

Environmental Assessment Tool for Organic Syntheses

EATOS

Version 1.1

Marco Eissen
Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Laboratorium für Technische Chemie
ETH Höngerberg, HCI G123
8093 Zürich

Jürgen O. Metzger
Carl von Ossietzky Universität Oldenburg
Fachbereich Chemie, Organische Chemie
Carl-von-Ossietzky-Str. 9-11
26111 Oldenburg

Neu in EATOS v1.1

Die vorliegende Bedienungsanleitung bezieht sich auf EATOS v1.0. Die vorliegende Software EATOS v1.1 enthält allerdings einige wenige Neuerungen, die in diesem Abschnitt zusammenfassend skizziert werden.

1. Die Möglichkeit, Produkte aus bereits eingetragenen Synthesen als Edukte oder Katalysatoren beispielsweise zum Aufbau von Synthesesequenzen zu berücksichtigen, wurde nun ausserdem auf Lösungsmittel und Hilfsstoffe ausgedehnt.
2. In der graphischen Wiedergabe können nun die bisher dargestellten horizontalen Linien optional zu- oder ausgeblendet werden (Dieser Menüpunkt ist unter „Diagramm → Stil → horizontale Linien“ zu erreichen).
3. Darüber hinaus wird bei der Erstellung der graphischen Wiedergabe die Ordinate nun mit einer Beschriftung versehen, die der Benutzer optional umklammern lassen kann (Dieser Menüpunkt ist unter „Diagramm → Legende → Einheiten in Klammern“ zu erreichen). Der Benutzer hat ferner die Möglichkeit, die Beschriftung seinen Vorstellungen nach abzuändern (Um die Beschriftung zu editieren, reicht ein Klick mit der linken Maustaste auf die Beschriftung).
4. Der ökonomische Index (CI) kann nun entweder in Preis / g oder Preis / kg angegeben werden. Die dazugehörige Wahlmöglichkeit findet sich im Fenster „Wichtung der Wichtungen“, welches unter dem Menüpunkt „Sonstiges“ aufzurufen ist.

Inhaltsverzeichnis

ENVIRONMENTAL ASSESSMENT TOOL FOR ORGANIC SYNTHESSES 1

1.1	VORAUSSETZUNG FÜR DEN BETRIEB / INSTALLATION DER SOFTWARE.....	5
1.1.1	<i>Voraussetzung für den Betrieb</i>	5
1.1.2	<i>Installation der Software</i>	5
1.2	KURZANLEITUNG FÜR EATOS	9
1.3	STARTEN VON EATOS	10
1.3.1	<i>Starten</i>	10
1.3.2	<i>Neues EATOS Projekt</i>	10
1.3.3	<i>Projekt löschen</i>	11
1.4	EINGABE VON SYNTHESEDATEN	12
1.4.1	<i>Neue Synthese (Teil I)</i>	12
1.4.2	<i>Stöchiometrische Reaktionsgleichung</i>	13
1.4.3	<i>Neue Synthese (Teil II)</i>	14
1.4.4	<i>Austauschen von Synthesen</i>	31
1.4.5	<i>Projekt, Substanzliste, Programm</i>	32
1.5	WICHTUNG	33
1.5.1	<i>Wichtungskategorie Ressourceninanspruchnahme</i>	35
1.5.2	<i>Wichtungskategorie Arbeitsschutz</i>	37
1.5.3	<i>Wichtungskategorie Humantoxizität (akut)</i>	41
1.5.4	<i>Wichtungskategorie chronische Toxizität</i>	43
1.5.5	<i>Wichtungskategorie Ökotoxikologie</i>	43
1.5.6	<i>Wichtungskategorie Ozonbildung</i>	45
1.5.7	<i>Wichtungskategorie Luftverschmutzung</i>	45
1.5.8	<i>Wichtungskategorie Akkumulation</i>	46
1.5.9	<i>Wichtungskategorie Abbaubarkeit</i>	47
1.5.10	<i>Wichtungskategorie Treibhauseffekt</i>	48
1.5.11	<i>Wichtungskategorie Ozonabbau</i>	49
1.5.12	<i>Wichtungskategorie Eutrophierung</i>	50
1.5.13	<i>Wichtungskategorie Versauerung</i>	50
1.6	ANGABE DER LITERATURQUELLE UND / ODER VERSUCHSBESCHREIBUNG	52
1.7	SUBSTANZLISTE	52
1.8	IMPORTIEREN UND EXPORTIEREN	54
1.8.1	<i>Exportieren von Substanzen in die Substanzliste</i>	54
1.8.2	<i>Importieren von Substanzen aus der Substanzliste und von Produkten</i> .	55
1.8.3	<i>Synthesesequenzen</i>	56
1.9	DARSTELLUNG DER ERGEBNISSE	59
1.9.1	<i>Wichtung der Wichtung</i>	63
1.10	FEHLERMELDUNGEN	64

1.1 Voraussetzung für den Betrieb / Installation der Software

1.1.1 Voraussetzung für den Betrieb

- Hardware u. System – Voraussetzung:
 - Mindestkonfiguration: CPU mit >200 MHz, 64 MB RAM, 10 MB freier Festplattenspeicher.
 - Mögliche Betriebssysteme: Alle Betriebssysteme für die es eine „Java Virtual Machine“ gibt, z.B. Windows 95/98/2000/NT, Linux u.a.

- Eine bereits installierte Version des Java 2 Runtime Environments v1.3.x (Java 2 Laufzeit-Umgebung, kurz J2RE1.3)
 - Die Installation ist nur für versierte Benutzer zu empfehlen und sollte in der Regel vom Systemadministrator vorgenommen werden. Zur Installation siehe Punkt 1.1.2.

Bemerkung: Da es sich bei Java um eine interpretierte Programmiersprache handelt ist zum Betrieb von EATOS immer zwingend eine sogenannte Java-Virtual-Machine notwendig. Eine kostenlose Version einer solchen Virtual-Machine kann von <http://java.sun.com/j2se/1.3/> bezogen werden und heißt „Java Runtime Environment“.

1.1.2 Installation der Software

EATOS:

- **Zielverzeichnis erstellen:** Mit Hilfe des Explorers erstellen sie das Verzeichnis, in dem die Software abgespeichert wird. Empfohlen wird „C:\Programme\Eatos“
- **Extraktion der Programmdateien:** Extrahieren sie das Archiv Eatos.zip in ihrem Zielverzeichnis
- **Ausführung von EATOS:** Durch ein Doppelklick auf Eatos.jar oder der im nächsten Schritt anzulegenden Verknüpfung wird das Programm gestartet, sofern das J2RE1.3 korrekt installiert ist.
- **Anlegen einer Verknüpfung (optional):** Öffnen Sie den Explorer, wechseln Sie ins Eatos-Programmverzeichnis, rechte Maustaste auf Eatos.jar gedrückt halten, ca. 1cm nach rechts ziehen, loslassen und im auftauchenden Fensterchen

„Verknüpfung(en) hier erstellen“ anwählen. Der Verknüpfung können Sie optional das Eatos-Symbol (Eatos.ico) zuweisen (rechter Mausklick auf Verknüpfung => Eigenschaften => anderes Symbol)

J2RE1.3:

- **Download von Java 2 Runtime Environment Standard Edition 1.3 (J2RE1.3):** Der Download der etwa 5MB großen Datei erfolgt für Windows unter <http://java.sun.com/j2se/1.3/jre/download-windows.html> und generell unter <http://java.sun.com/j2se/1.3/>. Im letzteren Fall muß zunächst die gewünschte Plattform gewählt werden, die der Benutzer verwenden möchte (Windows, Linux, Solaris), anschließend muß zwischen den Versionen „US-English“ bzw. „International“ entschieden werden. Die aufgeführten Bedingungen werden über ACCEPT akzeptiert und üblicherweise durch „HTTP download“ übertragen. Bitte merken Sie sich den Ort, an dem Sie diese Datei abspeichern.
- **Installation von J2RE1.3:** Die Installation erfolgt durch Doppelklick auf die just heruntergeladene „j2re-1_3_1-win.exe“. Das Programm wird üblicherweise unter dem voreingestellten Installationspfad installiert.

Fehlersuche:

Bei auftretenden Fehlern probieren Sie bitte die folgenden Schritte. Im Zweifelsfalle fragen Sie ihren Systemadministrator.

1. Starten Sie die MS-DOS-Eingabeaufforderung (Windows 95/98) bzw. unter NT und Windows 2000 den Command-Prompt.
2. Tippen Sie „java –version“ ein. Folgende Zeilen sollten erscheinen:

```
java version "1.3.1"
```

```
Java(TM) 2 Runtime Environment, Standard Edition (build 1.3.1-C)
```

```
Java HotSpot(TM) Client VM (build 1.3.1-C, mixed mode)
```

Ist dies nicht der Fall, ist das J2RE nicht richtig installiert!

3. Falls das J2RE korrekt installiert ist, wechseln sie beispielsweise mit „cd c:\programme\eatos“ ins EATOS-Verzeichnis. Dort führen Sie bitte „java –jar Eatos.jar“ aus. Nach einigen Sekunden sollte die Meldung "This is Eatos v1.00 ... " erscheinen. Ist dies nicht der Fall, konnte das Programm nicht gestartet werden. Bitte beachten Sie mögliche Fehlermeldungen um die Problemursache

zu beheben. In der Regel sollte der Fehler nicht bei EATOS zu suchen sein. Vergewissern Sie sich, daß Sie eine korrekte Version des J2RE benutzen (1.3 bzw. 1.3.1)

4. Haben Sie das Programm wie unter 3. beschrieben gestartet, werden bei eventuell auftretenden Programm-Fehlern textuelle Ausgaben erzeugt. Ist dies der Fall, handelt es sich in der Regel um tatsächliche, nicht vorhergesehene Fehler des Programms. Bitte setzen sie sich mit Marco Eissen in Verbindung, damit diese eliminiert werden können.

Ausnahme: Unter Windows NT (4.0) kann EATOS scheinbar nicht durch Benutzer der Hauptbenutzergruppe, sondern nur durch den Systemadministrator selbst (also mit vollen Zugriffsrechten) gestartet werden. Die Ursache dieses Problems liegt - nach unseren Erkenntnissen - nicht bei EATOS, sondern beim J2RE und ist durch den Systemadministrator durch Veränderung von Zugriffsrechten zu lösen.

1.2 Kurzanleitung für EATOS

Nach Installation von EATOS wird das Programm durch ein Doppelklick auf das Symbol gestartet. Über das sich öffnende Fenster wird über *Neu* ein Projekt erstellt, das mit *Öffnen* aufgerufen werden kann.

In dieses Projekt werden alle Synthesen eingetragen, die untersucht werden sollen. Dazu wird nach Betätigen der Schaltfläche *Neu* jeweils die stöchiometrische Gleichung eingegeben. Die auf diese Weise eingegebenen Synthesen werden mit *Öffnen* aufgerufen. Die Mengen der Substanzen, die Ausbeute und, falls substanzspezifische qualitative Merkmale in die Untersuchung einbezogen werden sollen, Toxizitätsdaten usw. werden über *Wichtung* eingetragen.

Substanzen können über *Exportieren* mit allen Substanzdaten in die Substanzliste exportiert werden und stehen für andere Untersuchungen zur Verfügung. Über *Importieren* werden Substanzen aus der Substanzliste aufgerufen und in die geöffnete Anwendung einbezogen.

Statt Substanzen können im Registerblatt Edukte und Katalysatoren auch Produkte aus anderen Synthesen des selben Projektes importiert werden. Auf diese Weise werden Synthesesequenzen erstellt.

Die graphische Wiedergabe der Ergebnisse erfolgt über *Bearbeiten*, *Berechnen*, falls von einer geöffneten Synthese ausgegangen wird und über *Vergleichen*, wenn im Projektfenster eine oder mehrere Synthesen angewählt wurden. Synthesen bzw. Synthesesequenzen können auf diese Weise miteinander verglichen werden.

Das graphische Säulendiagramm gibt den Input (S^{-1}) und Output - 1 (E) bezogen auf eine Produkteinheit an, sowie die Umweltindizes EI_in und EI_out, die eine Wichtung der Substanzen des Inputs und Outputs mit ihren substanzspezifischen Eigenschaften nach einer in dieser Bedienungsanleitung beschriebenen Methode wiedergeben. Der Datensatz, der den Säulensegmenten zugrunde liegt, wird durch Anklicken ausgegeben.

Über die Kommandozeile sind vielfältige Darstellungen des Ergebnisses einstellbar. Die Graphik kann über *Diagramm Exportieren* exportiert werden, um sie in andere Softwareprogramme als Objekt einzufügen.

1.3 Starten von EATOS

1.3.1 Starten

Das Programm EATOS wird durch Doppelklicken des Icons oder durch Aufrufen im entsprechenden Dateienverzeichnis (Windows: Explorer) gestartet. Mit folgendem Fenster beginnt das Programm (Abbildung 1, links). Nach *wechseln zu:* ist das Verzeichnis angegeben, in dem sich das Programm EATOS befindet. Der Name des aktuellen Datenverzeichnisses lautet ebenfalls Eatos , wenn das Programm in einem so benannten Verzeichnis gespeichert wurde. Ein Wechsel in ein anderes Verzeichnis ist durch Anklicken dieser Schaltfläche oder des Symbols  daneben möglich, das zu der nächst höheren Hierarchieebene führt. Zurück in das Installationsverzeichnis gelangt man mit dem Symbol . Neue Ordner werden mit dem Symbol  angelegt.

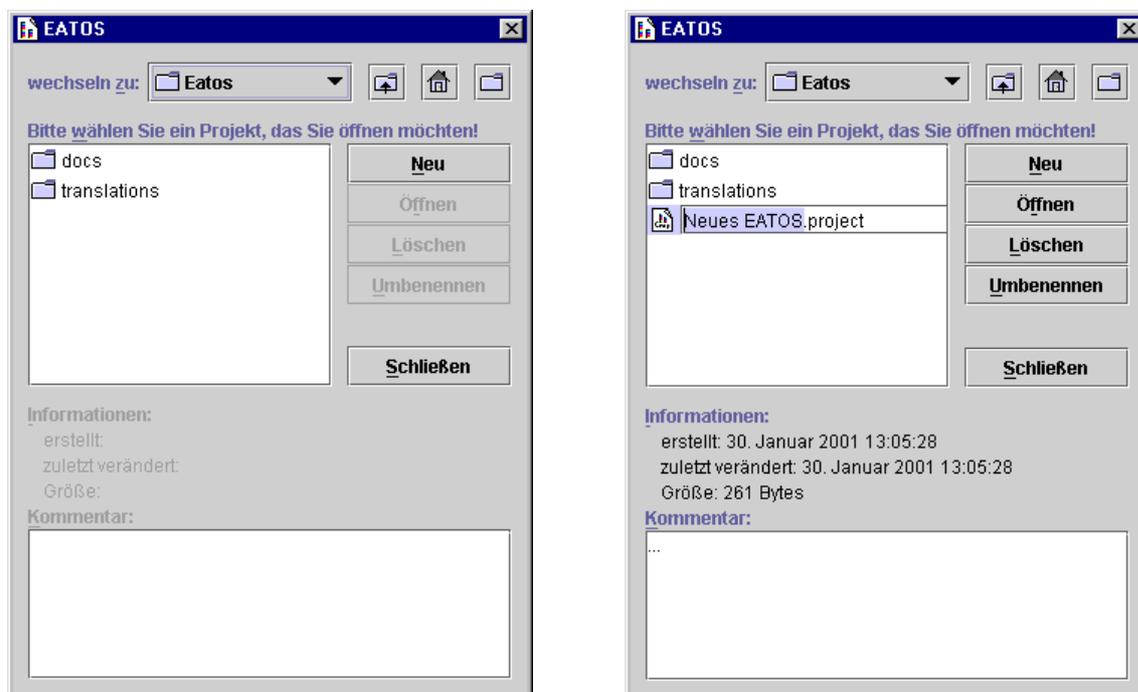


Abbildung 1 EATOS Startfenster und Startfenster mit neuem EATOS-Projekt

1.3.2 Neues EATOS Projekt

Durch Anklicken der Schaltfläche *Neu* kann ein neues sogenanntes Projekt erstellt werden, in dem später alle für eine Untersuchung relevanten Synthesen zusammengestellt sind (Abbildung 1, rechts). Nach Anwählen von *Neues EATOS.project* erscheinen unter *Informationen* das Erstell-Datum, das Datum mit der letzten Änderung und die Dateigröße. Im Kommentarfeld können Bemerkungen zu dieser Datei angeführt werden.

Dieses *Neues EATOS.project* kann über die Schaltfläche *Umbenennen* einen anderen Namen erhalten, der mit der Eingabetaste bestätigt werden muß. Die Dateibezeichnung *.project* muß allerdings auf jeden Fall beibehalten werden. Es bietet sich an, als Namen das Zielprodukt der Synthese(sequenz) zu wählen, um darin das Thema des Projektes widerzuspiegeln. Für diese Bedienungsanleitung wurde das Beispiel der Synthese von *p*-Methoxyacetophenon gewählt und *Neues EATOS.project* entsprechend in *Methoxyacetophenon; p-project* umbenannt.

1.3.3 Projekt löschen

Mit der Schaltfläche *Löschen* kann die Datei sofort wieder entfernt werden.

1.4 Eingabe von Synthesedaten

1.4.1 Neue Synthese (Teil I)

Um dieses neu erstellte Projekt *Methoxyacetophenon; p-project* mit Synthesen zu füllen, wird es angewählt und die Schaltfläche *Öffnen* betätigt (Abbildung 1). In dem neuen Fenster kann mit der Schaltfläche *Neu* eine Synthese eingegeben werden (siehe Abbildung 2). Die Synthese wird analog zum Projekt sinnvollerweise nach dem Produkt benannt, das hergestellt wird. Im fortgeführten Beispiel ist das p-Methoxyacetophenon und unterscheidet sich damit nicht von dem Projektnamen. Lediglich durch den Zusatz 'Organikum', der auf die Daten-Quelle - nämlich das Praktikumsbuch *Organikum* (20. Auflage, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1996, ISBN 3-335-00492-2) - hinweist, ergibt sich ein etwas abweichender Name. Im Bereich *Literatur/Laborjournal* wird die Quellenangabe, die der Synthese zugrunde liegt und deren Eingabe - siehe hierzu Kap. 1.6 (S. 52) - später erfolgt, oder die Versuchsbeschreibung aus dem Laborjournal auftauchen.

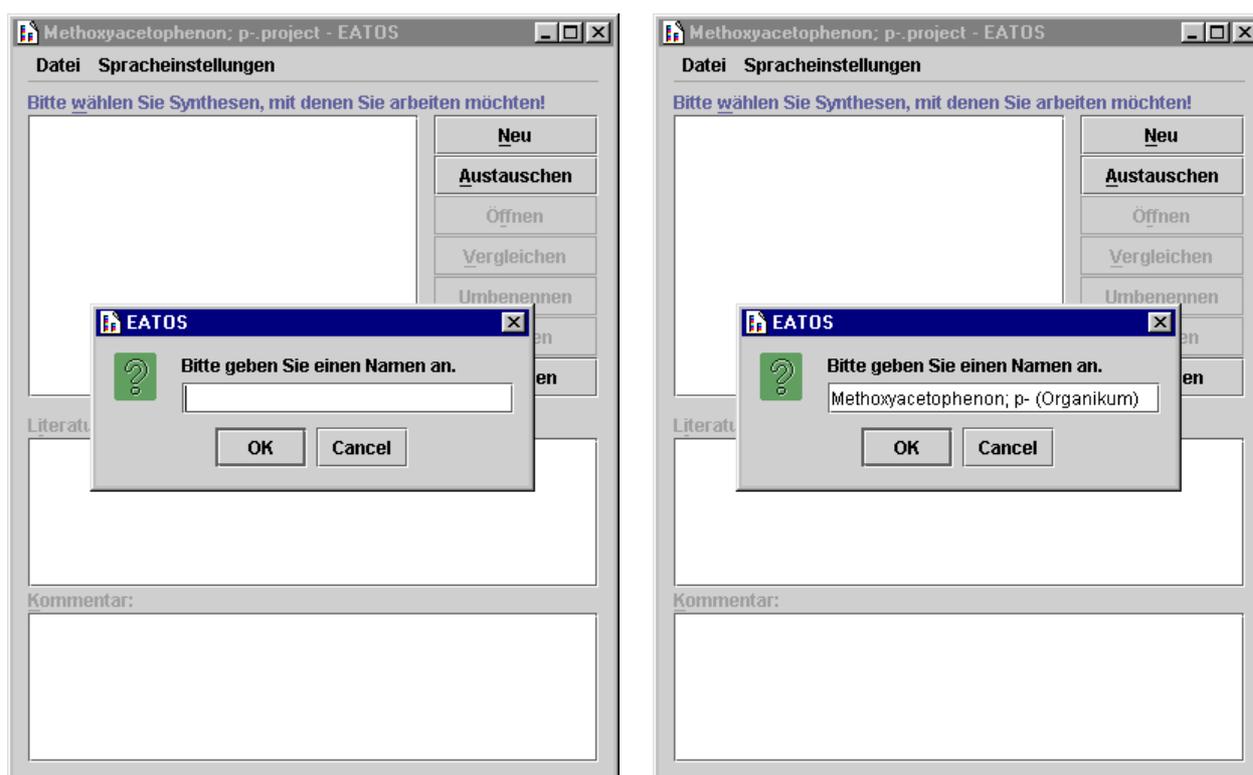
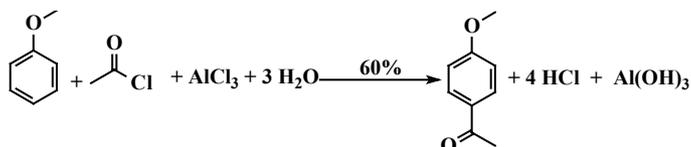


Abbildung 2 Neue Synthese erstellen und benennen

1.4.2 Stöchiometrische Reaktionsgleichung

Nach Bestätigen des Namens der Synthese mit *Ok* muß zur Gewährleistung einer korrekten Berechnung der Materialflüsse im folgendem Fenster zunächst die stöchiometrische Gleichung eingegeben werden (Abbildung 3 a).

Bei der betrachteten Synthese von *p*-Methoxyacetophenon gemäß der in Kap. 1.4.1 (S. 12) angegebenen Literatur liegt folgende Stöchiometrie zugrunde.



Formelschema 1 Stöchiometrie der Synthese von *p*-Methoxyacetophenon

In den Registerblättern *Edukte*, *Produkt* und *Koppelprodukte* werden die beteiligten Substanzen mit den zugehörigen stöchiometrischen Koeffizienten aus Formelschema 1 und deren Summenformeln eingegeben (Abbildung 3 b-d). Durch Betätigen der Schaltflächen *mehr* und *weniger* kann die Anzahl der Edukte und der Koppelprodukte variiert werden. Liegen in der internen *Substanzliste* (siehe Kap. 1.7, S. 52) bereits die Daten zu einzelnen Verbindungen vor, so können diese durch Betätigen der Schalttaste *importieren* (siehe Kap. 1.8, S. 54) hier eingebunden werden, so daß Substanzname, Summenformel und Stoffparameter bereits vorliegen und nicht erneut eingegeben werden müssen. Näheres zum Thema Substanzliste und Importieren ist in diesen Kapiteln erläutert.

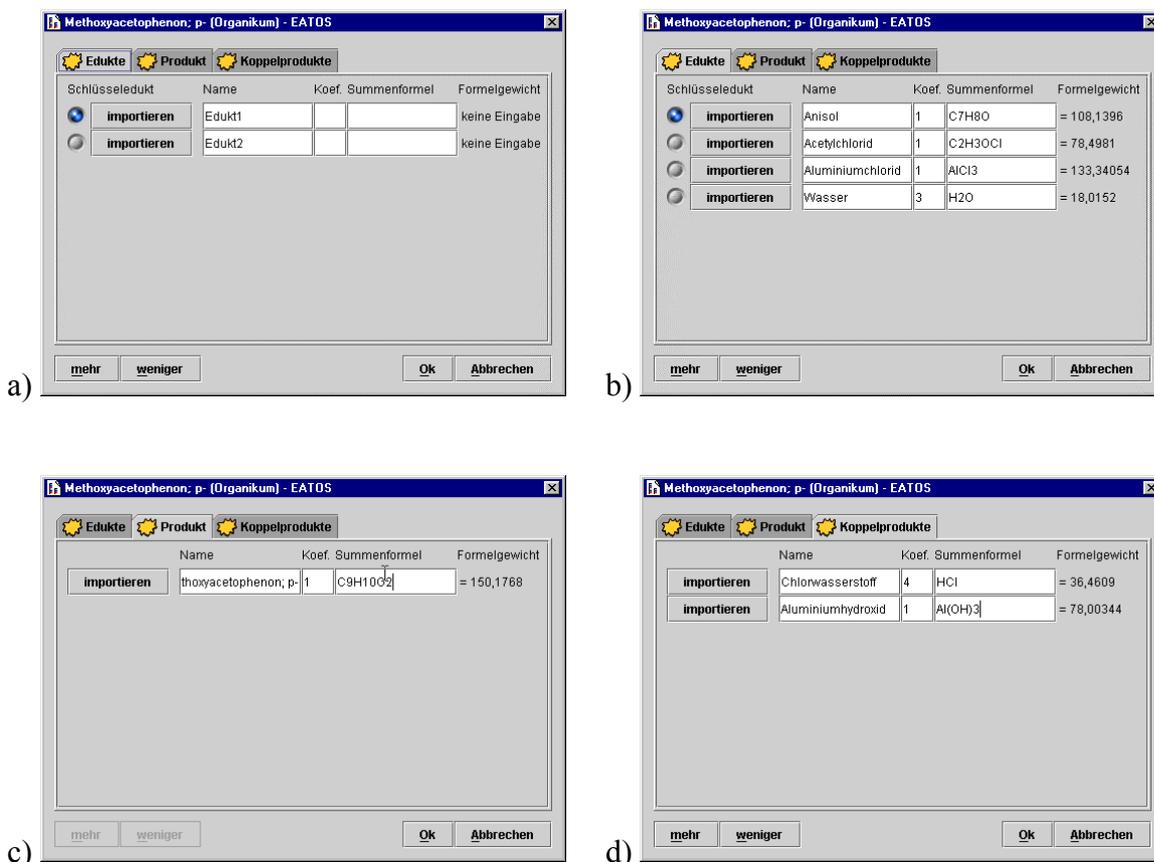


Abbildung 3 Eingabe der stöchiometrischen Gleichung einer Synthese

Das Edukt, auf das sich die Ausbeute und auch eine möglicherweise ermittelte Umsetzung beziehen, - das sogenannte Schlüsseledukt - wird mit einem blauen Punkt (Anklicken links des Feldes *importieren*) gekennzeichnet. Durch Bestätigen mit *Ok* nach vollständiger Eingabe von Edukten, Produkt und Koppelprodukten wird intern die Richtigkeit der stöchiometrischen Reaktionsgleichung überprüft und diese unveränderlich für den Synthesenamen festgelegt. Sollte nachträglich eine Modifikation der stöchiometrischen Gleichung oder der Festlegung des Schlüsseledukts erforderlich sein, so muß über *Neu* (Abbildung 2, S. 12) eine gänzlich neue Synthese inklusive sämtlicher Daten eingegeben werden! Deshalb muß unbedingt bereits bei der Eingabe der Stöchiometrie der Reaktionsgleichung auf die richtige Zuordnung des Schlüsseledukts geachtet werden.

1.4.3 Neue Synthese (Teil II)

Die Bestätigung der stöchiometrischen Reaktionsgleichung mit *Ok* in Abbildung 3 führt zurück zum Projektfenster, in der die eingegebene Synthese mit Namen auftaucht (Abbildung 4, links).

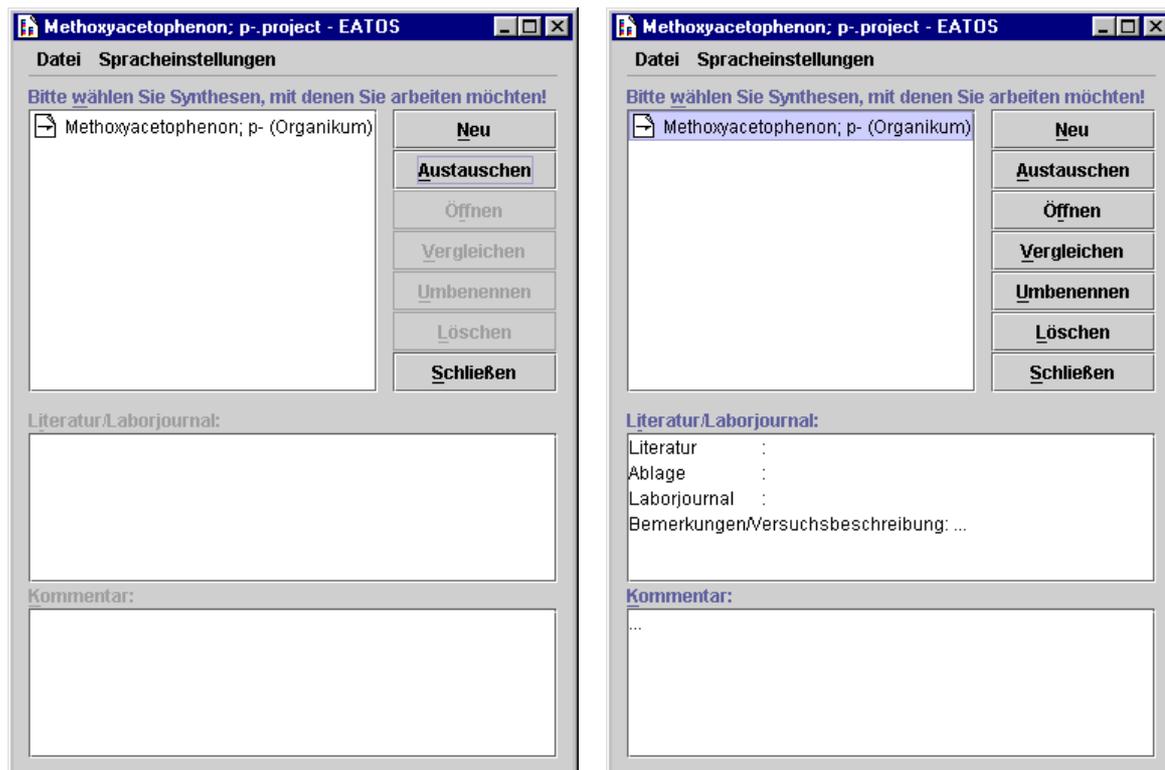


Abbildung 4 Neue Synthese bearbeiten

Weitere Synthesen, z.B. des selben Produkts durch andere Vorgehensweisen, können analog mit *Neu* hinzugefügt werden oder durch *Austauschen* entsprechender Synthesen, die bereits in anderen Projekten eingegeben worden sind. Zum Thema *Austauschen* jedoch mehr in Kap. 1.4.4, S. 31. Durch *Schließen* kehrt man zum Startfenster zurück.

In der Regel wird die eingegebene Synthese jedoch unmittelbar folgend bearbeitet, um Synthesedaten und Substanzeigenschaften eingeben und untersuchen zu können. Durch Anwählen der Synthese können die bisher grau unterlegten Schaltflächen betätigt werden (Abbildung 4, rechts) und die Synthese wie gewohnt umbenannt oder gelöscht werden. Mit der Schaltfläche *Vergleichen* können mehrere Synthesen miteinander verglichen werden, worüber Kap. 1.9 (S. 59) näher informiert. Durch Betätigen der Schaltfläche *Öffnen* erscheint ein neues Fenster, in dem sämtliche weitere Daten zur Synthese und zu den Substanzeigenschaften eingegeben werden (Abbildung 5).

1.4.3.1 Kommandozeile zur Bearbeitung der Synthese

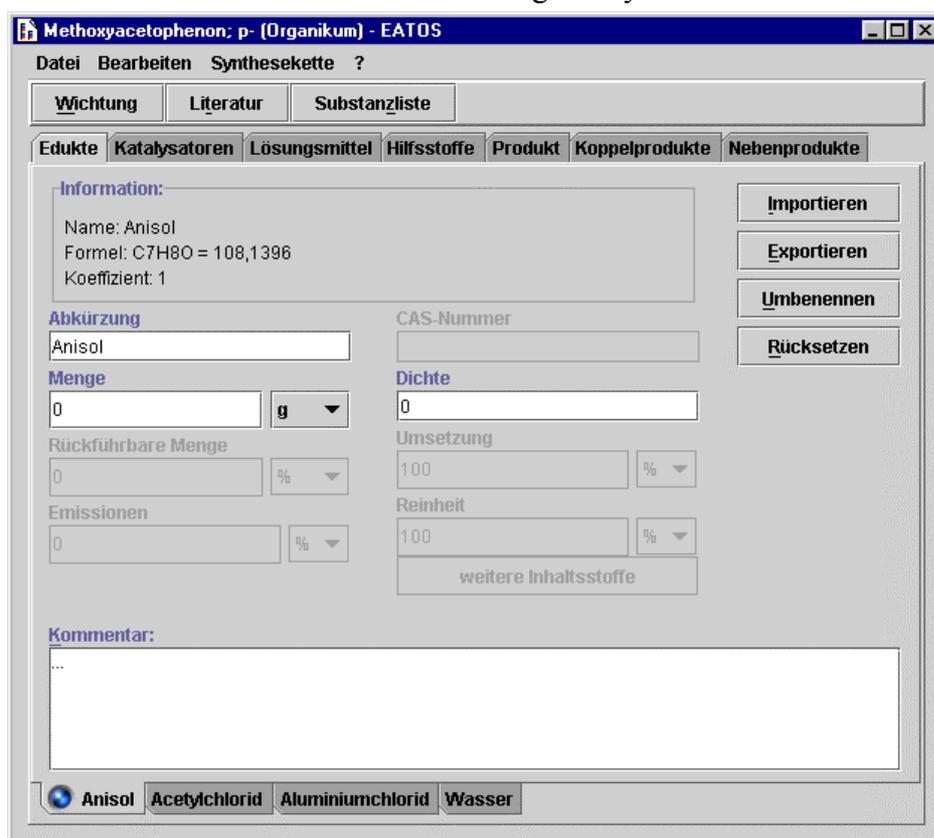


Abbildung 5 Bearbeiten der Synthese und der Substanzeigenschaften

Die Kommandozeile besteht aus *Datei*, *Bearbeiten*, *Synthesekette* und *?*.

Unter *Datei* kann das Projekt gespeichert werden oder ebenso wie die Synthese gewechselt oder das Programm beendet werden.

Bearbeiten ermöglicht es, nach Eingabe aller Daten ein graphisches Schaubild zu der Synthese *berechnen* und visualisieren zu lassen, das u.a. Auskunft über Materialinput- und -output vermittelt. Diese Funktion entspricht dem *Vergleichen* aus Abbildung 4 (S. 15) mit dem Unterschied, daß nur die derzeit geöffnete Synthese angezeigt wird. Weitere Funktionen unter *Bearbeiten* sind *Wichtung* (siehe Kap. 1.5, S. 33), *Literatur* (siehe Kap. 1.6, S. 52), *Substanzliste* (siehe Kap. 1.7, S. 52) und *Modus*. Der Modus des Fensters in Abbildung 5 kann von *einfach* auf *erweitert* umgestellt werden. Dadurch werden die grau unterlegten Bereiche für weitere Angaben verfügbar. Der einfache Modus ist für die volle Funktionalität von EATOS jedoch völlig ausreichend! Es genügt sogar, lediglich die Substanzmengen in [g] aller Einsatzstoffe (Edukte, Katalysatoren, Lösungsmittel und Hilfsstoffe) und die Ausbeute in [%] einzugeben. Volumenangaben hingegen erzwingen stets die Angabe der Dichte. Für eine übersichtlichere Wiedergabe der Substanznamen in den Detailansichten der graphischen Darstellung der Ergebnisse (Kap. 1.9, S. 59) besteht die Möglichkeit, eine Abkürzung anzugeben - z.B. DMSO statt Dimethylsulfoxid. Durch Einstellung des Modus auf *erweitert*, können weitere Kenntnisse über die Synthese in die Untersuchung eingebracht werden. So können

rückführbare Mengen und aus einem Verfahren bekannte *Emissionen* als Information einfließen, sowie Angaben zum Reinheitsgrad der Einsatzstoffe gemacht werden. Mit der *Reinheit*, die sich sowohl auf eine tatsächliche, nicht näher bekannte Verunreinigung als auch auf weitere Substanzen in einem Stoffgemisch beziehen kann, können *weitere Inhaltsstoffe* spezifiziert werden (siehe Kap. 1.4.3.11, S. 29). Für Katalysatoren (Kap. 1.4.3.5, S. 19), Produkt (Kap. 1.4.3.8, S. 26), Koppel- (Kap. 1.4.3.9, S. 27) und Nebenprodukte (Kap. 1.4.3.10, S. 28) bestehen durch den erweiterten Modus spezielle Eingabeoptionen.

Über *Synthesekette* können Datenänderungen eines angewählten Stoffes einer Synthese in einer Synthesesequenz (vgl. auch Kap. 1.8.3, S. 56), der durch ein importiertes Produkt (vgl. auch Kap. 1.8.2, S. 55) einer anderen Synthese des geöffneten Projektes charakterisiert wurde, durch *reimportieren* neu übernommen werden, sofern dieser Ursprungsdatensatz noch existiert. *Rekursiv* importieren bedeutet, daß die Daten aller Stoffe der geöffneten Synthese aktualisiert werden, während *rekursiv, für alle Stoffe* eben eine Aktualisierung für alle Stoffe der gesamten Synthesesequenz nach sich zieht.

Mit ? sind die *Hilfe*, ein schematischer Überblick über die *Massenbilanzbereiche* und Informationen über das Programm *EATOS* abrufbar.

1.4.3.2 Schaltflächenleiste Wichtung, Literatur, Substanzliste

Über *Wichtung* können Stoffparameter wie R-Sätze und toxikologische Daten für die Substanzen der Synthese angegeben werden, mit denen intern Belastungsfaktoren ermittelt werden, die eine Wichtung der Materialbilanz hinsichtlich umweltrelevanter Aspekte für eine Abschätzung des Gefahrenpotentials der Synthese ermöglichen. Eine Beschreibung der *Wichtung* wird in Kapitel 1.5 (S. 33) vorgenommen. Ebenso sei auf die Kapitel 0 (S. 52) und Kapitel 1.7 (S. 52) für ausführliche Erläuterungen zur Eingabe der Literatur und zum Bearbeiten der Substanzliste verwiesen.

1.4.3.3 Kommentarfeld

Das Kommentarfeld auf einem Registerblatt des Fensters in Abbildung 5 (S. 16) dient dazu, Anmerkungen zu der jeweiligen Substanz im Zusammenhang mit der aktuell geöffneten Synthese vorzunehmen.

1.4.3.4 Edukte

Die erste Ansicht nach *Öffnen* einer (neuen) Synthese gemäß Abbildung 4 (S. 15) ist das Registerblatt *Edukte* (Abbildung 5, S. 16). Am unteren Ende ist dieses Registerblatt differenziert in die zuvor eingegebenen Edukte, die jeweils aufrufbar sind. Das mit einem blauen Punkt gekennzeichnete Edukt ist das Schlüsseledukt, auf das sich Ausbeute und ggf. Umsetzung beziehen. Sollte eine falsche Festlegung des Schlüsseledukts bei der Eingabe der stöchiometrischen Gleichung (siehe Abbildung 3, S. 14) erfolgt sein (→ überprüfen!), ist dies für die geöffnete Synthese nicht korrigierbar und die Synthese muß statt dessen nochmals eingegeben werden!

Im einfachen Modus kann zunächst - falls sinnvoll - eine Abkürzung festgelegt werden, die möglicherweise später in den Detailansichten eine übersichtlichere Orientierung erlaubt. Die Mengenangabe kann in verschiedenen Einheiten vorgenommen werden und muß ein Wert größer Null sein. Über das Symbol  können statt [g] auch [mol] oder [ml] gewählt werden. Im letzten Fall wird allerdings die Angabe der Dichte notwendig. Für das Beispiel der Synthese von p-Methoxyacetophenon werden gemäß Literatur 1 mol Anisol, 1.05 mol Acetylchlorid und 1.2 mol AlCl₃ eingetragen. Mit 500 g Eis erfolgt die notwendige Zerlegung des Keto-Aluminiumkomplexes, von denen 3 mol den Edukten und der Rest den *Hilfsstoffen* (Kap. 1.4.3.7, S. 24) zugeordnet werden.

Die Schaltfläche *Importieren* ermöglicht es, das betrachtete Edukt durch einen bereits in der Substanzliste gespeicherten Stoff mit möglicherweise umfangreichem Datensatz mit Ausnahme des Kommentarfeldes zu überschreiben, dessen Einträge dabei erhalten bleiben. Damit nicht in der gesamten Substanzliste nach dem Edukt gesucht werden muß, werden nur Substanzen mit dem gleichen Molekulargewicht angezeigt. Darüber hinaus stellt diese Schaltfläche die zentrale Schnittstelle dar, über die unter Ausbildung einer Synthesesequenz Synthesen miteinander verknüpft werden können! Zu diesem Zweck wird eine andere Synthese im selben Projekt ausgewählt, deren Produkt, nun als Zwischenprodukt betrachtet, als Edukt in die geöffnete Synthese eingeht. Ein bereits im Projekt in Form einer Synthese eingegebenes Produkt kann aber auch bereits beim Erstellen einer Folgesynthese, die dieses Produkt als Substrat verwendet, bei der Eingabe seiner stöchiometrischen Gleichung importiert werden (siehe Abbildung 3, S. 14). Weitere Informationen zum Thema Importieren vermittelt das Kapitel 1.8.2 (S. 55).

Mit der Schaltfläche *Exportieren* können Substanzen in die Substanzliste exportiert werden, damit sie für andere Anwendungen mit ihrem gesamten Datensatz zur Verfügung stehen.

Mit der Schaltfläche *Umbenennen* wird einer Substanz ein anderer Name zugewiesen und mit *Rücksetzen* die zuvor eingegebenen Daten des Registerblattes gelöscht.

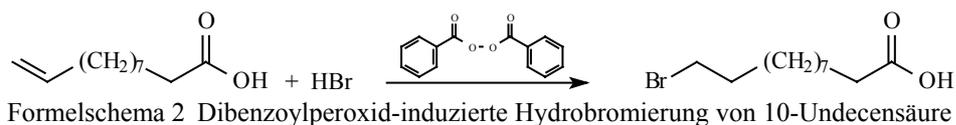
Im erweiterten Modus (Abbildung 6) können weitere Informationen über die Edukte eingebracht werden. Werden Edukte im Überschuß eingesetzt und bei der Aufarbeitung oder durch die Reaktionsführung wiedergewonnen, so kann die *Rückführbare Menge* angegeben werden. Für den Fall, daß Informationen bezüglich der bei einem Verfahren emittierten Stoffe vorliegen, können diese unter *Emissionen* eingetragen werden. Der vollständigen Charakterisierung halber besteht die Möglichkeit die *CAS-Nummer* der Substanz anzugeben, die jedoch ohne weitere programminterne Auswirkung ist. Hinsichtlich des Schlüsseledukts kann, sofern durch gaschromatographische Untersuchung bekannt, der Grad der Umsetzung eingegeben werden. Diese Angabe wird intern automatisch auch den anderen Edukten zugeordnet, woraus zusammen mit den überstöchiometrisch eingesetzten Edukten die Menge der nicht umgesetzten Edukte bestimmt wird. Generell ist zu empfehlen, daß präparative Umsetzungen gaschromatographisch verfolgt werden, um über den Verlauf der Synthese beurteilen zu können.

Darüber hinaus kann die Reinheit der eingesetzten Edukte berücksichtigt werden, mit der nicht nur die meist wenige Prozentpunkte ausmachende und nicht näher bekannte Verunreinigung gemeint ist, sondern außerdem weitere Inhaltsstoffe, die bei Stoffgemischen detailliert angegeben werden können. Weitere Informationen zu der Eingabe *weiterer Inhaltsstoffe* sind in Kapitel 1.4.3.11 (S. 29) beschrieben.

Abbildung 6 Erweiterter Modus am Beispiel der Eingabe der Edukte

1.4.3.5 Katalysatoren

Unter dem Begriff *Katalysatoren* werden in diesem Programm nicht nur echte Katalysatoren verstanden. Dieses Registerblatt ist außerdem auch für Initiatoren und Promotoren vorgesehen, die zwar in der Regel substöchiometrisch eingesetzt werden, aber z.T. verändert aus der Synthese hervorgehen. In dem gewählten Beispiel der Synthese von p-Methoxyacetophenon werden - AlCl_3 wird als Substrat betrachtet - keine Katalysatoren eingesetzt, so daß das Registerblatt *Katalysatoren* anhand eines anderen Beispiels, der Dibenzoylperoxid induzierten Hydrobromierung von 10-Undecensäure, erläutert wird (A. Vogel, 'Textbook of Practical Organic Chemistry', Longman London & New York **1978**, ISBN 0-582-44250-8). Bei dieser radikalischen Additionsreaktion unter Bildung von 11-Bromundecensäure bewirkt Dibenzoylperoxid den Kettenstart und wird dabei selbst zu Benzol und Kohlendioxid umgesetzt (Formelschema 2, S. 20).



Katalysatoren werden im entsprechenden Registerblatt eingetragen, indem zunächst der Name eingegeben wird (Abbildung 7).

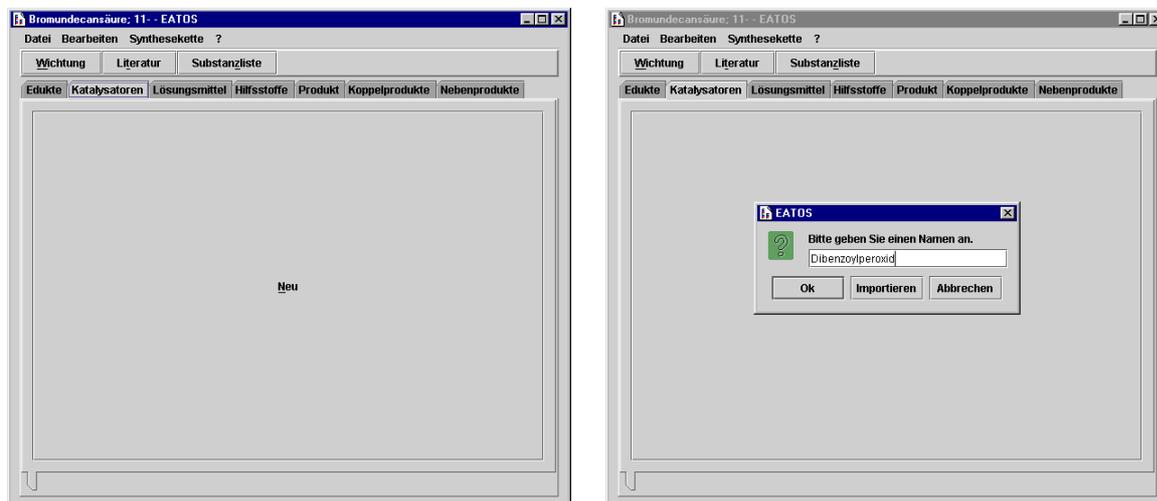


Abbildung 7 Eingabe eines Katalysators

Anschließend werden analog zu den Edukten die weiteren Angaben - auch in der Einheit [mol %] - vorgenommen. Abbildung 8 zeigt bereits den erweiterten Modus.

Abbildung 8 Registerblatt für Katalysatoren im erweiterten Modus

Zusätzlich zu den in Kapitel 1.4.3.4 (S. 17) (*Edukte*) beschriebenen Eingabemöglichkeiten können Folgeprodukte berücksichtigt werden, die sich aus dem Katalysator bilden. Die Nebenprodukte, die sich aus der Umsetzung von Dibenzoylperoxid ergeben, sind Benzol und CO₂ und können unter *Nebenprodukte (Katalysator) Spezifizieren...* eingegeben werden.

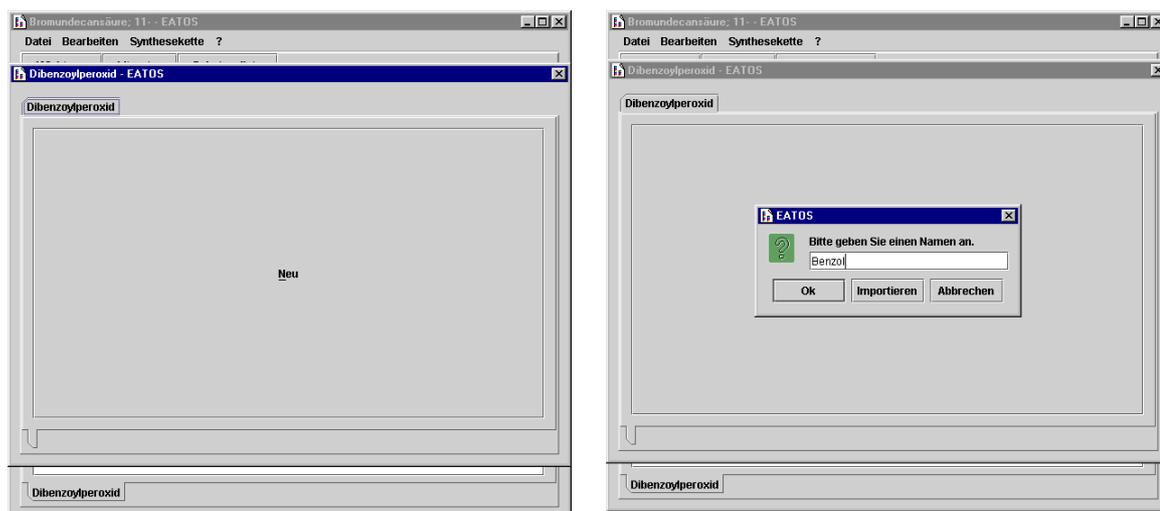


Abbildung 9 Nebenprodukte des Katalysators spezifizieren I

Nach Benennen eines Nebenproduktes (Abbildung 9) werden die gebildete Menge und/oder Emissionen (Abbildung 10, S. 22) eingegeben.

The screenshot shows the EATOS software interface. The main window is titled 'Dibenzoylperoxid - EATOS'. Below the title bar, there is a menu bar with 'Datei', 'Bearbeiten', 'Synthesekette', and '?'. The main content area is divided into several sections:

- Information:** Name: Benzol
- Summenformel:** C₆H₆ = 78,1134
- Abkürzung:** Benzol
- CAS-Nummer:** (empty field)
- Menge:** 64 %
- Dichte:** 0
- Emissionen:** 0 %
- #Nebenprodukt / #Katalysator:** 2/1
- Kommentar:** (empty text area)

On the right side of the form, there are several buttons: 'Neu', 'Importieren', 'Exportieren', 'Umbenennen', 'Löschen', 'Rücksetzen', and 'Schließen'. At the bottom of the form, there is a label 'Benzol' and a tab 'Dibenzoylperoxid'.

Abbildung 10 Eingabe von Nebenprodukten, die aus dem Katalysator resultieren I

Bei dem Zerfall von Dibenzoylperoxid kann angenommen werden, daß sich rund 64 % der Menge zu Benzol umsetzen. Dieser Anteil entspricht in etwa der Masse, der zwei Benzolringe in Dibenzoylperoxid entsprechen. Auf diese Weise kann man die verbleibenden 36 % dem außerdem entstehenden Kohlendioxid zuordnen. Verzichtet man auf die Eingabe von Kohlendioxid, können jedoch auch 100 % mit der Aussage angegeben werden, daß sich sämtliches Dibenzoylperoxid mindestens zu dem Stoff Benzol umsetzt. Die Massendifferenz wird Programm intern der Menge der unbekanntenen Nebenprodukte aus dem Katalysator zugeordnet. Die Eingabe des Aspekts, daß zwei Moleküle Benzol pro Molekül Dibenzoylperoxid entstehen, erfolgt unter *#Nebenprodukt / #Katalysator*, d.h. 2/1. Das Symbol '#' repräsentiert den Begriff 'Anzahl'. Die interne Berechnung mittels der Angabe von *#Nebenprodukt / #Katalysator* greift dabei auf die Molekulargewichte zurück. In diesem Fall müssen deshalb die Summenformeln sowohl des Katalysators als auch des Nebenproduktes eingegeben werden, worauf ansonsten verzichtet werden kann. Anschließend wird entsprechend das andere Nebenprodukt Kohlendioxid über *Neu* mit einer Menge von 36 % (Abbildung 11 und Abbildung 12) eingegeben.

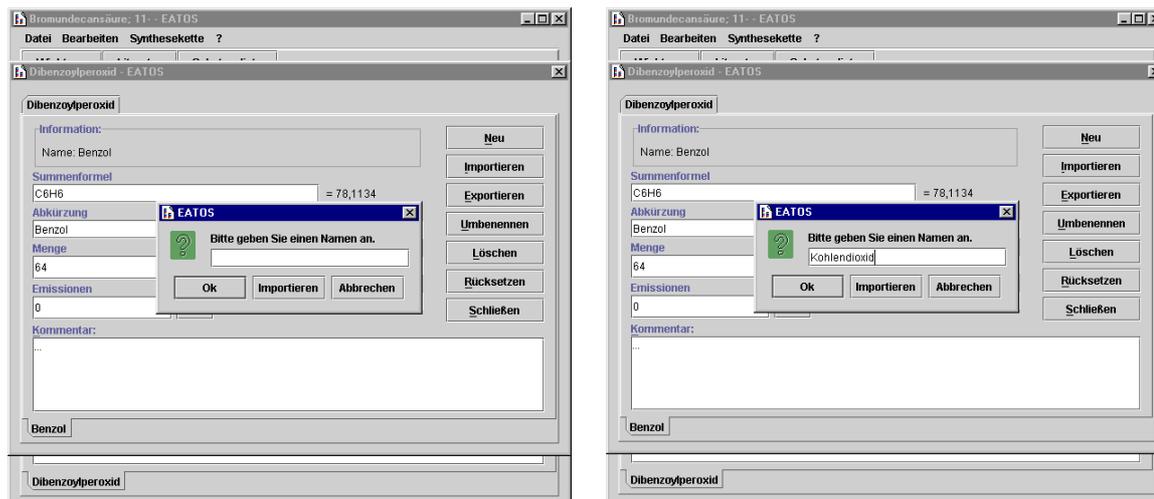


Abbildung 11 Nebenprodukte des Katalysators spezifizieren II

Selbstverständlich setzen sich die wenigsten unter *Katalysator* eingetragenen Einsatzstoffe in andere Substanzen um. Solche im wahren Sinne katalytisch wirkende Stoffe werden unter *Katalysator* eingetragen und keine weiteren Folgeprodukte beschrieben. Als Beispiel seien heterogene Katalysatoren wie Pd/C für Hydrierungen, oder Nafion H oder K 10 für säurekatalysierte Reaktionen, oder homogene Katalysatoren, wie der Grubbs'sche Metathesen-Katalysator, angeführt.

Die Schaltfläche *Importieren* (siehe Kapitel 1.8.2, S. 55) erlaubt sowohl die Einbindung einer bereits in der Substanzliste vorhandenen Substanz als auch eines im Projekt gespeicherten Produktes! Somit können synthetisierte Katalysatoren inklusive der dazu erforderlichen Aufwendungen in die betrachtete Synthese einbezogen werden. Generell ist es jedoch nicht möglich *Rückführbare Mengen* anzugeben, weshalb nur die auf eine Synthese umgerechnete tatsächlich benötigte Menge eingetragen werden sollte.

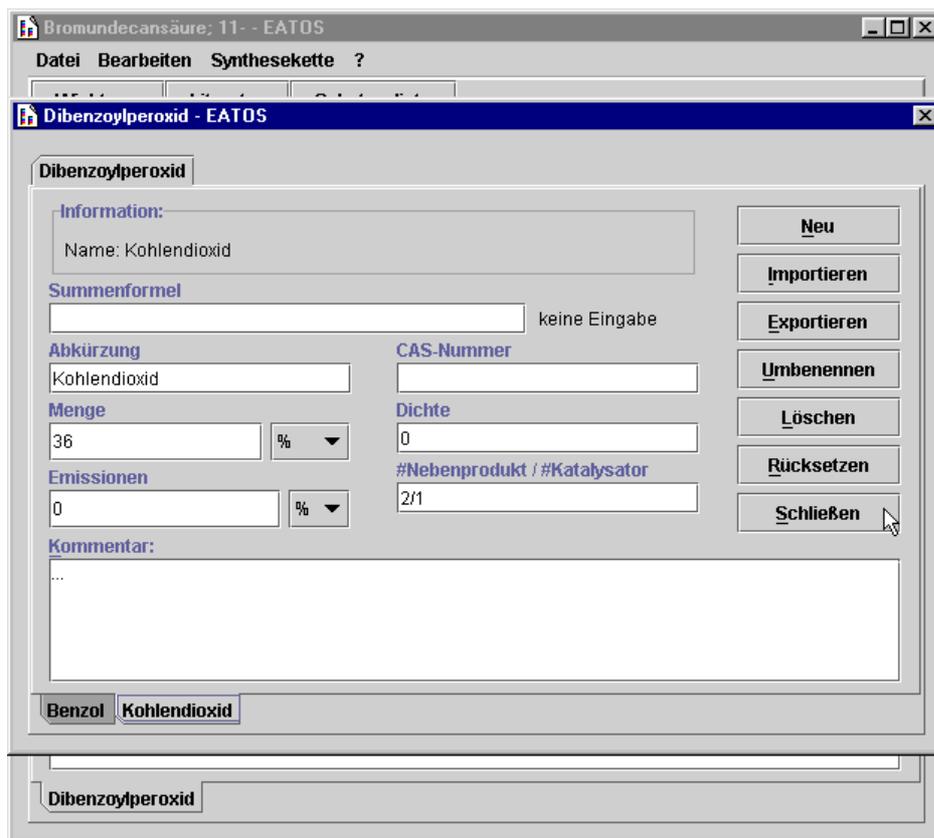


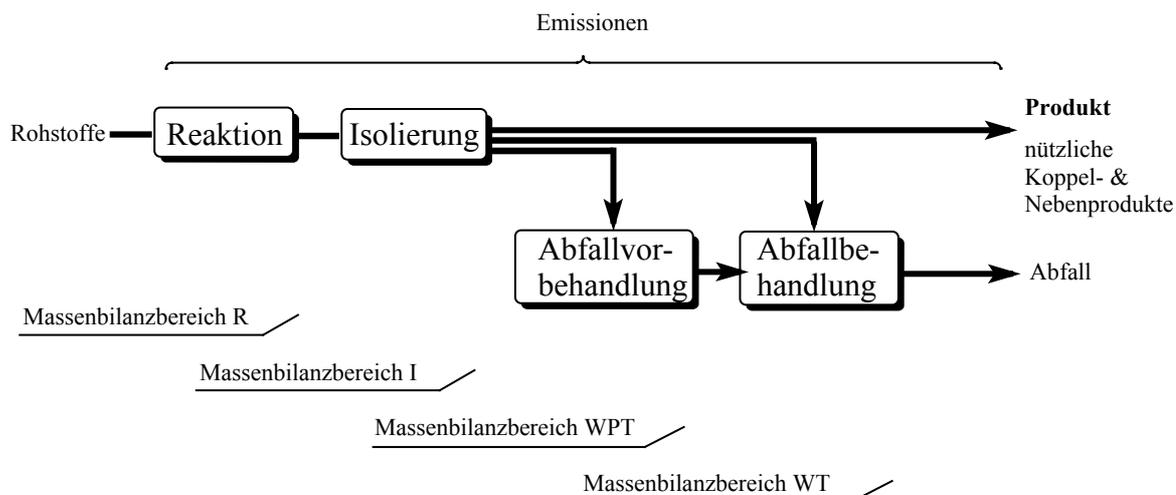
Abbildung 12 Eingabe von Nebenprodukten, die aus dem Katalysator resultieren II

1.4.3.6 Lösungsmittel

Analog wie in Kapitel *Edukte* 1.4.3.4 (S. 17) beschrieben, werden *Lösungsmittel* im entsprechenden Registerblatt eingetragen. Die Menge des bei der Synthese von p-Methoxyacetophenon eingesetzten Lösungsmittels 1,2-Dichlorethan beträgt gemäß Literatur 400 ml.

1.4.3.7 Hilfsstoffe

Unter *Hilfsstoffe* werden alle weiteren Substanzen aufgeführt, die zur Synthese des Produktes aufgewendet werden müssen. Dazu zählen u.a. sowohl im Reaktionsgefäß befindliche Reagenzien, die nicht den Katalysatoren oder Lösungsmitteln zugeschrieben werden, als auch Hilfsstoffe, die zur Isolierung des Produktes benötigt werden, wie z.B. Waschwasser, Extraktionslösungsmittel usw.. Sicherlich ist es freigestellt, beispielsweise sämtliche Lösungsmittel, auch wenn sie während der Aufarbeitung verwendet wurden, im Registerblatt Lösungsmittel einzutragen. Es wird zwischen vier verschiedenen Massenbilanzbereichen unterschieden: *Reaktion*, *Isolierung*, *Abfallvorbehandlung* und *Abfallbehandlung*. Falls Informationen vorhanden, können Stoffe, die zur Vorbehandlung oder Behandlung des Abfallstoffstromes eingesetzt werden, ebenfalls berücksichtigt werden und entsprechend den Massenbilanzbereichen zugeordnet werden. In der Kommandozeile sind unter ? die Massenbilanzbereiche in einer Übersicht dargestellt:



R = Reaction, I = Isolation, WPT = Waste pretreatment, WT = Waste treatment

Abbildung 13 Massenbilanzbereiche Reaktion, Isolierung, Abfallvorbehandlung und Abfallbehandlung

Ansonsten erfolgt auch bei den Hilfsstoffen die Eingabe analog zu den Edukten (Kap. 1.4.3.4, S. 17). In Abbildung 14 ist das Registerblatt *Hilfsstoffe* bereits vollständig ausgefüllt:

Das Screenshot zeigt das Registerblatt 'Hilfsstoffe' für Kaliumcarbonat in der Software EATOS. Die Eingabe ist vollständig ausgefüllt:

- Name: Kaliumcarbonat
- Summenformel: keine Eingabe
- Abkürzung: Kaliumcarbonat
- Menge: 11 g
- Rückführbare Menge: 0 %
- Emissionen: 0 %
- CAS-Nummer: keine Eingabe
- Dichte: 0
- Reinheit: 100 %
- Massenbilanzbereich: Isolierung
- Kommentar: Annahme: 20 g Trockenmittel / Liter zu trocknende Substanz
Es werden mindestens 550 ml 1,2-Dichlorethan getrocknet. Das bedeutet 11 g Trockenmittel.
- weitere Inhaltsstoffe: keine Eingabe

Die Registerkarte zeigt die folgenden Registerblätter: Edukte, Katalysatoren, Lösungsmittel, Hilfsstoffe, Produkt, Koppelprodukte, Nebenprodukte. Die Registerkarte 'Hilfsstoffe' ist aktiviert.

Abbildung 14 Eingabe der Hilfsstoffe

Wenn nicht eigene Synthesen Gegenstand der Untersuchung sind, sondern Literatur beschriebene, stehen oft nicht ausreichende Informationen über die Hilfsstoffe zur Verfügung. Aus diesem Grund wurden für Literaturvorschriften folgende einheitlich geltenden Annahmen getroffen.

- Extraktion: 300 ml Lösungsmittel / Liter wäßriges Medium
- Waschwasser: 300 ml Wasser / Liter Lösungsmittel
- Wasch-Salzlösung: 100 ml Elektrolytlösung / Liter Lösungsmittel
- Trockenmittel: 20 g Trockenmittel / Liter zu trocknende Substanz

Für das Beispiel der Synthese von p-Methoxyacetophenon ergeben sich folgende Annahmen, die sinnvollerweise im jeweiligen Registerblatt unter *Kommentar* notiert werden: 500 g Eis, auf das gegossen wird → 150 ml 1,2-Dichlorethan (Extraktion), also mit den eingesetzten 400 ml 1,2-Dichlorethan folglich insgesamt 550 ml 1,2-Dichlorethan → a) 165 ml Waschwasser; b) 55 ml NaOH-Lösung (2%); c) 11 g Kaliumcarbonat.

1.4.3.8 Produkt

Die bei der Synthese erzielte Menge des Produktes wird in das entsprechende Registerblatt in [g], [ml], [mol] oder [%] (bezogen auf das Schlüsseleddukt) eingetragen, d.h. für das Beispiel der Synthese von p-Methoxyacetophenon 60 %. Die Eingabe in [ml] erfordert die Angabe der Dichte. Möglicherweise haben gaschromatographische Untersuchungen des Rohproduktes eine höhere Ausbeute ausgewiesen, als nach der Isolierung erhalten. Für die Eingabe dieser Information muß unter *Ausbeute (gaschromatographisch)* die Schaltfläche *gaschrom. Ausbeute bekannt* einen Haken erhalten und im Anschluß in der Eingabezeile darunter der Wert eingetragen werden, damit die gaschromatographisch ermittelte Ausbeute eine Bestimmung des Ausbeutenverlustes durch die Aufarbeitung ermöglicht. Die gaschromatographische Ausbeute muß naturgemäß einen größeren Wert als die isolierte Ausbeute annehmen und einen kleineren als die unter *Edukte* eingetragene *Umsetzung* (siehe Kap. 1.4.3.4, S. 17).

Darüber hinaus besteht die Möglichkeit, die Bildung etwaiger unerwünschter Diastereomere oder Enantiomere zu berücksichtigen, indem zunächst unter *Isomerenverhältnis* zwischen *Enantiomerenverhältnis*, bzw. *-überschuß* oder *Diastereomerenverhältnis* gewählt wird. In der Eingabezeile darunter wird der entsprechende Wert eingetragen, z.B. 90:10 für die Angabe eines Isomerenverhältnis und 80 für einen Enantiomerenüberschuß. Das erzeugte Produkt ist stets die Default-Angabe des *Isomerenamens* und muß entsprechend verändert werden, d.h. beispielsweise 'S-' oder 'D-' vorangestellt werden. Die entsprechende Menge wird Programm intern vom Produkt abgezogen und dem Isomer zugeordnet.

Die Funktionalität der übrigen Schaltflächen entspricht der in Kapitel Edukte 1.4.3.4 (S. 17) beschriebenen.

The screenshot shows the 'Methoxyacetophenon; p- (Organikum) - EATOS' window. The 'Produkt' tab is selected. The 'Information' section displays: Name: Methoxyacetophenon; p-, Summenformel: C₉H₁₀O₂ = 150,1768, Koeffizient: 1. The 'Abkürzung' field contains 'Methoxyacetophenon; p-'. The 'CAS-Nummer' field is empty. The 'Ausbeute (isoliert)' field is set to 60%. The 'Ausbeute (gaschromatographisch)' section has a checkbox for 'gaschrom. Ausbeute bekannt' which is unchecked, and a field set to 60%. The 'Emissionen' field is set to 0%. The 'Dichte' field is set to 0. The 'Isomerenverhältnis' dropdown is set to 'Enantiomerenverhältnis', and the 'Isomerenname' field contains 'Methoxyacetophenon; p-'. A 'Kommentar' text area is empty. On the right side, there are buttons for 'Importieren', 'Exportieren', 'Umbenennen', and 'Rücksetzen'. The status bar at the bottom shows 'Methoxyacetophenon; p-'.

Abbildung 15 Eingabe des Produktes

1.4.3.9 Koppelprodukte

Gemäß der stöchiometrischen Gleichung der Synthese zwangsläufig ebenfalls entstehende Koppelprodukte werden unter dem entsprechenden Registerblatt aufgeführt. Hier bedarf es keiner Angaben, da die bei der Synthese entstehenden, von der stöchiometrischen Gleichung und der Ausbeute abhängenden Mengen Programm intern berechnet werden. In manchen Fällen werden Koppelprodukte allerdings neben dem Produkt als Wertprodukte betrachtet. Dies ist beispielsweise der Fall, wenn sie als Einsatzstoffe in anderen Prozessen eingesetzt werden oder bereits im betrachteten Synthesegang als Synton verwendet wurden und nach Rückgewinnung erneut im Kreislaufsystem zur Verfügung stehen. Durch Eingabe der *Nutzbaren Menge* der verwendbaren Koppelprodukte in der entsprechenden Eingabezeile können diese Koppelprodukte gekennzeichnet und die Mengen später bei der graphischen Darstellung angezeigt werden. Dabei bezieht sich die prozentuale Angabe auf die Umsetzung des Schlüsseledukts und darf daher die Ausbeute nicht überschreiten.

Zur Beschreibung der übrigen Schaltflächen siehe Kapitel Edukte 1.4.3.4 (S. 17).

Abbildung 16 Registerblatt Koppelprodukte

1.4.3.10 Nebenprodukte

Die ausbeutenreduzierende Umsetzung von Eduktmaterial zu unerwünschten Nebenprodukten findet statt, wenn außer der durchgeführten Synthese zusätzlich Nebenreaktionen ablaufen, die in Konkurrenz zu ihr stehen oder Folgereaktionen stattfinden. Als Beispiel sei die Friedel-Crafts-Alkylierung erwähnt, bei der es durch weitere Alkylierungen zu einer Minderung der Ausbeute des monoalkylierten Produktes kommen kann. Ein anderes Beispiel, um die bisher verwendete Synthese von *p*-Methoxyacetophenon aufzugreifen, ist die Nebenproduktbildung von *o*-Methoxyacetophenon aus der Acylierung von Anisol an der ortho-Position.

Programm intern wird die durch stöchiometrische Gleichung und Ausbeute festgelegte Menge dieser Nebenprodukte ermittelt, so daß keine Angaben in diesem Registerblatt vorgenommen werden müssen. Sind jedoch einzelne Nebenprodukte und die Mengen ihrer Bildung bekannt, sollten diese angegeben werden, um deren stoffspezifische Eigenschaften in der Beurteilung der Synthese berücksichtigen zu können. Verwertbare Nebenprodukte können unter *Nebenprodukt verwendbar* durch Ankreuzen gekennzeichnet werden, so daß sie als Wertprodukte in den graphischen Darstellungen identifiziert werden können. In Abbildung 17 wurde zur Veranschaulichung ein fiktives Nebenprodukt 1 eingetragen, dessen Menge noch eingegeben werden muß.

Methoxyacetophenon; p- (Organikum) - EATOS

Datei Bearbeiten Synthesekette ?

Wichtung Literatur Substanzliste

Edukte Katalysatoren Lösungsmittel Hilfsstoffe Produkt Koppelprodukte Nebenprodukte

Information:
Name: Nebenprodukt 1

Summenformel
keine Eingabe

Abkürzung Nebenprodukt 1 CAS-Nummer

Menge 0 g Dichte 0

Nebenprodukt verwendbar

Neu
Importieren
Exportieren
Umbenennen
Löschen
Rücksetzen

Kommentar:
...

Nebenprodukt 1

Abbildung 17 Registerblatt Nebenprodukte

1.4.3.11 Weitere Inhaltsstoffe

Zu allen Eingangsstoffen der Synthese kann ein Reinheitsgrad angegeben werden. Mit der *Reinheit*, die sich sowohl auf eine tatsächliche, nicht näher bekannte Verunreinigung als auch auf weitere Substanzen in einem Stoffgemisch beziehen kann, können *weitere Inhaltsstoffe* - in der Beispielsynthese die eines Hilfsstoffs (2%ige NaOH-Lösung) - spezifiziert (Abbildung 18) und deren Zuordnung zu den Kategorien *Verunreinigung*, *wäßriges Medium* oder *Sonstiges* vorgenommen werden (Abbildung 19).

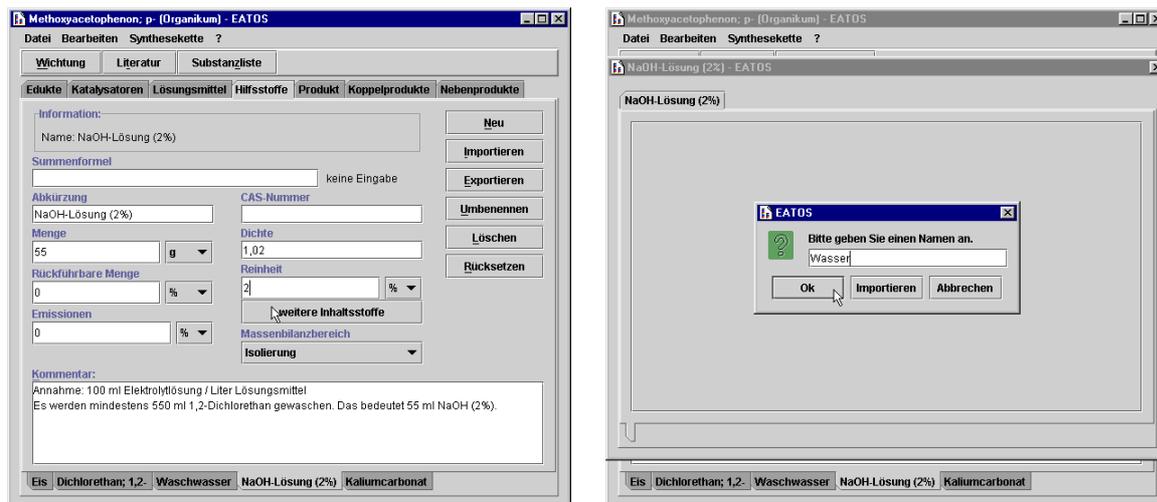


Abbildung 18 Eingabe eines weiteren Inhaltsstoffs zu einer 'verunreinigten' Substanz I

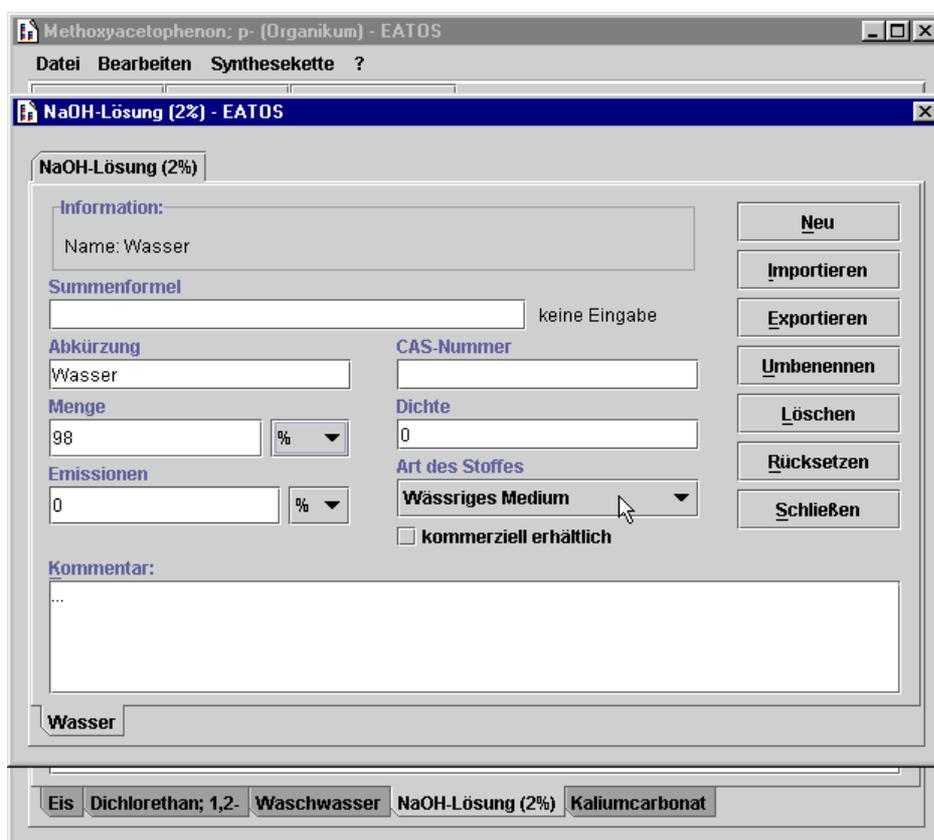


Abbildung 19 Eingabe eines weiteren Inhaltsstoffs zu einer 'verunreinigten' Substanz II

Für diese Zuordnungen existieren in der graphischen Ergebniswiedergabe eigene jeweils anwählbare Kategorien. Unter diesen Kategorien sind genau die Stoffmengen aufgeführt, die als weiterer Inhaltsstoff die entsprechende Zuordnung erhalten haben. Unter ‚(Ab)Wasser‘ beispielsweise tauchen alle Inhaltsstoffe auf, deren Zuordnung unter *Art des Stoffes* zu *wässriges Medium* vorgenommen wurde. Im Umkehrschluß bedeutet dies auch, daß nur diejenigen Stoffe unter der Kategorie ‚(Ab)Wasser‘

auftauchen können, die unter *weitere Inhaltsstoffe* eingegeben wurden. Das *Lösungsmittel* Wasser oder der *Hilfsstoff* Wasser wird demnach nicht unter ‚(Ab)Wasser‘, sondern unter der Kategorie Lösungsmittel bzw. Hilfsstoff geführt. Nur ein *weiterer Inhaltsstoff* kann derart kategorisiert werden. Prinzipiell ist es aber - über einen kleinen Umweg - möglich, als Lösungsmittel oder Hilfsstoff eingesetztes Wasser der Kategorie ‚(Ab)Wasser‘ zuzuschreiben. Hierzu muß beispielsweise das Lösungsmittel Wasser mit einer sehr kleinen *Reinheit*, z.B. 0.001 %, eingetragen werden und unter *weiterer Inhaltsstoff* erneut Wasser mit den restlichen 99.999 % definiert werden.

Durch die Option *weitere Inhaltsstoffe* können beliebige Stoffgemische eingegeben werden. Im folgenden seien zwei Beispiele für die Eingabe von Stoffgemischen aufgeführt:

Eine kommerziell erhältliche 48%-ige essigsäure Bromwasserstofflösung hat eine Reinheit von 48% und den weiteren Inhaltsstoff Essigsäure, die unter *Art des Stoffes* zur Kategorie *Sonstiges* zu zählen ist und in einer Menge von 52% vorliegt.

Eine gesättigte wäßrige Natriumpyrosulfit-Lösung (Löslichkeit von $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_5$ bei 20°C: 54g / 100g Wasser; siehe Handbook of Chemistry and Physics, David R. Lide, 73RD Edition 1992-1993, ISBN 0-8493-0473-3, S. 4-101) besitzt einen Salzanteil von $(54 / 154 =) 35.06$ %, weshalb der Anteil Wasser 64.94 % beträgt, das unter *Art des Stoffes* der Kategorie *wäßriges Medium* zugeordnet wird.

Verunreinigungen müssen jedoch nicht stets benannt werden. Es genügt die prozentuale Reinheit einzutragen, und das Programm bestimmt intern die entsprechende Masse.

1.4.4 Austauschen von Synthesen

Synthesen können wie zuvor beschrieben in das Projekt eingetragen werden oder auch über die Funktion *Austauschen* (s. Abbildung 2, S. 12) mittels der gleichnamigen Schaltfläche aus bereits erstellten Projekten durch Verschieben oder Kopieren übernommen werden. Für das Beispiel der Synthese von p-Methoxyacetophenon kann, wie in Abbildung 20 dargestellt, auf diese Weise ein weiteres Projekt (Name: Anisol+p-Methoxyacetophenon.project) hinzugezogen werden, aus dem drei weitere Synthesen von p-Methoxyacetophenon und zwei Synthesen von Anisol durch Kopieren übernommen werden können (Abbildung 20 und Abbildung 21).

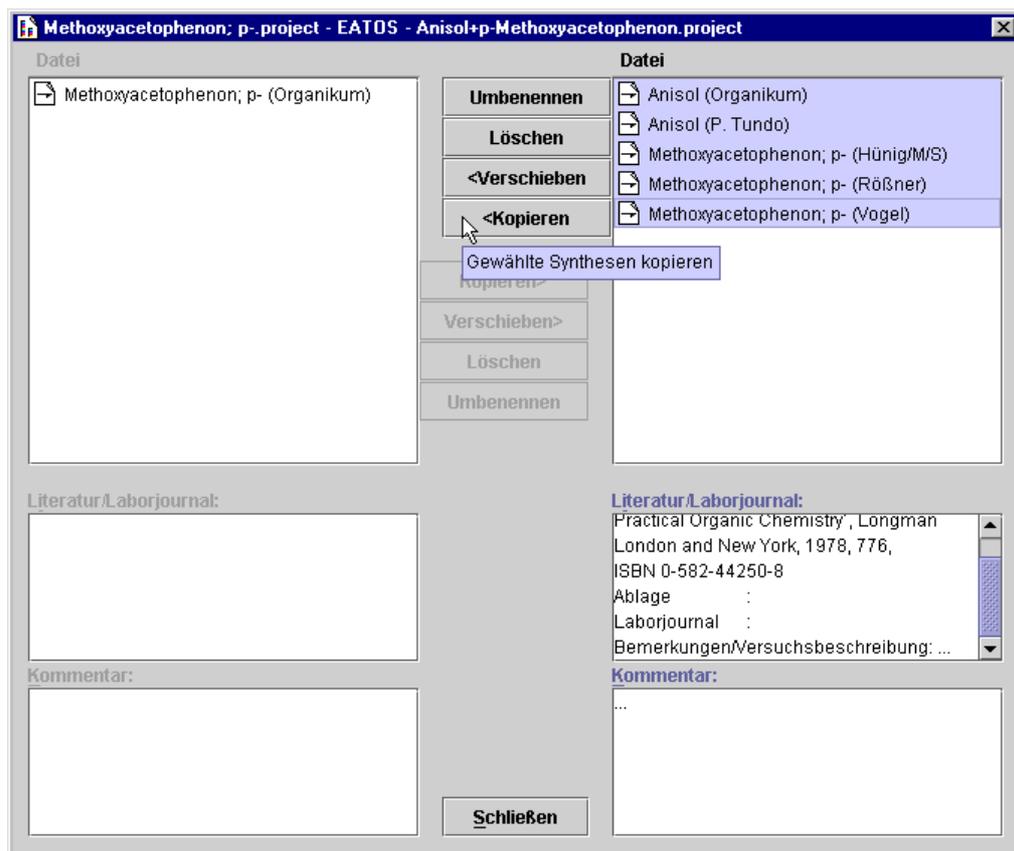


Abbildung 20 Kopieren von Synthesen von Projekt zu Projekt I

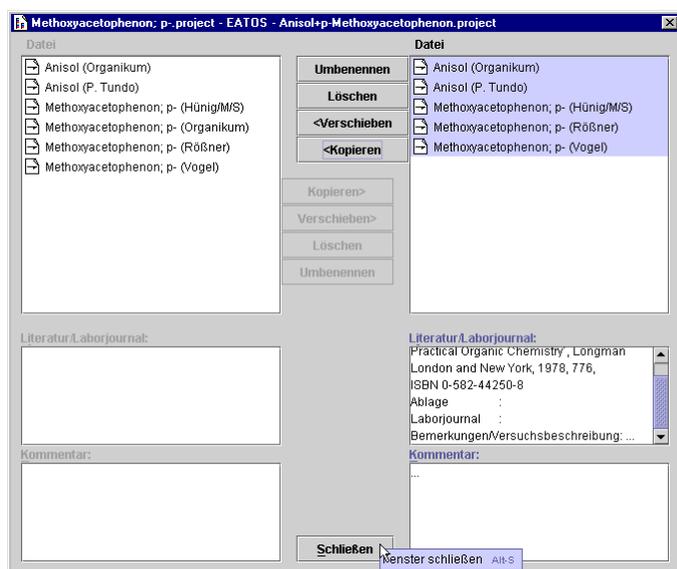


Abbildung 21 Kopieren von Synthesen von Projekt zu Projekt II

1.4.5 Projekt, Substanzliste, Programm

Über die Schaltfläche *Datei* des Projektfensters (Abbildung 2) wird das Projekt gespeichert oder zu einem anderen Projekt gewechselt. Außerdem können die Substanzliste (Kapitel 1.7, S. 52) geöffnet oder das Programm beendet werden.

Im Projektfenster kann mittels der Schaltfläche *Spracheinstellung* zwischen Deutsch und Englisch gewechselt werden. Die Änderung der Spracheinstellung wird nach einem erneutem Programmstart wirksam.

1.5 Wichtung

Eine wichtige Funktion des Programms EATOS besteht darin, durch Aufzeigen der Ressourceninanspruchnahme und des Abfallaufkommens pro Produkteinheit Schwachstellen zur Verbesserung der quantitativen Stoffströme zu identifizieren. Dies ist durch die bisher beschriebenen Eingaben bereits möglich: Materialinput und Umweltfaktor E (Abfall [kg] / Produkt [kg]) werden in der graphischen Ergebniswiedergabe angezeigt.

Die andere bedeutende Funktion des Programms ist der Einbezug der Qualität der verwendeten Substanzen in die Beurteilung einer chemischen Synthese. Die substanzspezifischen Eigenschaften der beteiligten Stoffe bestimmen die potentielle Umweltrelevanz und die Gefährdung für den Menschen. Damit chemische Synthesen auch hinsichtlich dieser Aspekte untersucht und bewertet werden können, werden die quantitativen Stoffströme mit ihren qualitativen Eigenschaften nach einem Programm internen Algorithmus gewichtet. Je problematischer eine Substanz, desto stärker wird ihr Anteil in der Massenbilanz herausgestellt. Dies erfolgt durch Multiplikation der Substanzmenge mit einem substanzspezifischen Belastungsfaktor, kurz mit Q bezeichnet. Dieser substanzspezifische Belastungsfaktor Q kann Werte zwischen 1 und 10 annehmen und setzt sich dabei wahlweise aus u.a. Humantoxizität, Ökotoxizität, Ozonbildungspotential usw. zusammen. Durch Betätigen der Schaltfläche *Wichtung* (siehe z.B. Abbildung 5, S. 16) (oder über *Bearbeiten*) erhält der Benutzer Zugang zu den Wichtungskategorien (Abbildung 22), die größtenteils den aus der Ökobilanzierung entsprechen und mit einer oder mehreren Wirkkategorien repräsentiert werden.

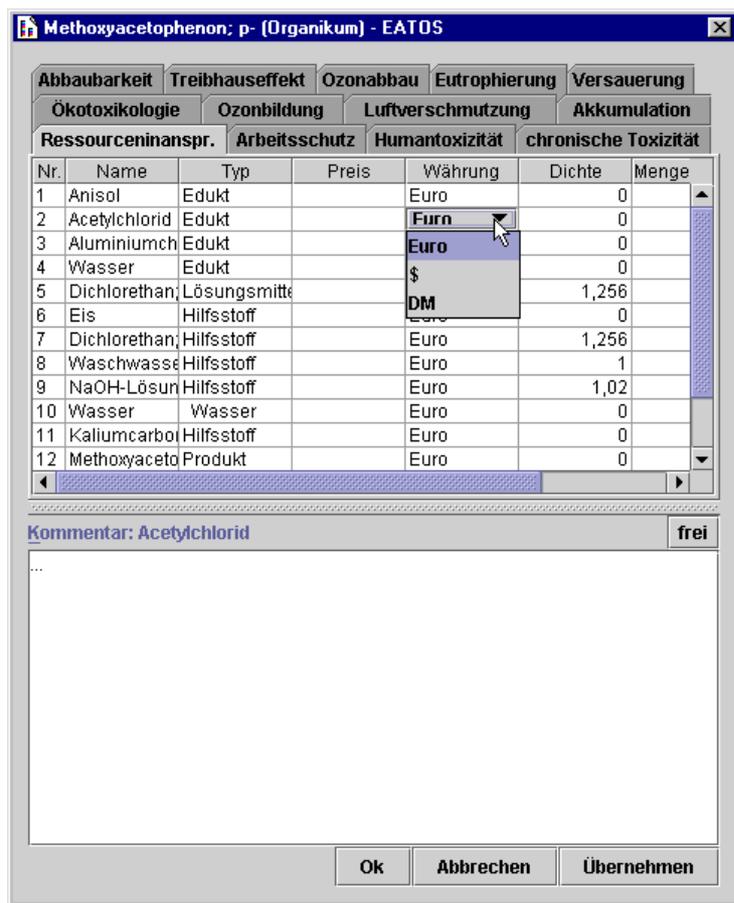


Abbildung 22 Wichtungskategorien

Der Benutzer wählt die Registerblätter der gewünschten Wichtungskategorien aus und trägt zu den bei der Synthese verwendeten Substanzen (vorgegeben: Nr., Name, Typ) die entsprechenden Substanzparameter ein, die als Wirkkategorien für diese Wichtungskategorien fungieren. Die Humantoxizität wird dabei beispielsweise durch den MAK-Wert repräsentiert und die Ökotoxizität durch den WGK-Wert. Auf alternative Substanzparameter, wie z.B. das Gefahrensymbol oder den LC₅₀-Wert, wird in den Fällen zurückgegriffen, wenn MAK-Wert bzw. WGK-Wert nicht existieren. Zu jeder Substanz können nach Betätigen der Schaltfläche *frei* einzelne Substanzen gezielt angewählt und im *Kommentar*-Feld Einträge vorgenommen werden, um die Substanzparameter näher zu erläutern und / oder Quellenangaben zu den Daten vorzunehmen. Dabei ändert sich die Schaltfläche *frei* zu *fixiert*. Erneutes Anklicken dieser Schaltfläche erzeugt wieder den vorigen Status *frei*, so daß im Kommentarfeld die Angaben zu den Substanzen erscheinen, über die sich der Cursor befindet. Zu Substanzen, die aus der Substanzliste mit vollem Datensatz importiert wurden (Kap. 1.8.2, S. 55), liegen die Substanzparameter bereits vor, so daß diese nicht erneut eingegeben werden müssen. Daher empfiehlt es sich, neu eingetragene Substanzen mit ihrem gesamten Datensatz in die Substanzliste zu exportieren (Kap. 1.8.1, S. 54), damit sie für spätere Anwendungen in anderen Untersuchungen zur Verfügung stehen und einfach importiert werden können. Durch den Aufbau einer Datenbank in Form der

Substanzliste wird auf diese Weise eine bequeme Verwendung des Programms EATOS möglich, weil die Daten einer Substanz nur ein einziges Mal eingegeben werden müssen!

Insgesamt gibt es 13 Wichtungskategorien, von denen sich zwei auf den Input der Synthese beziehen und die anderen auf den Output, ausgenommen das Produkt. Die Materialbilanz wird in Form eines Säulendiagramms wiedergegeben. Die Säulen werden mit 'S⁻¹' und 'E' bezeichnet und lehnen damit an zwei von R.A. Sheldon (*'Consider the environmental quotient'*, *CHEMTECH* **1994**, 3, 38–47) definierten Kennzahlen an – der Selektivität S und den Umweltfaktor E. Die Selektivität S ist der gewichtsbezogene Quotient von Produkt und Edukten (Substrate), d.h. ein Maß für die Effektivität bei der Umsetzung der Edukte zum gewünschten Produkt. In Anlehnung an diese Kennzahl wird eine inverse Selektivität (S⁻¹), auch als *mass intensity* bzw. Massenindex bezeichnet, definiert, die allerdings neben den Substraten auch alle weiteren Eingangsstoffe mit einbezieht. Der Exponent bei S⁻¹ zeigt an, daß im Gegensatz zur Selektivität S nicht das Verhältnis von Produkt zu den Eingangsstoffen, sondern die umgekehrte Beziehung bestimmt wird:

$$\text{Massenindex } S^{-1} = \frac{\sum \text{Substrate[g]} + \text{Lösungsmittel[g]} + \text{Hilfsstoffe[g]} + \text{Kat. [g]} + \dots}{\text{Produkt[g]}}$$

Der Massenindex S⁻¹ stellt also den Massenindex pro Produkteinheit dar - den sogenannten Input der Reaktion. Das analoge Verhältnis von Abfall zum Produkt nennt R.A. Sheldon den Umweltfaktor E (environmental factor).

$$\text{Umweltfaktor } E = \frac{\sum \text{Abfall [g]}}{\text{Produkt [g]}}$$

Die Wirkkategorien jeder Wichtungskategorie werden Programm intern den Belastungsfaktoren Q 1 bis 10 zugeordnet. Für die Bestimmung des Gesamtbelastungsfaktors Q_{gesamt} einer Substanz wird ein Mittelwert aus den Q-Werten der gewählten Wichtungskategorien gebildet. Das ist im übrigen auch der Grund dafür, daß alle Wichtungskategorien auf die uniforme Belastungsfaktorenskala 1 bis 10 normiert werden. Die Wahl bestimmter Wichtungskategorien und die Wichtung der Bedeutung der Belastungsfaktoren untereinander kann in der graphischen Ergebniswiedergabe vorgenommen werden, um eine oder mehrere Synthesen hinsichtlich einer oder mehrerer Wichtungskategorien untersuchen zu können (siehe Kap. 1.9.1, S. 63).

Im folgenden werden die einzelnen Wichtungskategorien kurz erläutert.

1.5.1 Wichtungskategorie Ressourceninanspruchnahme

Die Synthese einer chemischen Substanz ist oft auf verschiedene Weisen möglich, weshalb auf unterschiedlichste Substrate zurückgegriffen wird. Der bloße Vergleich der Synthesen, die zum Zielprodukt führen, ohne die Berücksichtigung von Material- und Produktionsaufwand zur Herstellung der möglicherweise qualitativ sehr unterschied-

lichen Substrate liefert nicht die ganze Wahrheit. Damit die Ressourceninanspruchnahme Eingang in das Blickfeld einer umweltrelevanten Betrachtungsweise findet, sollte die Geschichte der verwendeten Stoffe hinsichtlich Material- und Produktionsaufwand inklusive sicherheits- und umwelttechnischer Erfordernisse beleuchtet werden. Meist sind jedoch nähere Informationen hierüber, wie Anzahl der Syntheseschritte oder toxikologische Aspekte der dabei verwendeten Chemikalien, nicht verfügbar, gar nicht vorhanden oder - in der Regel - nur mit Aufwand zu recherchieren. Praktikabler ist die Abschätzung des Ausmaßes der Umweltbelastung bei der Herstellung der beteiligten Substanzen mit ihrem Preis. Der Substanzpreis wurde daher als Maß für die Ressourceninanspruchnahme gewählt.

Aufgrund der großen Spannweite der möglichen Substanzpreise im Vergleich zu den zu belegenden Belastungsfaktoren Q 1 bis 10 wurde mit einer logarithmischen Funktion eine Einteilung vorgenommen. Der Belastungsfaktor Q von Substanzpreisen wird mit dem folgenden Ausdruck ermittelt:

$$Q = \left\lceil \frac{\ln\left(\frac{\text{Preis}}{0.0178}\right)}{0.8635} \right\rceil; \text{ '[]' ist die Gaußsche Ganzzahlfunktion, d.h. z.B. } [2.3] = [2.98] = 2$$

Diese Formel ergibt sich aus der Umstellung der Formel $\text{Preis} = 0.0178 \cdot e^{0.8635 \cdot Q}$ nach Q , die aus den für diese Wichtungskategorie festgelegten Wertepaaren ($Q = 2 / \text{Preis} = 0.1 \text{ Euro/g}$) und ($Q = 10 / \text{Preis} = 100 \text{ Euro/g}$) mit der vorgegebenen Basis (hier $e = 2.718\dots$) eindeutig resultiert. Mit dieser Funktion (Abbildung 23) lassen sich nach Vertauschen von Ordinate und Abzisse und Anwenden der Gauß'schen Ganzzahlfunktion, die die sich ergebene logarithmische Funktion ($Q = f(\text{Preis})$) in eine Treppenfunktion verwandelt, die Preisspannen der Tabelle 1 erhalten.

Tabelle 1 Zuordnung von Substanzpreisen zum Belastungsfaktor $Q_{\text{Ressourceninanspruchnahme}}$

Q	[Euro/g]		
1	umsonst	bis	0.10
2	0.10	bis	0.24
3	0.24	bis	0.56
4	0.56	bis	1.34
5	1.34	bis	3.17
6	3.17	bis	7.51
7	7.51	bis	17.80
8	17.80	bis	42.22
9	42.22	bis	100.13
10	100.13	bis	unendlich

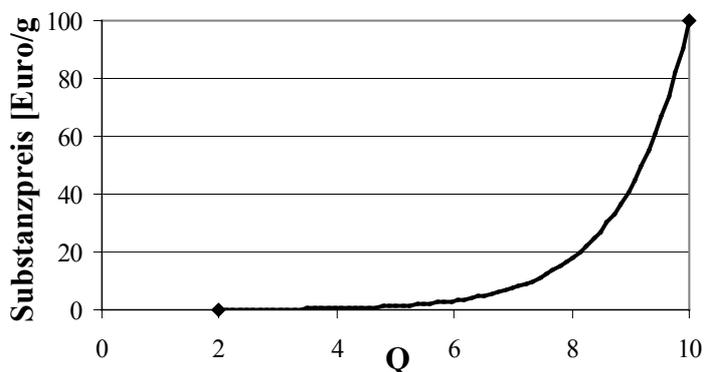


Abbildung 23 Exponentielle Funktion zur Bestimmung von $Q_{\text{Ressourceninanspruchnahme}}$

Durch Multiplikation mit den substanzspezifischen Belastungsfaktoren $Q_{\text{Ressourceninanspruchnahme}}$ wird der Massenindex S^{-1} unter Bildung des Umweltindex EI_{in} gewichtet, zu dem außerdem noch die im folgenden beschriebene Kategorie *Arbeitsschutz* einen Beitrag leisten kann.

1.5.2 Wichtungskategorie Arbeitsschutz

Für die Abschätzung des Risikopotentials, das von einer chemischen Reaktion ausgeht, sind Flammpunkt, Dampfdruck, Reaktivität (z.B. mit Luftsauerstoff und Wasser), Toxizitätsdaten u.v.a.m. wichtige Parameter. Jedoch ist eine schnelle Zusammenstellung der Informationen und Verwendung für eine frühe Beurteilung der Synthesplanung und für einen Vergleich verschiedener Optionen nicht ohne weiteres möglich. Daher ist es sinnvoll auf die für die Substanzen ermittelten, leicht zugänglichen R-Sätze zurückzugreifen, in denen diese Informationen zusammengetragen sind. Entsprechend der Dringlichkeit einer Gefährdung durch chemische Substanzen wurden alle R-Sätze den Belastungsfaktoren 0.1 bis 5 zugeordnet. In der Regel erhält die R-Satz-Bezeichnung "sehr giftig" einen höheren Wert Q als "giftig" und dieser entsprechend höher als "gesundheitsschädlich" – analog ebenso explosionsfähig und entzündlich. Je mehr Bedingungen für ein Auftreten der Gefahr erfüllt sein müssen, desto niedriger sind die Werte für Q . Gefährdungen für die Natur erhalten niedrige Werte Q , weil in dieser Kategorie der Arbeitsschutz betrachtet wird. Voraussetzung für Gefährdung durch Verschlucken ist in der Regel das aktive Selbstverschulden und erhält daher den Wert $Q = 0.5$ oder, wenn sogar längere Exposition für eine Gefahr durch Verschlucken erforderlich ist, nur den Wert $Q = 0.1$. Sind einer Substanz mehrere R-Sätze zugeschrieben, dann werden die entsprechenden Werte für Q bis maximal 10 addiert, um den unterschiedlichen, kumulativ aufzufassenden Effekten Rechnung zu tragen.

Tabelle 2 Zuordnung der R-Sätze zum Belastungsfaktor $Q_{\text{Arbeitsschutz}}$

Q	Nr.	R-Satz
4	R1	In trockenem Zustand explosionsgefährlich
4	R2	Durch Schlag, Reibung, Feuer oder andere Zündquellen explosionsgefährlich
5	R3	Durch Schlag, Reibung, Feuer oder andere Zündquellen besonders explosionsgefährlich
2	R4	Bildet hochempfindliche explosionsgefährliche Metallverbindungen
3	R5	Beim Erwärmen explosionsfähig
4	R6	Mit und ohne Luft explosionsfähig
3	R7	Kann Brand verursachen
4	R8	Feuergefahr bei Berührung mit brennbaren Stoffen
3	R9	Explosionsgefahr bei Mischung mit brennbaren Stoffen
1	R10	Entzündlich
2	R11	Leichtentzündlich
3	R12	Hochentzündlich
3	R13	Hochentzündliches Flüssiggas (fällt weg)
2	R14	Reagiert heftig mit Wasser
3	R14/15	Reagiert heftig mit Wasser unter Bildung hochentzündlicher Gase
3	R15	Reagiert mit Wasser unter Bildung hochentzündlicher Gase
3	R15/29	Reagiert mit Wasser unter Bildung giftiger und hochentzündlicher Gase
3	R16	Explosionsgefährlich in Mischung mit brandfördernden Stoffen
4	R17	Selbstentzündlich an der Luft
3	R18	Bei Gebrauch Bildung explosionsfähiger/leichtentzündlicher Dampf-Luftgemische möglich
3	R19	Kann explosionsfähige Peroxide bilden
1.5	R20	Gesundheitsschädlich beim Einatmen
1.5	R20/21	Gesundheitsschädlich beim Einatmen und bei Berührung mit der Haut
1.5	R20/21/22	Gesundheitsschädlich beim Einatmen, Verschlucken und Berührung mit der Haut
1.5	R20/22	Gesundheitsschädlich beim Einatmen und Verschlucken
1.5	R21	Gesundheitsschädlich bei Berührung mit der Haut
1.5	R21/22	Gesundheitsschädlich bei Berührung mit der Haut und beim Verschlucken
0.5	R22	Gesundheitsschädlich beim Verschlucken
2.5	R23	Giftig beim Einatmen
2.5	R23/24	Giftig beim Einatmen und bei Berührung mit der Haut
2.5	R23/24/25	Giftig beim Einatmen, Verschlucken und Berührung mit der Haut
2.5	R23/25	Giftig beim Einatmen und Verschlucken
2.5	R24	Giftig bei Berührung mit der Haut
2.5	R24/25	Giftig bei Berührung mit der Haut und beim Verschlucken
0.5	R25	Giftig beim Verschlucken
3.5	R26	Sehr giftig beim Einatmen
3.5	R26/27	Sehr giftig beim Einatmen und bei Berührung mit der Haut
3.5	R26/27/28	Sehr giftig beim Einatmen, Verschlucken und Berührung mit der

		Haut
3.5	R26/28	Sehr giftig beim Einatmen und Verschlucken
3.5	R27	Sehr giftig bei Berührung mit der Haut
3.5	R27/28	Sehr giftig bei Berührung mit der Haut und beim Verschlucken
0.5	R28	Sehr giftig beim Verschlucken
1.5	R29	Entwickelt bei Berührung mit Wasser giftige Gase
1.5	R30	Kann bei Gebrauch leicht entzündlich werden
1.5	R31	Entwickelt bei Berührung mit Säure giftige Gase
2.5	R32	Entwickelt bei Berührung mit Säure sehr giftige Gase
4	R33	Gefahr kumulativer Wirkungen
2	R34	Verursacht Verätzungen
3	R35	Verursacht schwere Verätzungen
1.5	R36	Reizt die Augen
1.5	R36/37	Reizt die Augen und die Atmungsorgane
1.5	R36/37/38	Reizt die Augen, Atmungsorgane und die Haut
1.5	R36/38	Reizt die Augen und die Haut
1.5	R37	Reizt die Atmungsorgane
1.5	R37/38	Reizt die Atmungsorgane und die Haut
1.5	R38	Reizt die Haut
3.5	R39	Ernste Gefahr irreversiblen Schadens
3.5	R39/23	Giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens durch Einatmen
3.5	R39/23/24	Giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens durch Einatmen und bei Berührung mit der Haut
3.5	R39/23/24/25	Giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens durch Einatmen, Berührung mit der Haut und durch Verschlucken
3.5	R39/23/25	Giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens durch Einatmen und durch Verschlucken
3.5	R39/24	Giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens bei Berührung mit der Haut
3.5	R39/24/25	Giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens bei Berührung mit der Haut und durch Verschlucken
0.5	R39/25	Giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens durch Verschlucken
4	R39/26	Sehr giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens durch Einatmen
4	R39/26/27	Sehr giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens durch Einatmen und bei Berührung mit der Haut
4	R39/26/27/28	Sehr giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens durch Einatmen, Berührung mit der Haut und durch Verschlucken
4	R39/26/28	Sehr giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens durch Einatmen und Verschlucken
4	R39/27	Sehr giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens bei Berührung mit der Haut
4	R39/27/28	Sehr giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens bei Berührung mit der Haut und durch Verschlucken
0.5	R39/28	Sehr giftig: ernste Gefahr irreversiblen Schadens durch Verschlucken
3	R40	Irreversibler Schaden möglich
3	R40/20	Gesundheitsschädlich: Möglichkeit irreversiblen Schadens durch Einatmen

3	R40/20/21	Gesundheitsschädlich: Möglichkeit irreversiblen Schadens durch Einatmen und bei Berührung mit der Haut
3	R40/20/21/22	Gesundheitsschädlich: Möglichkeit irreversiblen Schadens durch Einatmen, Berührung mit der Haut und durch Verschlucken
3	R40/20/22	Gesundheitsschädlich: Möglichkeit irreversiblen Schadens durch Einatmen und durch Verschlucken
3	R40/21	Gesundheitsschädlich: Möglichkeit irreversiblen Schadens bei Berührung mit der Haut
3	R40/21/22	Gesundheitsschädlich: Möglichkeit irreversiblen Schadens bei Berührung mit der Haut und durch Verschlucken
0.5	R40/22	Gesundheitsschädlich: Möglichkeit irreversiblen Schadens durch Verschlucken
2	R41	Gefahr ernster Augenschäden
4	R42	Sensibilisierung durch Einatmen möglich
4	R42/43	Sensibilisierung durch Einatmen und Hautkontakt möglich
4	R43	Sensibilisierung durch Hautkontakt möglich
4	R44	Explosionsgefahr bei Erhitzen unter Einschluß
5	R45	Kann Krebs erzeugen
5	R46	Kann vererbare Schäden verursachen
5	R47	Kann Mißbildungen verursachen
1.5	R48	Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition
1.5	R48/20	Gesundheitsschädlich: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Einatmen
1.5	R48/20/21	Gesundheitsschädlich: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Einatmen und durch Berührung mit der Haut
1.5	R48/20/21/22	Gesundheitsschädlich: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Einatmen, Berührung mit der Haut und durch Verschlucken
1.5	R48/20/22	Gesundheitsschädlich: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Einatmen und durch Verschlucken
1.5	R48/21	Gesundheitsschädlich: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Berührung mit der Haut
1.5	R48/21/22	Gesundheitsschädlich: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Berührung mit der Haut und durch Verschlucken
0.1	R48/22	Gesundheitsschädlich: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Verschlucken
2.5	R48/23	Giftig: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Einatmen
2.5	R48/23/24	Giftig: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Einatmen und durch Berührung mit der Haut
2.5	R48/23/24/25	Giftig: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Einatmen, Berührung mit der Haut und durch Verschlucken
2.5	R48/23/25	Giftig: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Einatmen und durch Verschlucken
2.5	R48/24	Giftig: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer

		Exposition durch Berührung mit der Haut
2.5	R48/24/25	Giftig: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Berührung mit der Haut und durch Verschlucken
0.1	R48/25	Giftig: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Verschlucken
5	R49	Kann Krebs erzeugen beim Einatmen
0.1	R50	Sehr giftig für Wasserorganismen
0.1	R50/53	Sehr giftig für Wasserorganismen, kann in Gewässern längerfristig schädliche Wirkungen haben
0.1	R51	Giftig für Wasserorganismen
0.1	R51/53	Giftig für Wasserorganismen, kann in Gewässern längerfristig schädliche Wirkungen haben
0.1	R52	Schädlich für Wasserorganismen
0.1	R52/53	Schädlich für Wasserorganismen, kann in Gewässern längerfristig schädliche Wirkungen haben
0.1	R53	Kann in Gewässern längerfristig schädliche Wirkungen haben
0.1	R54	Giftig für Pflanzen
0.1	R55	Giftig für Tiere
0.1	R56	Giftig für Bodenorganismen
0.1	R57	Giftig für Bienen
0.1	R58	Kann längerfristig schädliche Wirkungen auf die Umwelt haben
0.1	R59	Gefährlich für die Ozonschicht
5	R60	Kann die Fortpflanzungsfähigkeit beeinträchtigen
5	R61	Kann das Kind im Mutterleib schädigen
5	R62	Kann möglicherweise die Fortpflanzungsfähigkeit beeinträchtigen
5	R63	Kann das Kind im Mutterleib möglicherweise schädigen
5	R64	Kann Säuglinge über die Muttermilch schädigen
0.5	R65	Gesundheitsschädlich: kann beim Verschlucken Lungenschäden verursachen
0.1	R66	Wiederholter Kontakt kann zu spröder oder rissiger Haut führen
0.1	R67	Dämpfe können Schläfrigkeit und Benommenheit verursachen

Um mit EATOS das Risikopotential für den Mitarbeiter abschätzen zu können, werden die Substanzen auf der Inputseite, die unter der Bezeichnung 'S⁻¹' in Form einer Säule dargestellt werden, mit den für sie ermittelten Belastungsfaktoren gewichtet. Dabei wird, ggf. zusammen mit der Kategorie Ressourceninanspruchnahme, der Umweltindex für den Input 'EI_in' (Environmental Index (Input)) gebildet.

1.5.3 Wichtungskategorie Humantoxizität (akut)

Die akute Toxizität chemischer Substanzen kann mit Hilfe drei Wirkkategorien beurteilt werden: MAK-Wert (Maximale Arbeitsplatzkonzentrations-Grenzwert), Gefahrensymbol oder LD₅₀- bzw. LC₅₀-Werte. Analog zu der Vorgehensweise bei der Ressourceninanspruchnahme (Wirkkategorie Eduktpreis) wurden MAK-, LD₅₀- bzw. LC₅₀-Wertebereichen unter Verwendung logarithmischer Funktionen (Tabelle 3) Belastungsfaktoren Q zugeordnet, die aus den angegebenen Wertepaaren erzeugt werden.

Tabelle 3 f(MAK) und f(LX₅₀-Wert) mit X = C oder D und (x/y)-Wertepaare 1 und 2 zur Ermittlung der Funktionen f(Q). ('[]' ist die Gaußsche Ganzzahlfunktion, d.h. z.B. [2.3] = [2.98] = 2)

f(MAK) und f(LX ₅₀ -Wert)	W.paar 1 (Q / LX ₅₀)	W.paar 2 (Q / LX ₅₀)
Q = [ln(MAK/28284)/-1.3246]	Q = 2 / MAK = 2000 mg/m ³	Q = 10 / MAK = 0.05 mg/m ³
Q = [ln(LC _{50 inhal.} /68.39)/-0.6148]	(Q = 2 / 20 mg/l /4h)	(Q = 8 / 0.5 mg/l /4h)
Q = [ln(LD _{50 oral} /8615)/-0.7303]	(Q = 2 / 2000 mg/kg)	(Q = 8 / 25 mg/kg)
Q = [ln(LD _{50 dermal} /17230)/-0.7303]	(Q = 2 / 4000 mg/kg)	(Q = 8 / 50 mg/kg)

f(MAK) und f(LX₅₀-Wert) ergeben sich aus den exponentiellen Funktionen f(Q) = MAK = 28284 · e^{-1.3246 · Q} LC_{50 inhal.} = 68.39 · e^{-0.6148 · Q}, LD_{50 oral} = 8615 · e^{-0.7303 · Q} und LD_{50 dermal} = 17230 · e^{-0.7303 · Q}. Die Gefahrensymbole (Xn, T oder T⁺) wurden den drei Werten Q = 4, 7 und 10 zugeordnet (Tabelle 4). Die Wertebereiche für die Maximale Arbeitsplatzkonzentration und den LD₅₀- bzw. LC₅₀-Werten sind in Tabelle 4 und Tabelle 5 dargestellt.

Tabelle 4 Zuordnung von MAK Wertebereichen und Gefahrensymbolen zum Belastungsfaktor Q_{Humantoxizität(akut)}

Q	MAK-Wertebereich [mg/m ³]		Gefahrensymbol
1	7520.98	bis 1999.90	
2	1999.90	bis 531.79	
3	531.79	bis 141.41	
4	141.41	bis 37.60	Xn
5	37.60	bis 10.00	
6	10.00	bis 2.66	
7	2.66	bis 0.71	T
8	0.71	bis 0.19	
9	0.19	bis 0.05	
10	0.05	bis 0.00	T ⁺

Tabelle 5 Zuordnung von LD₅₀- bzw. LC₅₀-Wertebereichen zu einem Belastungsfaktor Q

Q	Gefahrensymbol	Aufnahmeweg								
		LC ₅₀ inhal. [mg/l /4h]		LD ₅₀ oral [mg/kg]		LD ₅₀ dermal [mg/kg]				
1		36.98	bis	20.00	4150.40	bis	1999.52	8300.80	bis	3999.03
2	Xn ≈	20.00	bis	10.81	1999.52	bis	963.30	3999.03	bis	1926.59
3	Xn ≈	10.81	bis	5.85	963.30	bis	464.08	1926.59	bis	928.16
4	Xn ≈	5.85	bis	3.16	464.08	bis	223.58	928.16	bis	447.16
5	Xn, T ≈	3.16	bis	1.71	223.58	bis	107.71	447.16	bis	215.42
6	T ≈	1.71	bis	0.92	107.71	bis	51.89	215.42	bis	103.78
7	T ≈	0.92	bis	0.50	51.89	bis	25.00	103.78	bis	50.00
8	T ⁺ ≈	0.50	bis	0.27	25.00	bis	12.04	50.00	bis	24.09
9	T ⁺ ≈	0.27	bis	0.15	12.04	bis	5.80	24.09	bis	11.60
10	T ⁺ ≈	0.15	bis	0.00	5.80	bis	0.00	11.60	bis	0.00

Die Belastungsfaktoren Q der in Tabelle 5 dargestellten Wertebereiche stimmen ganz gut mit der in Tabelle 4 vorgenommenen Zuteilung der Belastungsfaktoren Q zu den Gefahrensymbolen Xn, T und T⁺ überein, die zur Veranschaulichung in der Spalte 'Gefahrensymbol' entsprechend der gesetzlichen Vorgabe aus Tabelle 6 notiert wurden.

Tabelle 6 Einstufungskriterien und Auswahl von Gefahrensymbolen nach 67/548/EWG Anhang 6(2)

Gefahrensymbol	Aufnahmeweg					
	inhal. [mg/l /4h]		oral [mg/kg]		dermal [mg/kg]	
T ⁺		LC ₅₀ < 0.5		LD ₅₀ < 25		LD ₅₀ < 50
T	0.5 <	LC ₅₀ < 2	25 <	LD ₅₀ < 200	50 <	LD ₅₀ < 400
Xn	2 <	LC ₅₀ < 20	200 <	LD ₅₀ < 2000	400 <	LD ₅₀ < 2000

Die Prioritätenreihenfolge gibt der Programm internen Verwendung von MAK-Werten gegenüber den Gefahrensymbolen und den Gefahrensymbolen gegenüber den LD₅₀- bzw. LC₅₀-Werten den Vorzug.

1.5.4 Wichtungskategorie chronische Toxizität

In der Wichtungskategorie 'Chronische Toxizität' können teratogene, carcinogene und mutagene Stoffe in die Klassen 1 - 3 eingeteilt werden. Jedoch wird Programm intern hinsichtlich Belastungsfaktoren nicht zwischen den jeweiligen Klassen differenziert, denn selbst bei einem Verdacht auf z.B. krebserregende Wirkung ist die Freisetzung des Stoffes zu verhindern. Daher werden allen Klassen der Belastungsfaktor Q = 10 zugeordnet! Einer gleichzeitig mutagenen und karzinogenen Verbindung wird zwei mal der Wert Q = 10 zugewiesen.

1.5.5 Wichtungskategorie Ökotoxikologie

Ökologisch bedeutsame Parameter sind Dispersionstendenz, Persistenz, die aus Abbauvorgängen hervorgehenden Umwandlungsprodukte, Kombinationswirkungen mit anderen Stoffen und toxikologische Wirkungen. Die in EATOS betrachtete Kategorie

'Ökotoxikologie' konzentriert sich vornehmlich auf den letztgenannten Parameter, die Toxikologie. In EATOS werden WGK- (Wassergefährdungsklasse), LC₅₀-, EC₅₀- und IC₅₀-Werte zur Bestimmung des Belastungsfaktors Q verwendet und den Werten 1 bis 10 zugeordnet (Tabelle 7). Die Parameter für die Bestimmung der Wassergefährdungsklasse (nicht wassergefährdend; 1, 2 oder 3) sind akute orale Säugertoxizität (LD₅₀ Ratte), akute Bakterientoxizität (Zellvermehrungshemmtest, *Pseudomonas putida*, Toxizitätsschwelle EC₀), akute Fischtoxizität (LC₀ Goldorfe 48 h) und biologisches Abbauverhalten (OECD Screening Test). Ggf. werden weitere Gesichtspunkte, wenn Anlaß zur Untersuchung besteht, wie Karzinogenität oder Mutagenität, hohe Bioakkumulation oder Toxizität gegenüber z.B. Algen oder Daphnien in die Bewertung mit einbezogen. Der WGK-Wert liefert daher eine umfassendere Aussage hinsichtlich der Ökotoxikologie einer Substanz als es ein LC₅₀-Wert vermag. Wurden sowohl WGK-Wert als auch ein anderer Toxizitätswert angegeben, so zieht EATOS die Verwendung des WGK-Wertes (1. Priorität) vor. Die Festlegung der (x,y)-Wertepaare (Q = 8 / XC₅₀ = 1 mg/l) und (Q = 2 / XC₅₀ = 100 mg/l) (mit X = L, E oder I für Fisch, Daphnia oder Alge) definiert die exponentielle Funktion $XC_{50} = 464.16 \cdot e^{0.7675 \cdot Q}$, die mit einem etwas abgeänderten Wert - verwendet wird $XC_{50} = 464 \cdot e^{0.7675 \cdot Q}$ - zu den Wertebereichen in Tabelle 7 führt, so daß die Funktion, mit der Q aus den Toxizitätswerten bestimmt wird, lautet: $Q = [\ln(w/464)/0.7675]$ mit $w := LC_{50}, EC_{50}$ oder IC_{50} .

Tabelle 7 Zuordnung von WGK und LC₅₀-, EC₅₀- oder IC₅₀-Wertebereichen zum Belastungsfaktor Q_{Ökotoxikologie}

Q	WGK	LC ₅₀ (Fisch, 96 h), EC ₅₀ (Daphnia, 48 h), IC ₅₀ (Alge, 72 h) [mg/l]	R-Satz
1		215.38 bis 99.97	
2		99.97 bis 46.40	52
3		46.40 bis 21.54	52
4	1	21.54 bis 10.00	52
5		10.00 bis 4.64	51
6		4.64 bis 2.15	51
7	2	2.15 bis 1.00	51
8		1.00 bis 0.46	50
9		0.46 bis 0.22	50
10	3	0.22 bis 0.00	50

Die Änderung erfolgte, um eine optimale Verteilung der Einteilungsgrenzen 1 mg/l, 10 mg/l und 100 mg/l der Gefahrstoffverordnung (GefstV) Anhang I 1.3.2 gemäß Tabelle 8 auf den Wertebereich 1 bis 10 zu erzielen. Dies wurde erreicht, wie in der Spalte 'R-Satz' in Tabelle 7 veranschaulicht nachzuvollziehen ist, in der gemäß Tabelle 8 die R-Sätze den Wertebereichen zugeordnet wurden.

Tabelle 8 Einstufungsgrenzen der GefStV Anhang I 1.3.2 für die Zuordnung von R-Sätzen*

#	Akute Toxizität					
	Fisch (96 h) [mg/l]		Daphnia (48 h) [mg/l]		Alge(72 h) [mg/l]	
R 50	LC ₅₀ < 1		EC ₅₀ < 1		IC ₅₀ < 1	
R 51	1 < LC ₅₀	< 10	1 < EC ₅₀	< 10	1 < IC ₅₀	< 10
R 52	10 < LC ₅₀	< 100	10 < EC ₅₀	< 100	10 < IC ₅₀	< 100

* R 50 Sehr giftig für Wasserorganismen, R 51 Giftig für Wasserorganismen, R 52 Schädlich für Wasserorganismen, R 53 Kann in Gewässern längerfristig schädliche Wirkung haben; § und der Stoff ist nicht leicht abbaubar oder der logPow > 3 (es sei denn, der experimentell bestimmte BCF < 100)

1.5.6 Wichtungskategorie Ozonbildung

Für eine Wichtung von beispielsweise Lösungsmitteln hinsichtlich potentieller Ozonbildung können in der gleichnamigen Kategorie Informationen über deren unterschiedliche Ozonbildungspotentiale einbezogen werden. Das Ozonbildungspotential von Substanzen wird im Verhältnis zu dem Ozonbildungspotential von Ethen betrachtet und der prozentuale Anteil mit POCP (photochemical ozone creation potential) bezeichnet. Im Programm EATOS wurden für die Belastungsfaktoren Q POCP-Bereiche festgelegt, die außer Q = 1, 10 jeweils zehn Einheiten umfassen (Tabelle 9) und den Bereich zwischen 0 und 100 aufgliedern, denn der übliche POCP-Wertebereich von organischen Substanzen rangiert in etwa von -10 bis 150. Die entsprechende Funktion, mit der aus einem POCP-Wert der Wert Q ermittelt wird, lautet: $Q = \lceil \text{POCP}/10 + 0.5 \rceil$

Tabelle 9 Zuordnung von Ozonbildungspotentialen (POCPs) zum Belastungsfaktor Q_{Ozonbildung}

Q	POCP[Ethen := 100]		
1	0	bis	15
2	15	bis	25
3	25	bis	35
4	35	bis	45
5	45	bis	55
6	55	bis	55
7	55	bis	75
8	75	bis	85
9	85	bis	95
10	95	bis	>

1.5.7 Wichtungskategorie Luftverschmutzung

In der Umweltschutzgesetzgebung der Schweiz ist u.a. die Luftreinhalteverordnung (LRV) verankert. In Art. 4 LRV und Anh. 1 Ziffer 71 LRV sind in Kategorien unterteilte Grenzwerte für den Massenstrom [g/h] organischer und anorganischer Emissionen festgelegt. Für gas- oder dampfförmige Anorganika existieren die Kategorien 1 bis 4, wobei eine höhere Kategorie einen höheren Grenzwert bedeutet.

Analog gibt es für gas-, dampf- oder partikelförmige Organika die Kategorien 1 bis 3. Diesen Kategorien werden in EATOS wie folgt Werte für Q zugeordnet.

Tabelle 10 Zuordnung von Kategorien der Luftreinhalteverordnung der Schweiz zum Belastungsfaktor $Q_{\text{Luftverschmutzung}}$

Q	Kategorie
1	4
2	
3	
4	3
5	
6	
7	2
8	
9	
10	1

Für kanzerogene Stoffe, für deren Emissionsgrenzwerte in der LRV ebenfalls drei Kategorien zugeteilt sind, ist die in EATOS installierte Wichtungskategorie Luftverschmutzung nicht vorgesehen.

1.5.8 Wichtungskategorie Akkumulation

Die Anreicherung von Chemikalien in bestimmten Umweltkompartimenten bezeichnet man als Akkumulation. Organismen nehmen Substanzen durch ihre Nahrung (Biomagnifikation), über das sie umgebene Medium (Biokonzentration) oder über beide Wege (Bioakkumulation) auf. Ökologische Magnifikation, also die Konzentrationszunahme einer Substanz in einem Ökosystem oder einer Nahrungskette bei Übergang von einem niedrigeren zum nächst höheren trophischen Niveau, kann sich in Folge ergeben und insbesondere den am Ende der Nahrungskette stehenden Menschen gefährden, der meist selbst Urheber der Immissionen problematischer Substanzen ist.

Bei der Bioakkumulation werden nicht absolute Konzentrationen betrachtet, sondern das Verhältnis der Konzentration im Organismus zu der seiner Umgebung. Die Akkumulation von Substanzen im Organismus hängt von der Umgebungskonzentration, dem Grad der internen Aufnahme und der passiven (Diffusionsprozesse) oder aktiven (enzymatische Detoxifikation) Ausscheidung ab. Mit Hilfe von frei zugänglicher Software können logPow-Werte (Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizienten) von Substanzen ganz einfach nach Eingabe ihrer Struktur bestimmt und statt experimentell aufwendig zu ermittelnden BCF-Werten für die Abschätzung der Akkumulation verwendet werden. Eine Substanz gilt nach der internationalen Konvention als akkumulierend, wenn der $\log\text{Pow} > 3$ ist (national $\log\text{Pow} > 2.7$). Daher erfolgt die Zuordnung von logPow-Bereichen zu Belastungsfaktoren Q im Programm EATOS ab dem logPow-Wert 3 (Tabelle 11) mit der Funktion $Q = [(w + 1/3 - 3) \cdot 3]$ mit $w := \log(\text{BCF}/0.048)$ oder logPow. Die Programm interne Zuordnung des substanzspezifischen Belastungsfaktors Q hinsichtlich der Akkumulation erfolgt in

erster Linie nach dem Biokonzentrationsfaktor und - wenn dieser nicht existiert - nach dem Pow-Wert. Tabelle 11 veranschaulicht diese Zuordnung.

Tabelle 11 Zuordnung von $\log(\text{BCF}/0.048)$ bzw. $\log\text{Pow}$ -Bereichen zum Belastungsfaktor $Q_{\text{Akkumulation}}$

Q	$\log(\text{BCF}/0.048)$ - bzw. $\log\text{Pow}$ -Bereich		
1	3.00	bis	3.33
2	3.33	bis	3.67
3	3.67	bis	4.00
4	4.00	bis	4.33
5	4.33	bis	4.67
6	4.67	bis	5.00
7	5.00	bis	5.33
8	5.33	bis	5.67
9	5.67	bis	6.00
10	6.00	bis	<

1.5.9 Wichtungskategorie Abbaubarkeit

Die in die Natur eingebrachten Substanzen werden dort durch Photolyse, Hydrolyse oder Stoffwechselforgänge der Organismen zu anorganischen Stoffen abgebaut, die erneut in die Stoffkreisläufe, wie z.B. dem Kohlen- oder Stickstoffkreislauf, eingehen. Die Aufnahmekapazität der Natur für Stoffe vor allem anthropogener Herkunft und die Fähigkeit, sie abzubauen, ist jedoch beschränkt. Stoffe, die sich in der Natur anreichern und nur schlecht abgebaut werden, nennt man persistent. Beispielhaft seien die zu den persistenten halbflüchtigen Verbindungen (POPs, Persistent Organic Pollutants) zählenden Pflanzenschutzmittel Aldrin, Chlordan und die Industriechemikalie Hexachlorbenzol angeführt, deren Herstellung seit kurzem sogar verboten wurde. Ein Maß für die Abbaubarkeit ist die Halbwertszeit. Substanzen gelten als schnell abbaubar, wenn die Halbwertszeit (HWZ) bis zu einer Woche beträgt und als resistent, wenn sie ein Jahr ist. Daher wurde in EATOS dem Zeitraum von Woche der Belastungsfaktor $Q = 2$ zugeordnet und über einem Jahr den Wert 10. Eine lineare Aufteilung der Wertebereiche für Q ist in Tabelle 12 abgebildet.

Tabelle 12 Zuordnung von Halbwertszeiten zum Belastungsfaktor $Q_{\text{Abbaubarkeit}}$

Q	Halbwertszeit [h]						
1	0	bis	168	≈	7	Tage	schnell (1 - 7 Tage)
2	168	bis	1242	≈	52	Tage	mäßig schnell (1 - 4 Wochen)
3	1242	bis	2316	≈	97	Tage	
4	2316	bis	3390	≈	141	Tage	
5	3390	bis	4464	≈	186	Tage	langsam (1 - 6 Monate)
6	4464	bis	5538	≈	231	Tage	
7	5538	bis	6612	≈	276	Tage	
8	6612	bis	7686	≈	320	Tage	
9	7686	bis	8760	≈	365	Tage	resistent (6 - 12 Monate)
10	8760	bis	<				

Aus den Koordinaten ($Q = 2 / \text{HWZ} = 186 \text{ h}$) und ($Q = 10 / \text{HWZ} = 8760 \text{ h}$) ergibt sich die Funktion $\text{HWZ} = 1074 \cdot Q - 1980$, woraus sich der Belastungsfaktor Q bei gegebener HWZ mit $Q = [(\text{HWZ} + 1980) / 1074]$ errechnet.

Der Abbau von Chemikalien findet in verschiedenen Kompartimenten statt. Die Art des Abbaus kann in EATOS angegeben werden, um die Datenzugehörigkeit zuordnen zu können, jedoch erfolgt keine unterschiedlich differenzierte Zuordnung des Belastungsfaktors Q .

1.5.10 Wichtungskategorie Treibhauseffekt

Treibauswirksame Gase tragen zur Erwärmung der Erde und zum Klimawandel bei. Den größten Anteil am Treibhauseffekt haben die natürlichen Treibhausgase Kohlendioxid und Wasserdampf. Aber auch Methan und andere Spurengase wie Stickoxide und fluorierte Kohlenwasserstoffe mit u.a. anthropogener Herkunft sind ihrerseits treibhauswirksam. Das globale Erderwärmungspotential (Global warming potential, GWP) wird in Kohlendioxidäquivalenten ausgedrückt; $\text{GWP}_{\text{CO}_2} := 1$. In Tabelle 13 sind die spezifischen Belastungsfaktoren Q hinsichtlich des Treibhauseffektes zusammengetragen.

Tabelle 13 Zuordnung von Erderwärmungspotentialen (GWP) zum Belastungsfaktoren $Q_{\text{Treibhauseffekt}}$

Q	GWP [$\text{CO}_2 := 1$]		
1	0.00	bis	1.00
2	1.00	bis	2.96
3	2.96	bis	8.77
4	8.77	bis	25.98
5	25.98	bis	76.96
6	76.96	bis	227.93
7	227.93	bis	675.09
8	675.09	bis	1999.48
9	1999.48	bis	5922.08
10	5922.08	bis	<

Aus den Koordinaten ($Q = 2 / \text{GWP} = 1$ (CO_2 -Äquivalent)) und ($Q = 9 / \text{GWP} = 2000$ (CO_2 -Äquivalente)) ergibt sich die exponentielle Funktion $\text{GWP} = 0.114 \cdot e^{1.0858 \cdot Q}$, woraus sich der Belastungsfaktor Q bei gegebenem GWP mit $Q = [\ln(\text{GWP} / 0.114) / 1.0858]$ errechnet.

Im wesentlichen wirken sich die bei der Energiebereitstellung erzeugten Treibhausgase auf den Treibhauseffekt eines Verfahrens aus. Von wesentlich geringerer Bedeutung sind bei einer Synthese etwaig frei werdendes CO_2 und N_2O . Daher ist die Wichtungskategorie vor allem für Daten aus der Energiebereitstellung vorgesehen.

1.5.11 Wichtungskategorie Ozonabbau

In der Stratosphäre ist Ozon mit einem maximalen Volumenanteil von 10^{-5} angereichert (Ozonschicht) und absorbiert UVB- und UVA-Strahlen der Sonne, die u.a. beim Menschen Hautkrebs auslösen können. Die Ozonschicht wird vor allem durch von Menschen hergestellten Fluorchlorkohlenwasserstoffen (FCKW) zerstört, die als Aerosoltreibmittel produziert werden oder aus der Verwendung von Lösungsmitteln (z.B. Tetrachlorkohlenstoff) stammen. Das Ozonzerstörungspotential (Ozone depletion potential, ODP) von Stoffen wird in Relation zu CCl_3F (FCKW 11) betrachtet, dessen Potential mit 1 definiert wird. Für das Programm EATOS wurde das Ozonzerstörungspotential von CF_2BrCl (Halon 1211) ($\text{ODP} = 4$) für die Zuordnung eines hohen Wertes Q herangezogen.

Aus den Koordinaten ($Q = 1 / \text{ODP} = 0,01$ (FCKW 11-Äquivalente)) und ($Q = 9 / \text{ODP} = 4$ (FCKW 11-Äquivalente)) ergibt sich die exponentielle Funktion $\text{ODP} = 0.0047 \cdot e^{0.7489 \cdot Q}$, woraus sich der Belastungsfaktor Q bei gegebenem ODP mit $Q = [\ln(\text{ODP} / 0.0047) / 0.7489]$ errechnet.

Tabelle 14 Zuordnung von Ozonabbaupotentialen (ODP) zum Belastungsfaktor $Q_{\text{Ozonabbau}}$

Q	ODP [FCKW 11 := 1]		
1	0.00	bis	0.02
2	0.02	bis	0.04
3	0.04	bis	0.09
4	0.09	bis	0.20
5	0.20	bis	0.42
6	0.42	bis	0.89
7	0.89	bis	1.88
8	1.88	bis	3.97
9	3.97	bis	8.40
10	8.40	<	

1.5.12 Wichtungskategorie Eutrophierung

Der Eintrag von meist anorganischen (häufig Stickstoff- oder Phosphor-) Verbindungen in die Umwelt durch Industrieabwässer oder gasförmige Emissionen, von z.B. Stickoxiden, kann zu einer Störung des biologischen Gleichgewichts führen, in deren Folge die Eutrophierung von Gewässern voranschreitet. Das Eutrophierungspotential (Nutrification potential, NP) von Substanzen werden in Relation zum Eutrophierungspotential von Phosphat (PO_4^-) ausgedrückt, dessen Potential mit dem Wert 1 definiert wird. In EATOS wird diesem Wert 1 der höchste Belastungsfaktor $Q = 10$ zugeordnet und den übrigen Belastungsfaktoren Q äquidistante Wertebereiche bis 0.2 für $Q = 1$. Aus einem Eutrophierungspotential wird Q mit folgendem Ausdruck ermittelt: $Q = [\text{NP} \cdot 10]$. In Tabelle 15 wird die Zuordnung dargestellt.

Tabelle 15 Zuordnung von Eutrophierungspotentialen (NP) zum Belastungsfaktor $Q_{\text{Eutrophierung}}$

Q	NP [$\text{PO}_4^- := 1$]		
1	<		0.2
2	0.2	bis	0.3
3	0.3	bis	0.4
4	0.4	bis	0.5
5	0.5	bis	0.6
6	0.6	bis	0.7
7	0.7	bis	0.8
8	0.8	bis	0.9
9	0.9	bis	1
10	1		<

1.5.13 Wichtungskategorie Versauerung

Saurer Regen (pH-Wert < 5,6) resultiert aus der Bildung von Säure in der Atmosphäre, die durch Schwefel- und Stickstoffoxidemissionen verursacht wird. Schäden an der Vegetation (z.B. Waldschäden) und korrosionsbedingt an Bauwerken sind die Folge. Das Versauerungspotential (acidification potential, AP) von Schwefeldioxid wird mit dem Wert 1 definiert und andere Gase in ihrem Versauerungspotential in Bezug zu

Schwefeldioxid betrachtet. In EATOS wurde für den Wert $Q = 10$ der AP-Wert 1.9 festgelegt, weil der höchste AP-Wert 1.88 beträgt (Ammoniak). Die Einteilung der übrigen Q-Werte ist der Tabelle 16 zu entnehmen, in der sich Q nach $Q = [AP \cdot 5 + 0.5]$ aus einem AP-Wert errechnet.

Tabelle 16 Zuordnung von Versauerungspotentialen (AP) zum Belastungsfaktor $Q_{\text{Versauerung}}$

Q	AP [$\text{SO}_2 := 1$]	
1	<	0.3
2	0.3	bis 0.5
3	0.5	bis 0.7
4	0.7	bis 0.9
5	0.9	bis 1.1
6	1.1	bis 1.3
7	1.3	bis 1.5
8	1.5	bis 1.7
9	1.7	bis 1.9
10	1.9	<

1.6 Angabe der Literaturquelle und / oder Versuchsbeschreibung

Zu jedem Eintrag einer Synthese gehört die ihr zugrundeliegende Literaturquelle und / oder experimentelle Versuchsbeschreibung, die durch Anwählen der Schaltfläche *Literatur* (siehe z.B. Abbildung 5, S. 16) (oder über *Bearbeiten*) eingegeben werden kann. Zum einen wird dadurch eine stets nachvollziehbare eindeutige Quellenzuordnung gewährleistet und zum anderen die Information über den Quellenbezug in der graphischen Ergebnisdarstellung ermöglicht. Außerdem wird durch die Wiedergabe der Literatur bei Anwählen einzelner Synthesen im Projektfenster (vgl. Abbildung 2, S. 12) der Überblick über die in ihm enthaltenen Synthesen gewahrt. Dies ist insbesondere dann erforderlich, wenn mehrere Synthesen ähnlich bezeichnet worden sind, weil aus ihnen dasselbe Produkt hervorgeht, das auf verschiedene Literatur beschriebene Weisen erhalten wurde.

The screenshot shows a dialog box titled "Methoxyacetophenon; p- (Organikum) - EATOS". It contains the following fields and sections:

- Synthese von:** Methoxyacetophenon; p- **Eingabe von:** Eissen, M.
- Literatur**
 - Ablage:** [Empty text box]
 - Stichworte:** Friedel-Crafts-Acylierung
 - Verfasser:** Autorenkollektiv
 - Titel:** Organikum
 - Verlag/Zeitschrift:** Deutscher Verlag der Wissenschaften
 - Sonstiges:** Berlin
 - Datum/Jahr:** [] [] 1996
 - Band:** [] **Heft:** []
 - Seite(n):** []
 - ISBN:** 3-335-00492-2 **ISSN:** []
- Laborjournal**
 - Laborjournal-Nr.:** [] **Laborjournal-Seite:** []
 - Datum/Jahr:** [] [] []
- Bemerkungen/Versuchsbeschreibung:** [Large empty text area]

Buttons: **Ok** and **Abbruch**

Abbildung 24 Eingabe der Literaturquelle und / oder Versuchsbeschreibung

1.7 Substanzliste

Die Substanzliste enthält alle Substanzen, die hierin exportiert (s. hierzu Kap. 1.8) oder erstellt wurden, und stellt somit eine Datenbank dar. Sie kann mit der Schaltfläche

Substanzliste (vgl. Abbildung 26) (oder über *Bearbeiten*) aufgerufen werden, so daß auch direkt Substanzen eingetragen werden können.

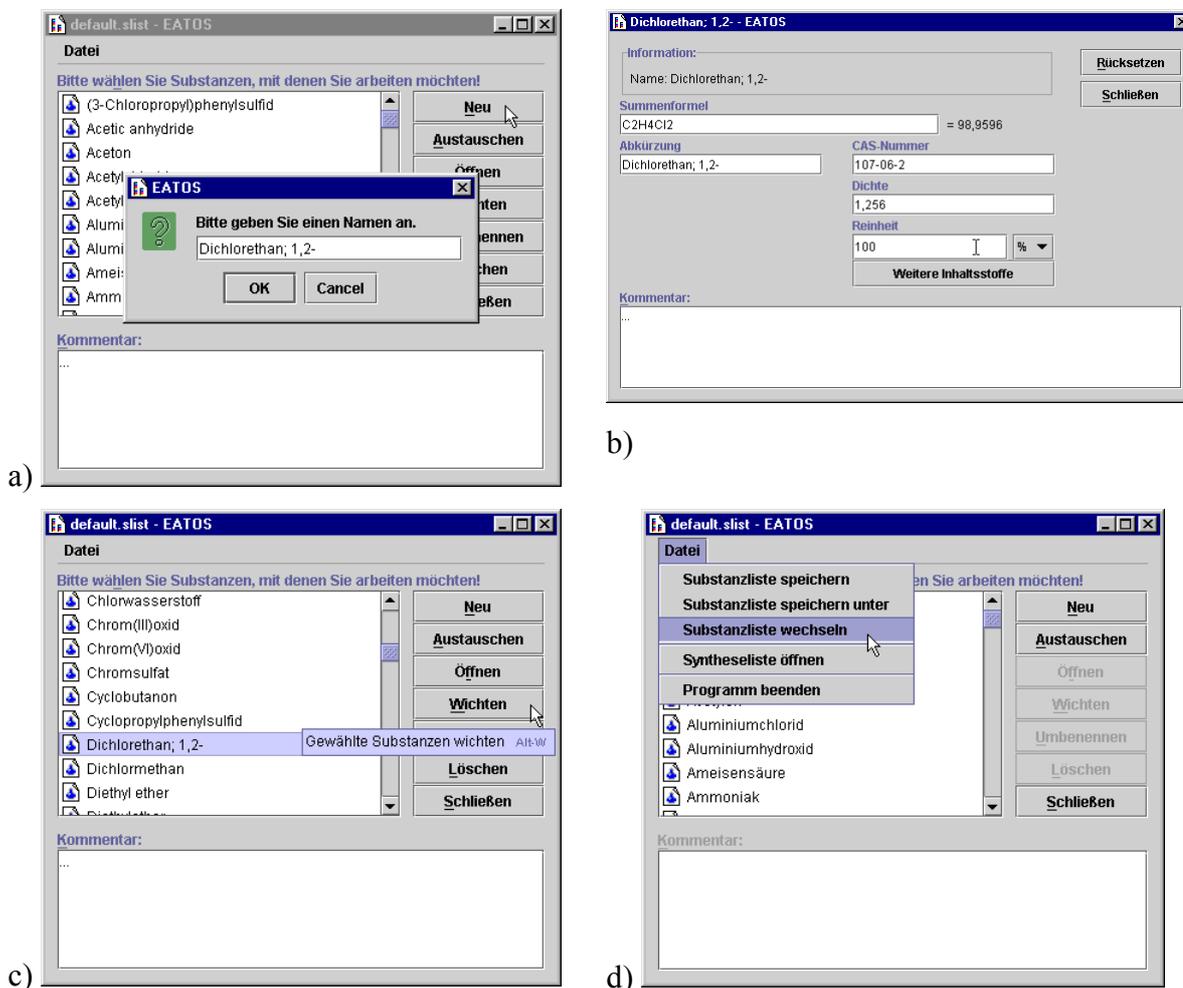


Abbildung 25 Eingabe von Substanzen in die Substanzliste

Über die Schaltfläche *Neu* (Abbildung 25a)) läßt sich eine neue Verbindung eintragen, die über die Schaltfläche *Öffnen* weiter spezifiziert werden kann (Abbildung 25b)) inklusive toxikologischer und anderer wichtungsrelevanter (vgl. Kap. 1.5) Daten, die nach Betätigen der Schaltfläche *Wichten* (Abbildung 25c)), wie beschrieben, eingetragen werden können (s. Abbildung 22, S. 34). Generell können unterschiedliche Substanzlisten (z.B. ausschließliche Lösungsmittel- oder Katalysatorensubstanzlisten) erstellt werden, auf die über *Datei* und *Substanzliste wechseln* zugegriffen werden kann (Abbildung 25d)).

1.8 Importieren und Exportieren

Eine äußerst bedeutende Funktion in EATOS ist das Importieren und Exportieren von Substanzen und das Importieren von Produkten anderer Synthesen. Dadurch wird es möglich, Substanzen mit sämtlichen substanzspezifischen Daten in die Substanzliste zu exportieren, die somit mit vollem Datensatz anderen Anwendungen zur Verfügung stehen, ohne daß für diese erneut Daten eingegeben werden müssen.

Wenn ein Produkt einer Synthese in einer anschließenden Reaktion erneut umgesetzt wird, so spricht man einer Synthesesequenz, bzw. -kette. Das Edukt in der Folgesynthese ist also das aus der vorhergehenden Reaktion resultierende Produkt, das mit allen Synthesedaten durch die Schaltfläche *Importieren* importiert werden kann. Diese Verknüpfungsmöglichkeit erlaubt die Konstruktion komplexer Synthesesequenzen. Diese Verknüpfung kann sowohl für Edukte als auch für Katalysatoren vorgenommen werden, so daß der Aufwand zur Herstellung von Katalysatoren ebenfalls berücksichtigt werden kann.

1.8.1 Exportieren von Substanzen in die Substanzliste

Substanzen können durch Betätigen der Schaltfläche *Exportieren* mit sämtlichen Daten in die Substanzliste (default.slist) exportiert werden.

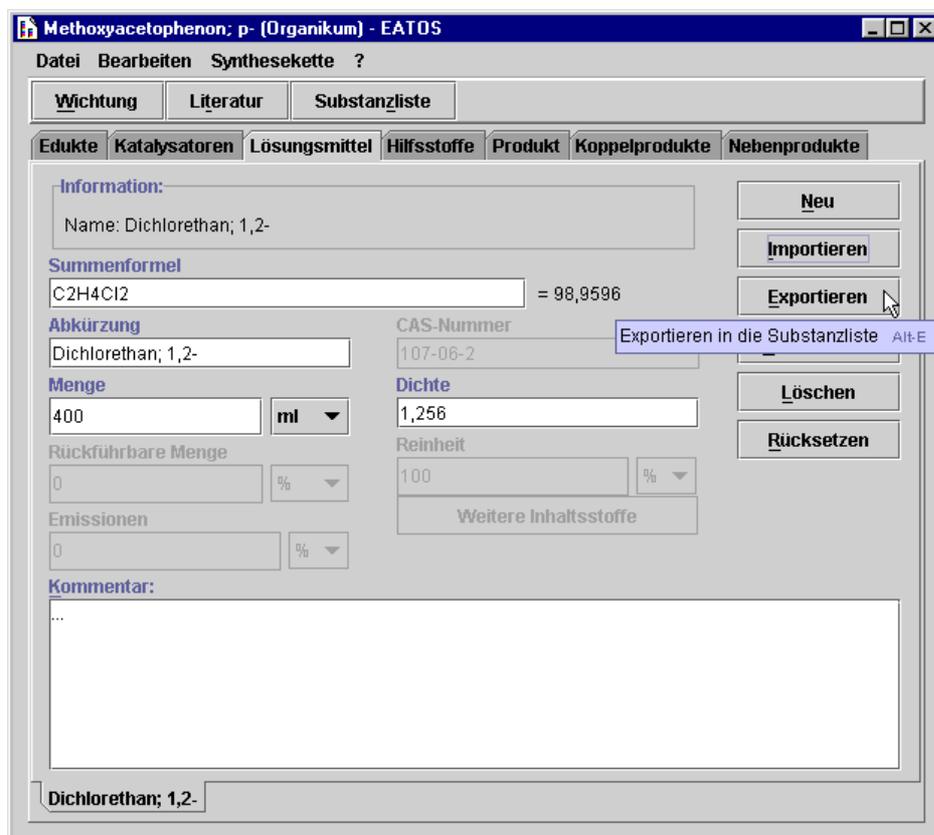


Abbildung 26 Exportieren von Substanzen in die Substanzliste

1.8.2 Importieren von Substanzen aus der Substanzliste und von Produkten

Die Eingabe von Substanzen und zugehöriger Daten in die Eingabezeilen des Programms kann manuell erfolgen oder durch Importieren aus der Substanzliste, wenn die Substanz bereits einmal eingegeben und in die Substanzliste exportiert oder dort direkt eingetragen wurde. Bei jeder Gelegenheit, eine Substanz einzutragen, besteht die Möglichkeit, die Schaltfläche *Importieren* anzuwählen. Dabei wird ein Fenster geöffnet, das unterschiedliche Ansichten besitzen kann. Wird nach Betätigen der Schaltfläche *Neu* (außer im Registerblatt *Katalysatoren*) über *Importieren* (siehe z.B. Abbildung 7, S. 20) die Substanzliste geöffnet, so erscheint ausschließlich diese mit sämtlichen eingetragenen Substanzen (Abbildung 27a)). Nach Anwählen einer Substanz kann diese importiert werden. Dieselbe Vorgehensweise im Registerblatt *Katalysatoren* eröffnet die Möglichkeit, Syntheseprodukte mit sämtlichen Daten zu importieren, die in dem geöffneten Projekt eingetragen sind. Im bisher verfolgten Beispiel handelt es sich um das Projekt *Methoxyacetophenon; p-project* (Abbildung 27b)). Gleiches gilt für Importieren von Substanzen bei der Eingabe der stöchiometrischen Gleichung (vgl. Abbildung 3, S. 14), wenn eine Synthesesequenz erstellt werden soll.

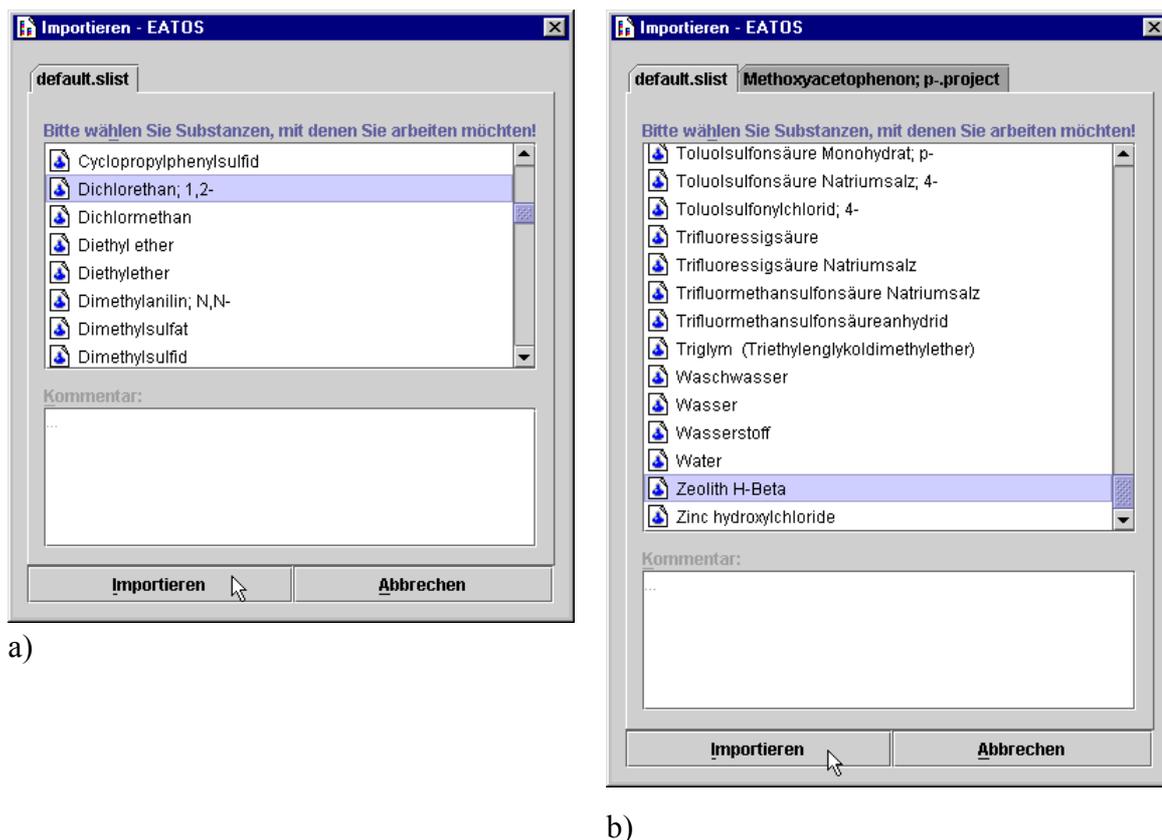


Abbildung 27 Importieren von Substanzen aus der Substanzliste

Importieren kann auch dann angewählt werden, wenn bereits eine Substanz eingetragen ist. In diesem Fall werden außer dem Kommentarfeld im Registerblatt sämtliche bereits eingetragene Daten mit denen aus der Substanzliste überschrieben. Diese Funktion erlaubt es, im nachhinein Substanzen mit wenigen eingetragenen Daten durch zwischen-

zeitlich in die Substanzliste eingebrachte datenreichere Neueingaben zu ersetzen. Außerdem können Edukte oder Katalysatoren durch Synthesen zu ihrer Herstellung ausgetauscht werden, die im geöffneten Projekt eingetragen wurden. Synthesesequenz können auf diese Weise aufgebaut werden. Um einen raschen Zugriff auf die alternative Neueingabe zu ermöglichen, werden in der Substanzliste nur Substanzen angeboten, die mit den ersten drei Buchstaben der bereits eingetragenen Substanz übereinstimmen. In den Registerblättern *Edukte* und *Katalysatoren* können jedoch lediglich Substanzen mit der identischen Summenformel bzw. mit dem identischen Molekulargewicht ausgewählt werden; andere werden nicht angezeigt (vgl. Abbildung 28).

1.8.3 Synthesesequenzen

Wenn Synthesen Produkte hervorbringen, die als Edukte in anderen erneut eingehen, können diese miteinander verknüpft werden. Voraussetzung ist, daß sich die betrachteten Synthesen im selben Projekt befinden. Beispielsweise können bereits in anderen Projekten eingetragene Synthese über die Funktion *Austauschen* in das geöffnete Projekt kopiert werden. Synthesen werden miteinander verknüpft, indem Edukte nicht manuell eingetragen werden, sondern über die Schaltfläche *Importieren* aus dem Projekt eingebunden werden (s. voriges Kapitel 1.8.2). Bereits eingetragene Substanzen können, außer dem Kommentarfeld, überschrieben werden. Abbildung 28 zeigt, wie beispielsweise das Edukt Anisol als Produkt aus einer anderen Synthese mit dem Namen '*Anisol (Organikum)*' importiert wird.

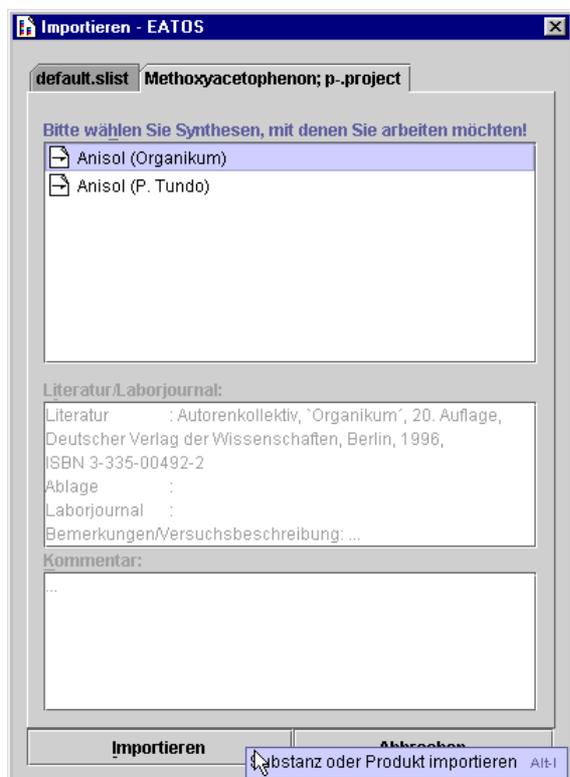
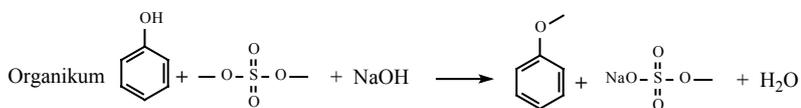


Abbildung 28 Importieren eines Produkts einer anderen Synthese des Projekts

Bei der importierten Synthese von Anisol handelt es sich um die im Organikum (20. Auflage, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1996, ISBN 3-335-00492-2) beschriebenen Methylierung von Phenol mit Dimethylsulfat.



Formelschema 3 Synthese von Anisol

Im Registerblatt Anisol der Synthese 'Methoxyacetophenon; p- (Organikum)', in das die Synthese von Anisol importiert wurde, taucht im Informationsfeld neben dem Substanznamen der Zusatz 'importiert aus "Anisol (Organikum)'" auf (Abbildung 30, S. 58).

Dem Synthesenamen - im verfolgten Beispiel 'Methoxyacetophenon; p- (Organikum)' - wird ein modifiziertes Symbol vorangestellt, das anzeigen soll, daß es sich um eine Synthesesequenz handelt:

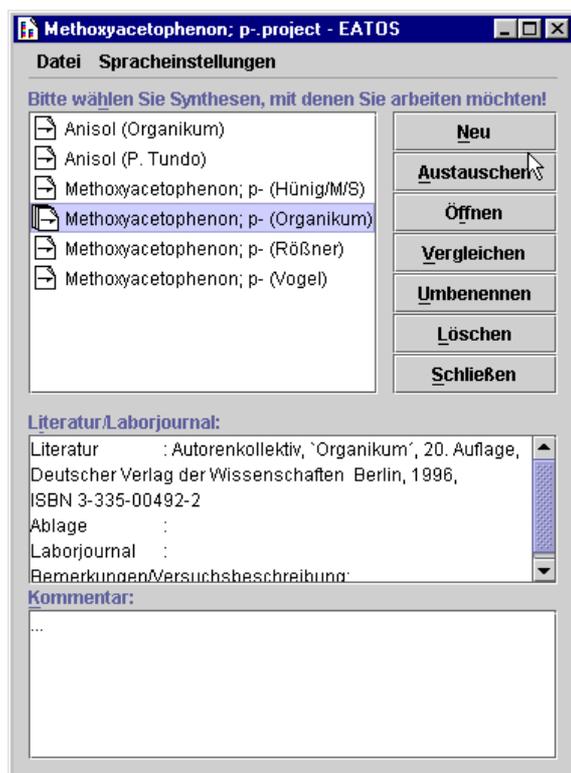


Abbildung 29 Projekt mit Synthesen und einer Synthesesequenz (markiert)

Nebenbei sei erwähnt, daß abgesehen von der Erstellung von Synthesesequenzen, auch Katalysatoren als Produkte anderer Synthesen importiert werden können.

Nach Erstellen von Synthesesequenzen besteht nach wie vor die Möglichkeit, in jeder einzelnen Synthese Daten mit entsprechenden Folgen für die gesamte Synthesesequenz bzw. -kette zu ändern. Die Änderung wirkt sich in der Berechnung jedoch nicht

unmittelbar aus. Die Aktualisierung wird über *Synthesekette* in der Kommandozeile vorgenommen:

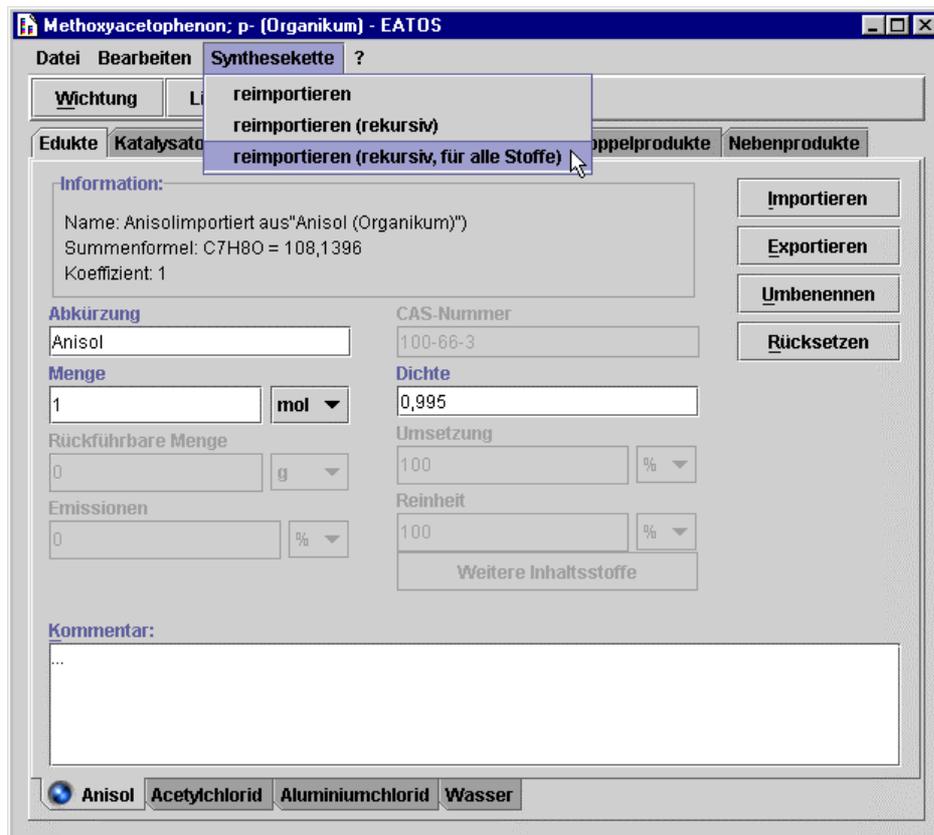


Abbildung 30 Reimportieren von Synthesen vorhergehender Syntheseschritte

Reimportieren bedeutet, daß der Syntheseschritt zur Herstellung der Substanz des geöffneten Registerblattes erneut importiert und damit dessen Datensatz aktualisiert wird. Soll die gesamte Synthesesequenz zur Herstellung der Substanz aktualisiert werden, wird *reimportieren (rekursiv)* gewählt. Sollen dabei auch sämtliche andere Substanzen, deren Registerblatt nicht geöffnet ist, ebenfalls aktualisiert werden, wird *reimportieren (rekursiv, für alle Stoffe)* gewählt.

1.9 Darstellung der Ergebnisse

Die graphische Darstellung der Materialflüsse durch interaktive Säulendiagramme kann entweder ausgehend von einer geöffneten Synthese (s. z.B. Abbildung 5, S. 16) über *Bearbeiten* und *Berechnen* erfolgen, oder ausgehend vom Projektfenster (s. Abbildung 31) über *Vergleichen*. Im ersten Fall werden Daten ausschließlich von der geöffneten Synthese graphisch dargestellt, während im zweiten Fall mehrere Synthesen angewählt und gemeinsam graphisch wiedergegeben werden können. Im vorliegenden Beispiel sollen vier verschiedene in Formelschema 4 dargestellte Synthesen von p-Methoxyacetophenon miteinander verglichen werden.

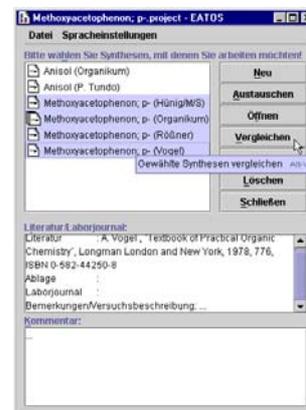
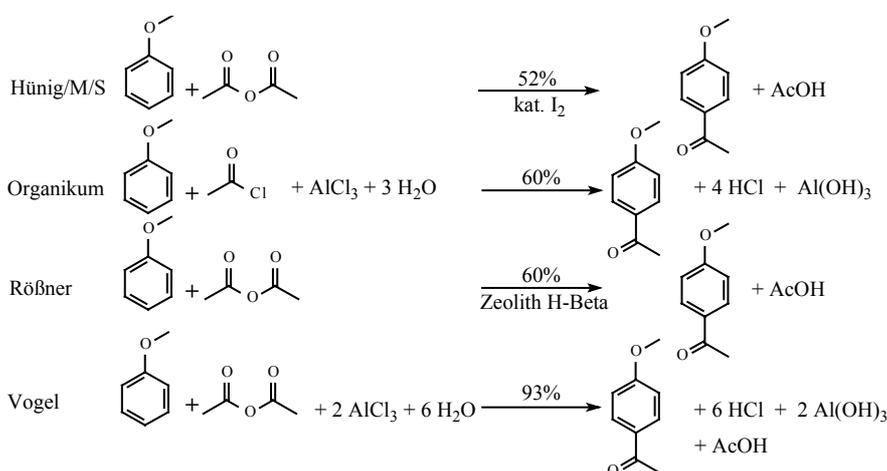


Abbildung 31 Vergleichen von Synthesen



Formelschema 4 Synthese von p-Methoxyacetophenon gemäß a) S. Hünig, G. Märkl, J. Sauer, Integriertes organisches Praktikum, Verl. Chemie, Weinheim [u.a.], **1979**, ISBN 3-527-25473-0; b) Organikum: organisch-chemisches Grundpraktikum, 21., neu bearb. und erw. Aufl., (Hrsg.: H.G.O. Becker), WILEY-VCH, Weinheim [u.a.], **2001**, ISBN 3-527-29985-8; c) 10 g Anisol (92.5 mmol), 10.39 g Essigsäureanhydrid (101.7 mmol) und 1.33 g Zeolit H-Beta (Südchemie, München) werden 24 Std. gerührt und unter Rückfluß erhitzt. Der Katalysator wird abfiltriert, mit 5 ml Ethanol gewaschen und das Produkt im Vakuum fraktionierend destilliert. Die Ausbeute an p-Methoxyacetophenon beträgt 8.34 g \cong 60%, vgl. [e,f]; d) Vogel's textbook of practical organic chemistry : including qualitative organic analysis, 4. ed. / rev. by B. S. Furniss, (Hrsg.: A.I. Vogel), Longman, London [u.a.], **1978**, ISBN 0-582-44250-8; e) U. Freese, F. Heinrich, F. Rößner, Acylation of aromatic compounds on H-Beta zeolites, Catalysis Today **1999**, 49, 237–244; f) S. Ratton, Heterogeneous catalysis in the fine chemicals industry: From dream to reality, Chimica Oggi-Chemistry Today **1998**, 16(3-4), 33–37

Im graphischen Vergleich werden zu allen angewählten Synthesen die Kennzahlen S^{-1} (Input [kg] / kg Produkt), Umweltfaktor E (Abfall [kg] / kg Produkt), Umweltindex EI_in (mit Belastungsfaktoren gewichtetes S^{-1}) und Umweltindex EI_out (mit Belastungsfaktoren gewichtetes E) dargestellt (Abbildung 32). Der Platz für die Wiedergabe des Synthesenamens ist begrenzt, weshalb sich eine kurze Bezeichnung wie

z.B. a), b) usw. anbietet. Die Abbildung 32 zeigt die Reihenfolge der in Formelschema 4 angegebenen Synthesen. Die verschiedenfarbigen Säulensegmente repräsentieren u.a. die Kategorien Edukte, Koppelprodukte, Nebenprodukte, usw. Unter **Säulen** kann die darzustellende Kennzahl ausgewählt werden. Neben den vier genannten Kennzahlen können auch mit dem Ökonomischen Index (Cost index, CI) die Kosten bestimmt werden. Mit ? in der entsprechenden Abbildung 33 (S. 60) sind die *Hilfe*, ein schematischer Überblick über die *Massenbilanzbereiche* (Abbildung 13, S. 25) und Informationen über das Programm *EATOS* abrufbar.

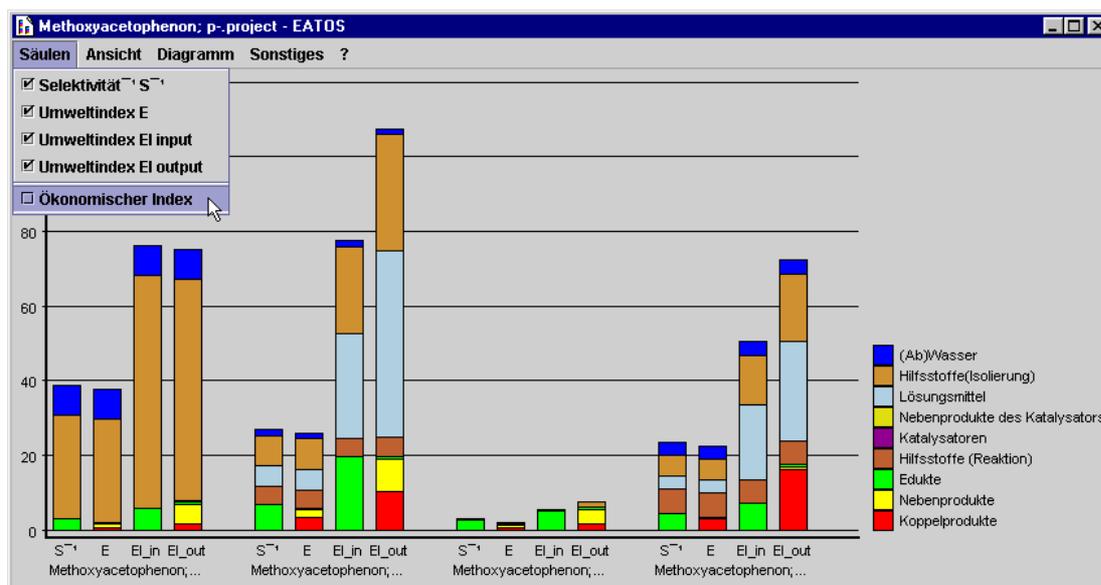


Abbildung 32 Graphische Darstellung von vier Kennzahlen zu vier Synthesen von p-Methoxyacetophenon

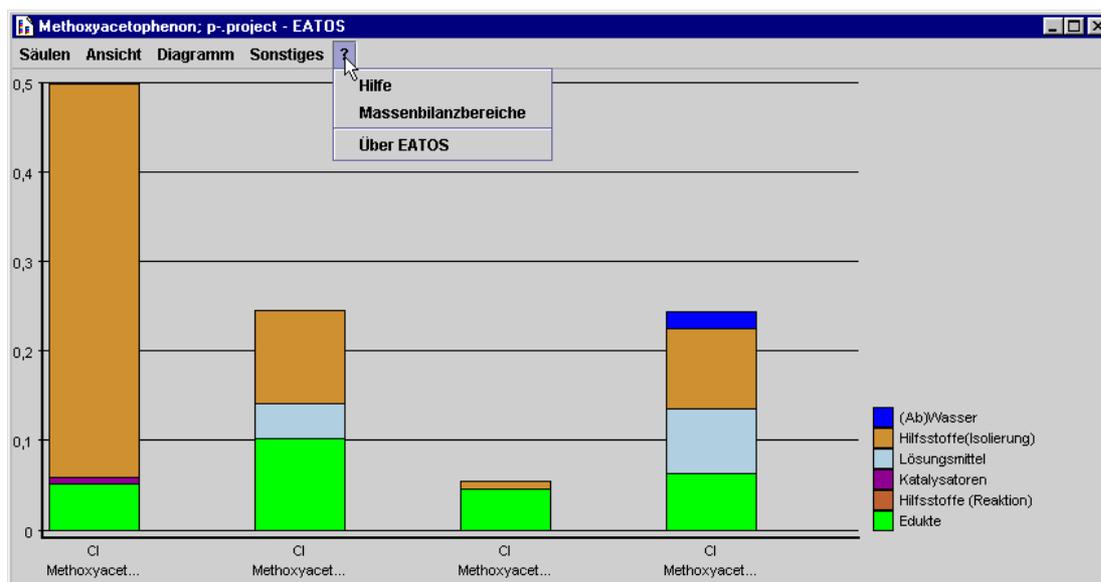


Abbildung 33 Ökonomischer Index (CI) von vier Synthesen von p-Methoxyacetophenon

Von wirtschaftlicher Seite sind Substanzpreise in Hinsicht auf die Bestimmung der Materialkosten pro Produktionseinheit interessant. Daher ermöglicht EATOS die

Berechnung und differenzierte Wiedergabe der verschiedenen Eingangsposten, wie Substrate, Lösemittel usw., durch den sogenannten Ökonomischen Index.

Unter *Ansicht* erfolgt die Einstellung der Wiedergabe der berechneten Daten im Säulendiagramm. So können beispielsweise Hilfsstoffe über *Massenbilanzbereiche* ausgeblendet werden, um das möglicherweise unterschiedliche Informationsniveau von zu vergleichenden Synthesen anzugleichen. Liegen zu einer Synthese nur Daten zu Hilfsstoffen der Reaktion(sführung) vor, während die nötigen Hilfsstoffe zur Isolierung einer anderen Synthese bekannt sind, können diese durch Anwählen von *Reaktion* ausgeblendet werden, um einen Vergleich auf gleichem Informationsniveau zu ermöglichen. Default-Einstellung ist jedoch Abfallbehandlung, so daß zunächst sämtliche Hilfsstoffe stets angezeigt werden.

Substanzen, zu denen bei deren Eingabe rezyklierbare Mengen eingetragen wurden, können unter *Wiedergewinnung* in der graphischen Wiedergabe entweder *nicht* (Default-Einstellung), *gesondert* oder *integriert wiedergegeben* werden. Im Falle der gesonderten Darstellung tauchen diese Substanzen in einer für sie vorgegebenen Kategorie oberhalb der übrigen Kategorien auf, um ihren Anteil an dem gesamten Stoffumsatz ermessen zu können.

Die bei der Umsetzung verwendeten Substanzen werden in der Regel in bezug auf die erzeugte Produktmenge standardisiert (d.h. ihre Masse wird durch die Produktmasse geteilt), um einen Ausdruck Substanz [kg] / kg Produkt zu erhalten, der überhaupt erst den Vergleich verschiedener Synthesen ermöglicht. Diese Default-Einstellung kann jedoch unter *Normierung* verändert werden. In dem Registerblatt Koppelprodukte (vgl. Abbildung 16, S. 28) können nutzbare Mengen angegeben werden, und in dem Registerblatt Nebenprodukte (vgl. Abbildung 17, S. 29) können diese als verwendbar gekennzeichnet werden. Diese Mengen können auf verschiedene Weise berücksichtigt werden. Werden sie als Produkte aufgefaßt, können sie unter *Normierung* entweder nur der Kategorie Produkt(e) zugeordnet werden (*nützliche Koppelprodukte anzeigen* oder *nützliche Koppel- und Nebenprodukte anzeigen*) oder sogar in den Standardisierungsprozeß einbezogen werden (*Normierung auf Produkt und nützliche Koppelprodukte bzw. und Nebenprodukte*). Im letzteren Fall werden alle Substanzmengen nicht nur durch die Produktmenge, sondern auch durch die Menge der nützlichen Koppel- und ggf. durch die nützlichen Nebenprodukte geteilt. Die sich daraus ergebene Darstellung vermittelt daher die Relation von aufgewendetem Input und von erzeugtem Abfall zur hergestellten Menge der Produkte. Produkt und ggf. hergestellte nützliche Koppel- und Nebenprodukte können unter *Produkt* angezeigt werden. In diesem Fall taucht eine weitere Kategorie mit dieser Bezeichnung auf.

Analog zur zuvor erläuterten *Wiedergewinnung* können *Emissionen* ebenfalls *nicht*, *integriert* oder *gesondert* wiedergegeben werden. Zudem besteht die Möglichkeit, Emissionen ausschließlich anzuzeigen, wenn entsprechendes Datenmaterial zur Verfügung steht und isoliert von anderen Massenumsätzen betrachtet werden soll.

Die optische Wiedergabe der berechneten Daten läßt sich über **Diagramm** verändern. Die *Legende* kann entweder in Deutsch oder Englisch (jeweils kurz oder ausgeschrieben) erscheinen. Dies ist notwendig, damit englisch sprachige Diagramme in andere Anwendungen exportiert werden können.

Zunächst werden die Ausgabedaten entsprechend der betrachteten Synthesen gruppiert. Die Säulengruppierung kann über *Gruppieren* verändert werden. Durch Anwählen von *nach Index* werden die verschiedenen Säulentypen (S^{-1} , E, EI_in und EI_out) sortiert, so daß unterschiedliche Synthesen hinsichtlich dieser Säulentypen verglichen werden können.

Innerhalb einer Säule kann über *Ordnen* nach Kategorien (Substrate, Lösungsmittel usw.) oder Syntheseschritten geordnet werden. Im zweiten Fall wird eine Synthesesequenz in seine Reaktionsschritte aufgegliedert dargestellt, wodurch besonders anteilsstarke Synthesen identifiziert werden können. Die Unterscheidung der Ordnung nach Kategorien hinsichtlich (*Synthesekette*) bzw. (*letzter Syntheseschritt*) wird ermöglicht, damit die Zielprodukt bildenden Synthesen unabhängig von der ihnen zugrundeliegenden Synthesesequenzen verglichen werden können.

Oft ist von Synthesesequenzen nur die Hauptsynthesekette beginnend bei einem Schlüsseledukt von Interesse. Weitere in diese Hauptsynthesekette einfließende Synthese(kette)n, die die Darstellung von Nicht-Schlüsseledukten beschreiben, werden unter *weitere Synthesen* gefaßt. Unter *Diagramm* und anschließend *Weitere Synthesen* können sie entweder *integriert*, *gesondert* oder *nicht wiedergegeben* werden.

Die Skalierung des Diagramms wird intern nach der höchsten Säule vorgenommen. Ausgesprochen hohe Säulen können daher die interaktive Bearbeitung erschweren, wenn kleinere Segmente dadurch mit dem Cursor nicht mehr anwählbar werden. Deshalb können weniger ausgeprägte Diagrammbereiche über *Skalieren nach maximal der fünft höchsten Säule* in ihrer Darstellung vergrößert dargestellt werden. Der Vergleich des relativen Einflusses von Kategorien untereinander wird durch *Skalieren alle Säulen auf 100%* vereinfacht.

Die Säulen können über *Stil* entweder schwarz-weiß oder auf verschiedene Weisen farbig wiedergegeben werden. Durch *Kippen* werden die Säulen nicht nach oben, sondern nach unten ausgerichtet.

Die Graphik wird über *Exportieren* in eine .bmp-Datei verwandelt und abgespeichert. Die Graphik wird also aus der Anwendung exportiert, um anderen Anwendungen zur Verfügung zu stehen, in die sie eingefügt werden kann.

Sonstiges dient in der Kommandozeile u.a. dazu, sich die den Synthesen zugrundeliegende *Literatur anzeigen* zu lassen, deren Wiedergabe zuvor über *Literatur konfigurieren* voreingestellt werden kann. Ebenso können die stöchiometrischen Synthesegleichungen visualisiert werden. Darin tauchen auch die Atomselektivitäten mit der Abkürzung AS auf. Hierbei gibt es immer zwei Angaben: Zum einen die AS von der in der folgenden Zeile wiedergegebenen Synthese und zum anderen die AS

einschließlich der dieser Synthese zugrundeliegenden Synthesesequenz. Wurde unter *Ansicht Normieren auf Produkt und nützliche Koppelprodukte* gewählt, so werden als nützlich bezeichnete Koppelprodukte in die Bestimmung der Atomselektivität mit einbezogen. Dann wird die AS nicht mehr gemäß $AS = \text{FG Produkt} / \sum \text{FG Edukte}$, sondern gemäß $AS = (\text{FG Produkt} + \text{FG nützlich Koppelprodukt}) / \sum \text{FG Edukte}$ errechnet. Die Genauigkeit der dargestellten Angaben kann über *Nachkommastellen* verändert werden, ebenso wie die Default-Einstellung der *Wichtung der Wichtung* über die entsprechende Schaltfläche (vgl. Kapitel 1.9.1, S. 63).

1.9.1 Wichtung der Wichtung

In Kapitel 1.5 (S. 33ff) sind die 13 Wichtungskategorien beschrieben, die zur Bewertung der Materialströme herangezogen werden können. Ihr jeweiliger Einfluß kann in der graphischen Darstellung, die über *Bearbeiten Berechnen* oder über *Vergleichen* aufgerufen wird, unter *Sonstiges Wichtung der Wichtung* verändert werden.

Abbildung 34 Wichtung der Wichtung

Die Wichtung des Inputs erfolgt zu gleichen Teilen über die Kategorie Ressourceninanspruchnahme und Risiko und die des Abfalls über Humantoxizität (akut), chronische Toxizität, Ökotoxizität und Ozonbildung.

Einerseits ist der Preis die Wirkkategorie für die Ressourceninanspruchnahme und andererseits dient er der Bestimmung des Ökonomischen Index (CI), der unter *Säulen* aufgerufen werden kann.

Unter den Wichtungskategorien können diejenigen mit einem Haken versehen werden, die zur Bildung des Belastungsfaktors beitragen sollen. In den Eingabefeldern kann die im Ausdruck Q_{gesamt} mit 'k' bezeichnete Einflußgröße der angewählten Wichtungskategorien verändert werden; der jeweilige prozentuale Beitrag wird rechts davon wiedergegeben. Im Beispiel der Abbildung 34 sind für die Bestimmung der Outputkategorien Anteile von jeweils 25% wiedergegeben, d.h. $k_1 = k_2 = k_3 = k_4 = 0.25$.

$$Q_{\text{gesamt}} = k_1 \cdot Q_{\text{Humantox.}} + k_2 \cdot Q_{\text{Chronische Tox.}} + k_3 \cdot Q_{\text{Ökotox.}} + k_4 \cdot Q_{\text{Ozonbildung}} \quad \text{mit} \quad \sum_{i=1}^4 k_i = 1$$

Substanzen, deren Beurteilungskategorien unproblematische Werte aufweisen, werden mit einem Belastungsfaktor $Q = 1$ gewichtet, so daß die Größenordnung der Masse stets

erhalten bleibt. Sollen allerdings alle Substanzen ausgeblendet werden, die zu ausgewählten Kategorien keinen Beitrag leisten, kann diesen der Belastungsfaktor $Q = 0$ zugeordnet werden, indem *Q=0 zulassen* angewählt wird. Durch *Aktualisieren* oder *Schließen* wirken sich die Veränderungen auf das vorliegende Säulendiagramm aus.

1.10 Fehlermeldungen

Die Software EATOS wurde dafür entwickelt, komplexe Berechnungen auf der Basis eines geringen Informationsstandes bzw. geringen Datensatzes des Benutzers durchzuführen. Im Zentrum aller Kalkulationen stehen die vom Benutzer eingegebene stöchiometrische Synthesegleichung und die Ausbeute. Nach Eingabe der eingesetzten Substanzmengen werden aus ihnen z.B. die resultierenden Mengen an Koppelprodukte oder Nebenprodukte bestimmt. Dabei wird die der Realität entsprechende Bedingung erfüllt, daß die Masse des Inputs stets genauso groß ist wie die Masse des Outputs. Sollten Eingaben des Benutzers diese Bedingungen nicht erfüllen, weist eine Fehlermeldung auf die Ursache des Problems hin. In dieser Bedienungsanleitung wurden in den jeweiligen Kapiteln entsprechende Hinweise auf die Kalkulationen gegeben, so daß eine Problemlösung nachvollziehbar wird.

In einigen wenigen Fällen prüft das Programm vor der Berechnung nicht auf Vollständigkeit der Daten. So wird z.B. eine Berechnung des Ökonomischen Index (CI) ohne Fehlermeldung durchgeführt (oder auch gar nicht durchgeführt), auch wenn zu einzelnen Substanzen zwar die Preise angegeben wurden, nicht aber die zugrundeliegende Menge. In diesen Fällen wird die Kategorie Preis für die jeweiligen Substanzen nicht berücksichtigt.