

Vergleich unterschiedlicher Synthesen von Cyclopentanon-2-carbonsäureethylester mit Hilfe des Computerprogramms EATOS

Einleitung:

EATOS (Environmental Assessment Tool for Organic Syntheses) ist ein Computerprogramm, mit dem die Umweltverträglichkeit von organisch-chemischen Synthesen bewertet werden kann. Außerdem lassen sich verschiedene Synthesewege zu einem Produkt schnell und übersichtlich miteinander vergleichen. Es können folgende Kennzahlen graphisch dargestellt werden:

- Massenindex (S^{-1})
- Umweltfaktor (E)
- Umweltindex (Input) (EI_in)
- Umweltindex (Output) (EI_out)

Die im Folgenden betrachteten Massenindices und Umweltfaktoren werden wie folgt berechnet:

$$\text{Massenindex } (S^{-1}) = \Sigma \text{ Rohstoff [kg]} / \text{Produkt [kg]}$$

$$\text{Umweltfaktor (E)} = \Sigma \text{ Abfall [kg]} / \text{Produkt [kg]}$$

Sie geben also jeweils das Verhältnis der Mengen der eingesetzten Rohstoffe bzw. des anfallenden Abfalls zur Menge des entstehenden Produktes an.

Je kleiner die Kennzahlen, desto höher ist die Umweltverträglichkeit.

Zur Überschaubarkeit werden die einzelnen Säulen der Graphik zusätzlich nach Edukten, Lösungsmitteln, Katalysatoren, Hilfsstoffen und Nebenprodukten aufgeschlüsselt.

Begriffsklärung:

Nachhaltigkeit:

Dauerhafte 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.

Atomselektivität (Atomökonomie):

Sie gibt an, wie viel von den auf der linken Seite der stöchiometrischen Gleichung stehenden Atommassen im Produkt wieder auftauchen. Damit ist sie ein Maß für die Beurteilung des synthetischen Ansatzes vom ökonomischen Standpunkt aus.

Ökobilanz:

Ökobilanzen können als Instrument zur umweltgerechten Bewertung von Produkten eingesetzt werden. In diese Bewertung wird der gesamte Lebenszyklus von der Rohstoffgewinnung bis zur Entsorgung oder Wiederverwertung miteinbezogen.

Massenindex:

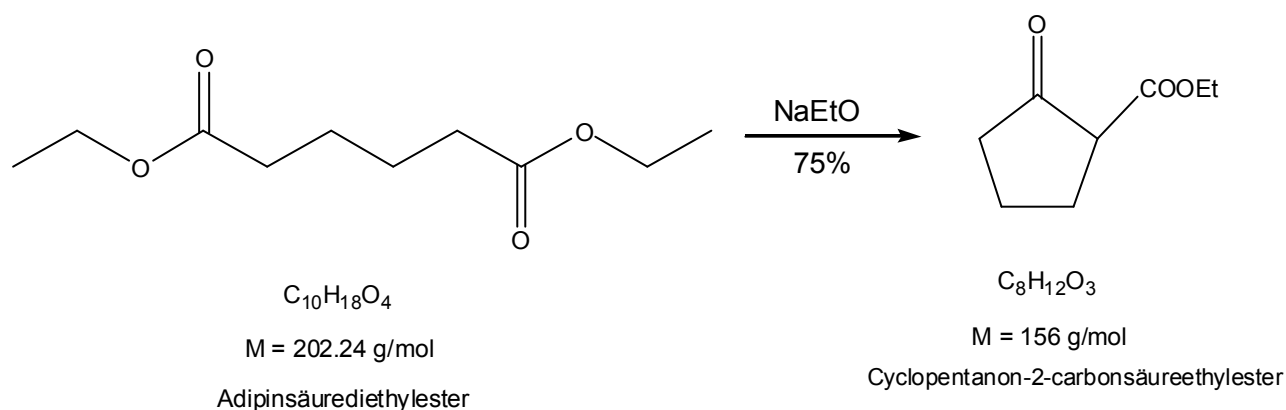
Massenindices geben das Verhältnis an, zwischen eingesetzter Rohstoffmenge und Produktmenge. Sie sind also ein Instrument, um darzustellen, wie effektiv die Umsetzung der Edukte zum gewünschten Produkt verläuft.

Umweltfaktor:

Kennzahl, die die Belastung der Umwelt durch anfallende Nebenprodukte, Koppelprodukte und sonstige Abfälle berücksichtigt.

Reaktionsgleichung:

Die beiden betrachteten Synthesen besitzen denselben Reaktionsmechanismus und dieselbe Ausbeute:

Ansatz für Reaktion Organikum:

Name	Summenformel	Molmassen [g/mol]	Dichte [g/ml]	eingesetzte Menge	Gefahren- symbol	MAK- Wert
Adipinsäurediethylester	$C_{10}H_{18}O_4$	202.24	1.01	0.5 mol		
Natrium	Na	22.99	0.97	0.5 mol		
Ethanol	C_2H_5OH	46.07	0.816	0.1 ml		960
Toluol	C_7H_8	92.14	0.865	500 ml	Xn	190
Wasser	H_2O	18.015	1	260 ml		
Salzsäure	HCl	36.46	1.19	0,5 mol		8
Diethylether	$(C_2H_5)_2O$	74.12	0.708	900 ml	Xn	1200
Natriumsulfat	Na_2SO_4	142.04	2.70	0,845 mol		

Ansatz für Reaktion Hausvorschrift M023:

Name	Summenformel	Molmassen [g/mol]	Dichte [g/ml]	eingesetzte Menge	Gefahren- symbol	MAK- Wert [mg/m ³]
Adipinsäurediethyl- ester	C ₁₀ H ₁₈ O ₄	202.24	1.01	20.22 g (100 mmol)		
Natrium	Na	22.99	0.97	2.5 g (110 mmol)		
Ethanol	C ₂ H ₅ OH	46.07	0.816	0.3 ml		960
Toluol	C ₇ H ₈	92.14	0.865	300 ml	Xn	190
Wasser	H ₂ O	18.015	1	140 ml		
Salzsäure	HCl	36.46	1.19	15 ml		8
Diethylether	(C ₂ H ₅) ₂ O	74.12	0.708	210 ml	Xn	1200
Natriumsulfat	Na ₂ SO ₄	142.04	2.70	20 g		

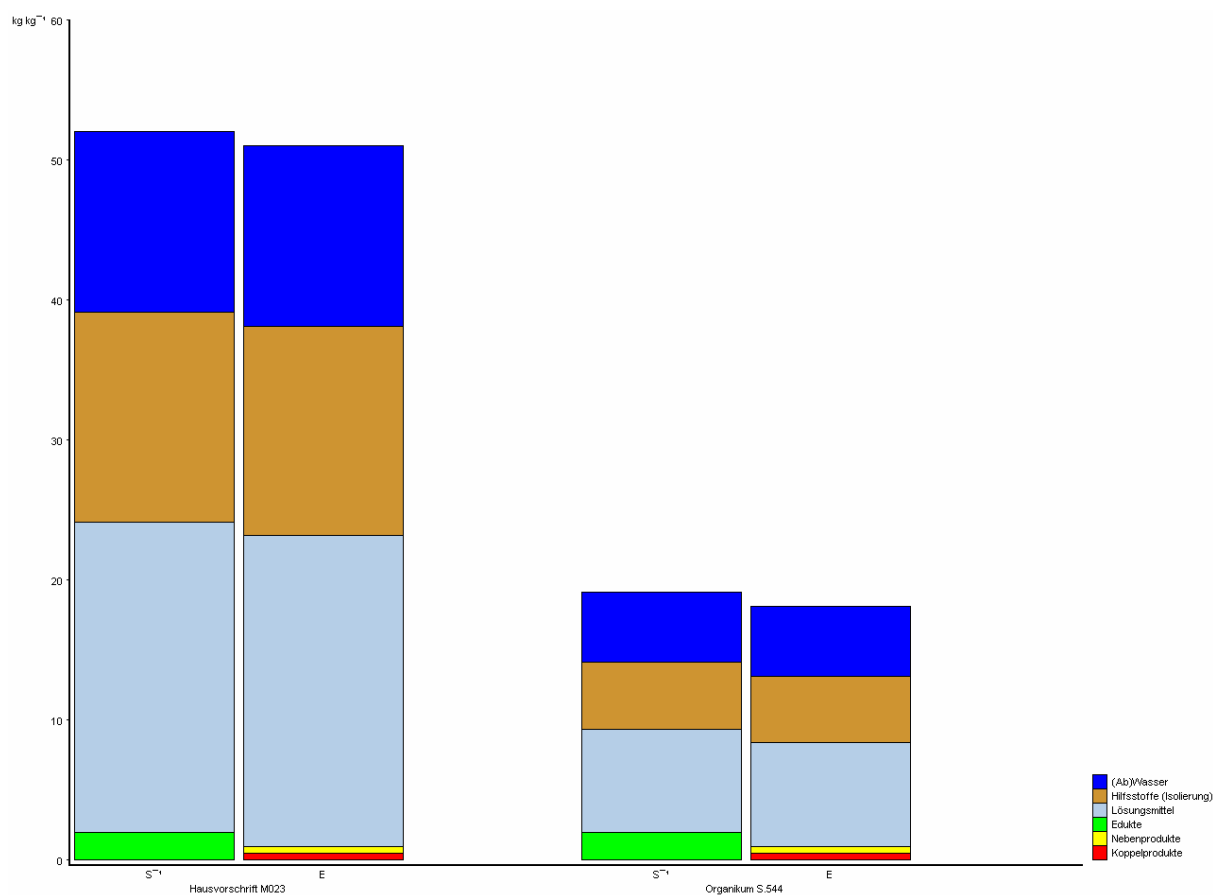


Abb. 1: Bilanzierung der Synthesen

Die Abbildung zeigt deutliche Unterschiede in der Umweltverträglichkeit der beiden Synthesewege. Die Vorschrift im Organikum ist eindeutig umweltverträglicher. Es wird deutlich, dass der Hauptunterschied in der Verwendung von Lösungsmitteln und Hilfsstoffen zur Isolierung zu suchen ist. In der Hausvorschrift wurden mehr als doppelt soviel Lösungsmittel eingesetzt und fast die doppelte Menge an Diethylether zur Aufarbeitung verwendet. Dies ist allerdings sehr verwunderlich, da beide Synthesewege prinzipiell

identisch sind. Sie unterscheiden sich nur in den Ansatzgrößen und geringfügig in der Durchführung.

Die einzig bedenklichen Stoffe in beiden Synthesen sind der Diethyläther (MAK: 1200 mg/m³; 29% in der Hausvorschrift und ca. 14% im Organikum) und das Toluol (MAK: 190 mg/m³; 42.6% in der Hausvorschrift und 38.8% im Organikum). Die ansonsten verwendeten Stoffe sind unbedenklich.

Schlussbetrachtung:

Auf diesem Weg hat das Programm zeigen können, dass auch Synthesen, die auf den ersten Blick gleich zu sein scheinen durchaus gravierende Unterschiede in der Umweltverträglichkeit aufweisen können.

Verbesserungsmöglichkeiten für die Synthese sind bei dem Verbrauch der Lösungsmittel zu suchen. Durch Redestillation könnten sich die Lösungsmittel zurückgewinnen lassen, so dass sie für eine neue Synthese wieder zur Verfügung stehen.

Literatur:

- [1] Autorenkollektiv, *Organikum*, 21. Auflage, VCH-Wiley, Weinheim, **2000**, S.544-546.
- [2] Hausvorschrift M023.
- [3] EATOS-Computerprogramm.
- [4] <http://eckehaat.uft.uni-bremen.de/praktikum/nopw/kennzahlen.php>.