraeus Modell trivac D2A zeigt bei allen untersuchten Drücken annähernd gleichen Energieverbrauch. Dieser liegt im Mittel bei 5,4 Wh/min.

Ölpumpe Leybold/Heraeus Modell trivac D2A					
	Versuch Nr.	1010 mbar	600 mbar	200 mbar	1 mbar
Verbrauch (Wh/min)	1	5,28	5,36	5,52	5,52
	2	5,12	5,36	5,50	5,55
	3	5,28	5,35	5,52	5,60
	4	5,24	5,34	5,51	5,69
	5	5,23	5,35	5,53	5,53
	6	5,26	5,54	5,48	5,73
	7	5,24	5,16	5,51	5,59
	8	5,25	5,34	5,52	5,60

**Tabelle 2: Energieverbrauch Vakuumpumpe Leybold/Heraeus trivac D2A**

### A.7.1.3. Vacuubrand Pumpstand Modell "CVC 2000"

Diese Vakuumpumpe ist eine drehzahlgesteuerte Ölpumpe d.h. das Vakuum wird nicht wie üblich über eine Belüftung eingestellt, sondern in Abhängigkeit der Drehzahl geregelt. Die Messungen ergaben bei voller Gasbelastung einen durchschnittliche Verbrauchswert von 0,94 Wh/min. Die Messungen bei niedrigeren Drücken sind weniger repräsentativ, da die Pumpe sich bei Erreichen des Zieldruckes selbsttätig ausschaltet. Es ist daher davon auszugehen, dass der Energieverbrauch im Betrieb über den in Tabelle 3 angegebenen Werten, jedoch unterhalb des Verbrauchs der vollen Gasbelastung liegt.

Drehzahlgesteuerter Pumpstand Vacuubrand"CVC 2000"					
	Versuch Nr.	1010 mbar	600 mbar	200 mbar	3 mbar
Verbrauch (Wh/min)	1	0,65	0,15	0,23	0,18
	2	0,96	0,12	0,11	0,16
	3	0,95	0,12	0,12	0,19
	4	0,94	0,12	0,12	0,18
	5	0,93	0,13	0,11	0,19
	6	0,93	0,12	0,12	0,17
	7	0,94	0,12	0,11	0,19
	8	0,92	0,13	0,12	0,18

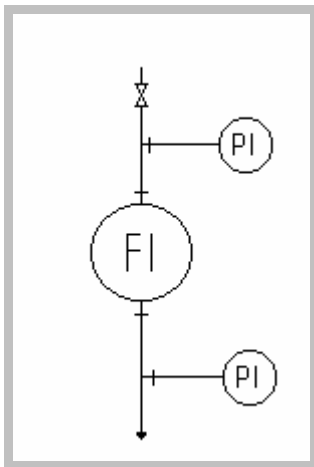
**Tabelle 3: Energieverbrauch Vakuumpumpe Vacuubrand CVC 2000**

Nachfolgend werden nun die Ergebnisse der Untersuchung des Wasserverbrauchs von Wasserstrahlpumpen dargestellt.



## A.7.2. Wasserstrahlpumpen - Wasserverbrauch

Obwohl die Vakuumerzeugung mit Hilfe von Wasserstrahlpumpen nicht mehr dem Stand der Technik entspricht, kommt sie immer noch weit verbreitet zum Einsatz und wurde aus diesem Grund mit untersucht. Die ausgewählten Wasserstrahlpumpen (Hersteller jeweils unbekannt) erreichen ihren maximalen Unterdruck erst nach einigen Minuten. Dabei ist der Leitungsdruck von 4,8 bar stets konstant. Für die Durchführung der Messungen wurde folgender Aufbau gewählt (Abbildung 6).



**Abbildung 6: Aufbau zur Messung des Wasserverbrauchs von Wasserstrahlpumpen**

Tabelle 4 zeigt die ermittelten Verbrauchswerte.

	Wasserstrahlpumpe			
	Kunststoff	Glas 1	Glas 2	
Vakuum Start	40	40	40	mbar
Vakuum nach 20 min	26	36	34	mbar
Wasserverbrauch	8,74	6,95	6,57	L/min

**Tabelle 4: Wasserverbrauch Wasserstrahlpumpen**

---

Page 1 of 1





## Lebenslauf

Name: Achim Diehlmann  
Geburtsdatum: 26.03.1972  
Geburtsort: Kandel/Pfalz  
Familienstand: verheiratet  
Kinder: Luca Elisabeth

September 1978 - Juni 1982	Grundschule Steinfeld/Pfalz
September 1984 - Mai 1988	Realschule, Bad Bergzabern
August 1988 - Juli 1991	Ausbildung zum Chemielaboranten, BASF AG Ludwigshafen
Juli 1991 - Dezember 1991	Chemielaborant bei BASF AG Ludwigshafen
Januar 1992 - Dezember 1992	Grundwehrdienst
Januar 1993 - August 1995	Chemielaborant bei BASF AG Ludwigshafen
August 1993 - Mai 1995	Fachoberschule Naturwissenschaften (TZ), Berufsbildende Schule Ludwigshafen Abschluss: Fachhochschulreife
Oktober 1995 - Oktober 1997	Fachhochschule Bingen Studiengang: Umweltschutz
Oktober 1997 - August 1998	University of Hertfordshire (GB) Studiengang: Environmental Studies
Oktober 1998 - Juli 1999	Fachhochschule Bingen Abschluss: Dipl.-Ing. (FH)

seit Oktober 1999

wiss. Mitarbeiter am Institut für Technische  
Chemie und Umweltchemie der Friedrich-  
Schiller-Universität Jena

Jena, 9. Januar 2001

# **Thesen zur Dissertation**

## **Beitrag zur Implementierung des Leitbildes**

### **„Nachhaltige Entwicklung“ in der Chemieausbildung**

Vorgelegt von Dipl.-Ing. (FH) Achim Diehlmann.

Auf der Konferenz der Vereinten Nationen für Umwelt und Entwicklung (UNCED) 1992 in Rio de Janeiro wurde „Sustainable Development“ als weltweit wichtigstes Entwicklungsziel festgelegt. Um dieses Ziel der „nachhaltigen Entwicklung“ zu erreichen, müssen mitunter tief greifende Reformen auch in den Köpfen durchgeführt werden. Für Chemiker bedeutet „nachhaltige Entwicklung“, dass sie aufgrund ihrer fachspezifischen Kompetenzen vor allem einen Beitrag zur Nachhaltigkeit im Bereich der Ökologie leisten müssen. Ihr Ziel sollte es sein, den Ressourcen- und Energieverbrauch von Produkten und Prozessen zu senken und die mit der Produktion einhergehenden Umweltlasten zu minimieren. Viele der heute industriell betriebenen Verfahren haben in diesen Bereichen Schwachstellen. Diese Schwachstellen lassen sich in veränderter Form häufig bereits bei den zur Prozessentwicklung notwendigen Laborreaktionen finden. Um den wissenschaftlichen Nachwuchs schon während der Ausbildung mit dieser Problematik vertraut zu machen, wurden in dieser Arbeit beispielhaft organisch-chemische Praktikumsexperimente auf wiederkehrende allgemeingültige Schwachstellen im Ressourcen- und Energieverbrauch untersucht. Dabei wurden vor allem Problembereiche, die im obigen Sinne außerhalb der klassischen, naturgemäß stark reaktionsbezogenen chemischen Denkweise liegen überprüft. Dies bedeutet, dass nicht nur die Reaktion und die Aufarbeitung, sondern auch die jeweils vorgelagerten Prozess-Schritte sowie verwendete Geräte und Apparaturen bei der Untersuchung berücksichtigt wurden.

Im Anschluss an die Schwachstellenanalyse wurde ein Kennzahlensystem zur Einschätzung und Veranschaulichung der Größe dieser Schwachstellen bei Reaktionen entwickelt. Als didaktisch einprägsame „Handlungsanleitungen“ zur Optimierung der identifizierten Mängel der Reaktionen im Labormaßstab wurden „**Sustainable Synthesis Optimisation Rules (SUSOR)**“ aufgestellt, deren Anwendung einen Beitrag zu Vermittlung und Training ganzheitlichen Denkens sowie eine Verbesserung der Nachhaltigkeit einer Reaktion aus ökologischer Sicht verspricht.

Die Ergebnisse der Schwachstellenanalyse können zu folgenden Thesen zusammengefasst werden:

- 1) Im Energieverbrauch von Laborreaktionen können allgemeingültige Schwachstellen deutlich nachgewiesen werden. Diese lassen sich oft auf die verwendeten Laborgeräte zurückführen, die vordergründig nicht unter Berücksichtigung des Energieverbrauchs bei ihrer Anwendung entwickelt wurden. Auch das Verhalten des Bearbeiters bei der Durchführung von Reaktionen im Labormaßstab trägt nicht unerheblich zu deren Energieverbrauch bei.
- 2) Der Stoffstrom der untersuchten Praktikumsreaktionen zeigt ebenfalls deutliche Schwachpunkte auf. Dies ist vor allem auf die bei Reaktion und Aufarbeitung eingesetzte Menge der Hilfsstoffe zurückzuführen, die oft dem tatsächlichen Bedarf nicht angepasst ist.
- 3) Auch unter Berücksichtigung vorgelagerter Prozessketten können Mängel bei Laborreaktionen festgestellt werden. Zurückzuführen ist dies hauptsächlich auf die verwendeten Hilfsstoffe. Die in den Vorketten zur Erzeugung dieser Auxiliaren benötigte Energie sowie die verbrauchten Ressourcen werden bei der Auswahl der Hilfsstoffe nicht ausreichend berücksichtigt.



Die nachfolgenden Thesen unterstreichen das diskutierte und zum Teil selbst entwickelte Kennzahlensystem:

- 4) Mit Hilfe von Kennzahlen können Reaktionen auf Schwachstellen im Energie- und Ressourcenverbrauch untersucht werden.
- 5) Die Kennzahlen „Energieinduzierte Methanäquivalente“ und CO<sub>2</sub>-Äquivalente können den Energieverbrauch einer Reaktion in einer für Chemiker didaktisch eingängigen Form abbilden.
- 6) Die Berücksichtigung von einer Reaktion vor- und nachgelagerten Prozessen bei der Kennzahlenbildung ist aufgrund des sehr hohen Aufwands der Datenbeschaffung bzw. Datenerhebung nicht immer sinnvoll.

Das neu entwickelte Werkzeug „Sustainable Synthesis Optimisation Rules (SUSOR)“ kann einen wesentlichen Beitrag zur Integration der ganzheitlichen Sichtweise in die Ausbildung und damit zu mehr Nachhaltigkeit aus ökologischer Sicht leisten. Beispiele der SUSOR, die oft auf verfahrenstechnischen Zusammenhängen aufbauen, sind:

**I.** *Thermische Isolation:*

Die Versuchsanordnungen sind bestmöglich zu isolieren.

**II.** *Eigenschaften Lösungsmittel*

Lösungsmittel sind **auch** unter Berücksichtigung der spezifischen Wärmekapazität und der notwendigen Reaktionstemperatur auszuwählen.

**III.** *Berücksichtigung vorgelagerter Prozesse*

Die Lasten vorgelagerter Prozesse sowie deren Entsorgungswege sind, wenn möglich, bei der Eduktauswahl zu berücksichtigen.

Die in der Dissertation erarbeiteten Ergebnisse wurden im Rahmen des DBU-Projektes „Nachhaltiges Organisches Praktikum“ diskutiert und somit einem „critical review“ durch den Anwender unterzogen.