

Moleküle in Produkten: Die Hauptemission der chemischen Industrie - wie können sie nachhaltiger werden?

Workshop Nachhaltige Chemie
Arbeitsgemeinschaft Nachhaltige Chemie in der GDCh
Frankfurt/M., 20.3.2007

Prof. Dr. rer. nat. Dipl. Chem. Klaus Kümmerer
Klaus.Kuemmerer@uniklinik-freiburg.de



**Sektion Angewandte
Umweltforschung**

„Die eigentlichen Emissionen der Chemischen Industrie ... sind im Grunde genommen nicht die im Zuge der Produktion entstehenden, mengenmäßig geringen Emissionen, sondern die Produkte selbst.“

Eberhard Weise, ehemaliger Vorstandsvorsitzender der Bayer AG,
in: Held M. (Hrsg.), Leitbilder der Chemiepolitik, Campus Verlag
1991, S. 55-64

Prinzipien der Nachhaltigen Chemie

(Anastas und Warner 1998)

- Atomeffizienz
- Kein/geringer Abfall
- Keine/geringe Mengen Lösungsmittel
- Katalysatoren (Energie sparen)
- Nachwachsende Rohstoffe
- ...
- **Umweltfreundliche Produkte**

Produkte – was ?

- Moleküle als solche
- Mischungen von Molekülen

Nachhaltige Produkte ?

Nachhaltigkeit 1. Ordnung

- Produkte selbst sind nachhaltig **und** tragen zur Nachhaltigkeit bei.

Nachhaltigkeit 2. Ordnung

- Produkte selbst nicht nachhaltig, tragen aber zur Nachhaltigkeit bei.
- Produkte selbst nachhaltig, tragen aber nicht zur Nachhaltigkeit bei.

Nachhaltige Produkte - Wie?

Molekulares Design

- Benign by Design: Struktureigenschaftsbeziehungen

Produktdesign – Formulierung

- Materials by Design: Design von Prozessen präzise auf die geforderten Produkteigenschaften hin eingestellt
- Produktformulierungen: Kenntnisse über Wechselwirkungen der Komponenten, Kommunikation über Qualität und Risiken

Nachhaltige Produkte - das Ganze!

Nicht nur in Einzelmolekülen oder Produkten
denkend: Gesamtstoffströme nicht aus
dem Blick verlieren!!!

Nachhaltige Funktionalität

Nachhaltigkeit 1. Ordnung:

- Umfasst gesamten Lebenszyklus
- Verbesserte Funktionalität

Nachhaltige Funktionalität

**Möglichst vollständige Abbaubarkeit/
Mineralisierung nach der Anwendung ist
Teil der Funktionalität!**

Nachhaltige Funktionalität

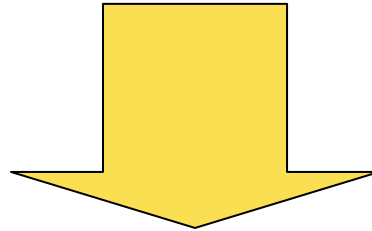
Nachhaltigkeit 2. Ordnung:

Chemical products should be designed to preserve efficacy of function while reducing toxicity.

Paul Anastas und John Warner
4. Prinzip Green Chemistry

Ansatz: Rationales Design

Vom Lebenszyklus eines Moleküls her denkend



Life Cycle Assessment für Moleküle und ihre Funktionalität

Randbedingungen und notwendige Eigenschaften für:

- Rohstoffe
 - Synthese
 - Produktion
 - Anwendung
 - Verbleib
-

**Ein schlauer Mensch löst ein
Problem. Ein weiser Mensch
vermeidet es.**

Albert Einstein

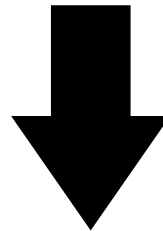
Worin besteht das Problem?

Persistenz von Chemikalien in der Umwelt!

POPs, vPvT, vBvPvT

Ziel

**Stoffe, die ihren Anwendungszweck
möglichst gut erfüllen
und gleichzeitig umweltverträglich sind**



nach Gebrauch leicht
(schnell, möglichst vollständig)
abbaubar

„Wirksamkeit“ und Abbaubarkeit

Ein grundsätzlicher Widerspruch?

Wirksam und Abbaubar!

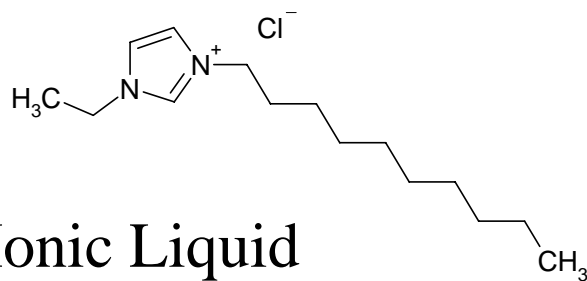
Geht das?

Gezielte Entwicklung umweltverträglicherer
Arzneimittel auf Basis nachwachsender Rohstoffe
als ein neues, richtungweisendes Konzept für eine
nachhaltige Chemie

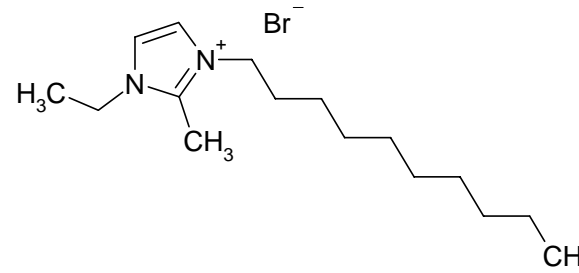


Stabilitätsfaktoren Nutzung vs. Umwelt

- **pH-Wert,**
- **Redoxpotential**
- **Konzentration**
- **Licht (Intensität und spektrale Verteilung)**
- **Feuchtigkeit**
- **Mikrobiologie** (z.B. Art und Anzahl von Bakterien)
- **Temperatur**
- **.....**



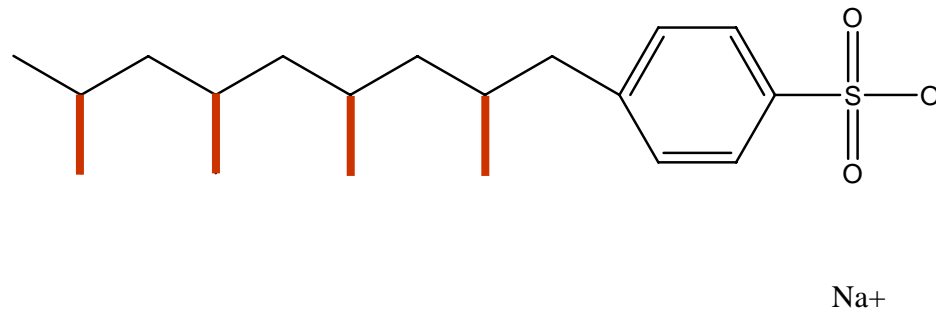
Ionic Liquid



Patented plant growth regulator

Gezielte Verbesserung der biologischen Abbaubarkeit: Tenside TPS vs. LAS

TPS: 1955, nicht biologisch abbaubar



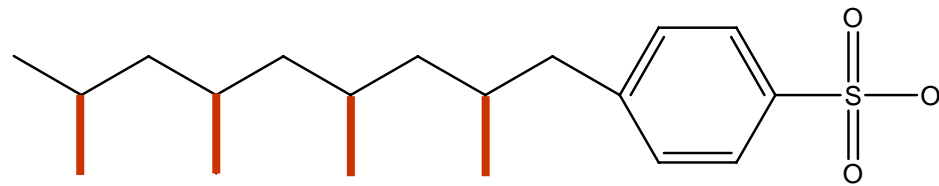
Folgen des schwer abbaubaren TPS



Quelle: Werksarchiv
Henkel KGA

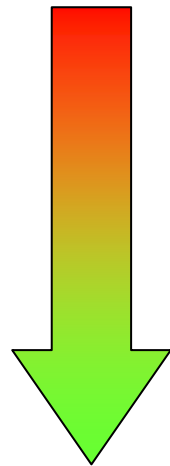
Gezielte Verbesserung der biologischen Abbaubarkeit: Tenside TPS vs. LAS

TPS: 1955, nicht leicht biologisch abbaubar

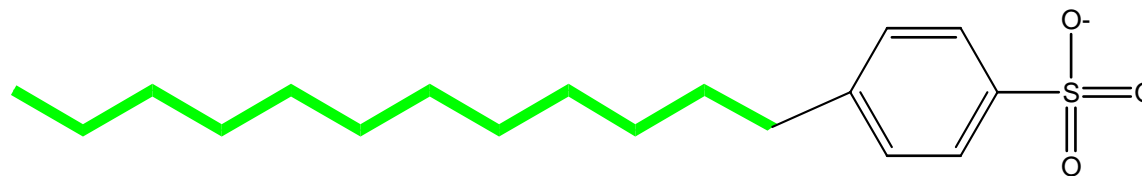


Na+

1962: Wasch- und Reinigungsmittelgesetz

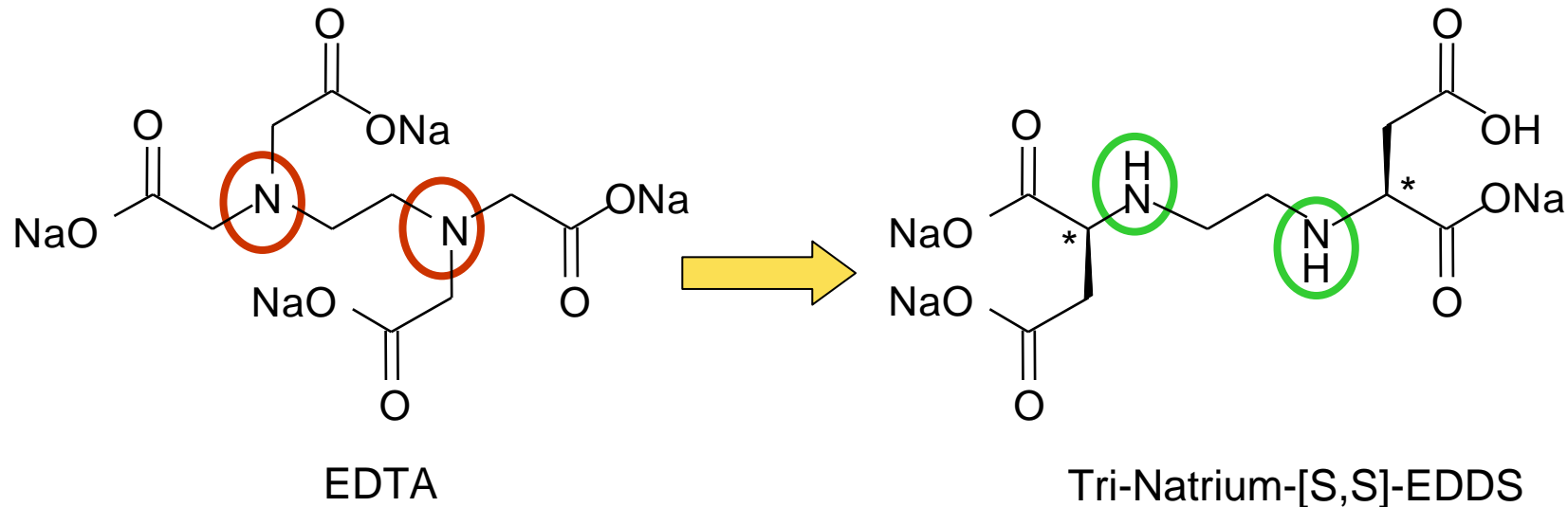


Na+



LAS: vor 1962, leicht biologisch abbaubar

Gezielte Verbesserung: Komplexbildner EDTA vs. S,S-EDDS



nicht biologisch abbaubar,
remobilisiert Schwermetalle aus
Sedimenten

sehr guter Komplexbildner
leicht biologisch abbaubar,
Strukturisomeres von EDTA

 Dixon N. 2004 (<http://www.euconferences.com/chemicalsmanagement04/day2presentations.htm>)

Weitere zahlreiche Beispiele:

Schädlingsbekämpfungsmittel, z.B.

Chlororganika → Phosphororganika →

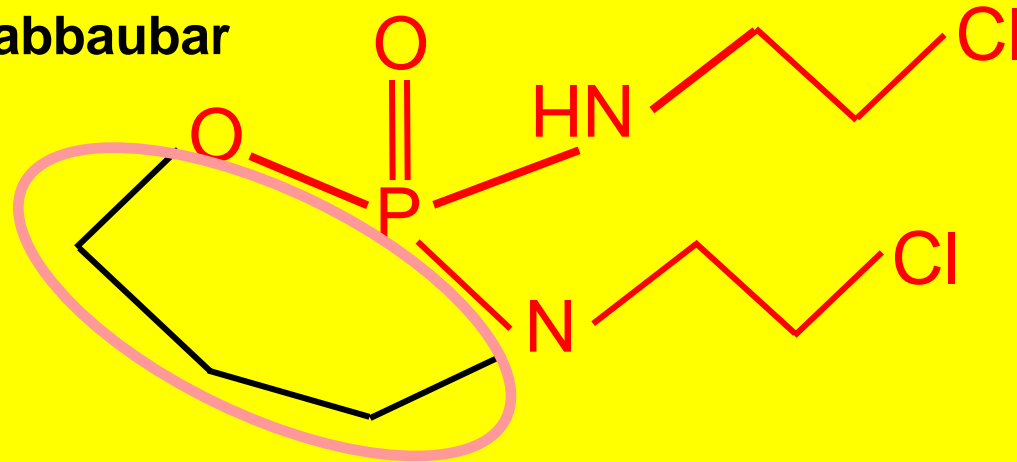
Carbamate → Pyrethroide →

- Spinosoide (z.B. Spinosad^{*TM}),
- Acylharnstoffe (z.B. Hexoflumuron^{*TM})

*Green Chemistry Award der US-EPA 1999, 2000

: Lopez et al., Green Chem., 7, 431-442, 2005

nicht biologisch abbaubar

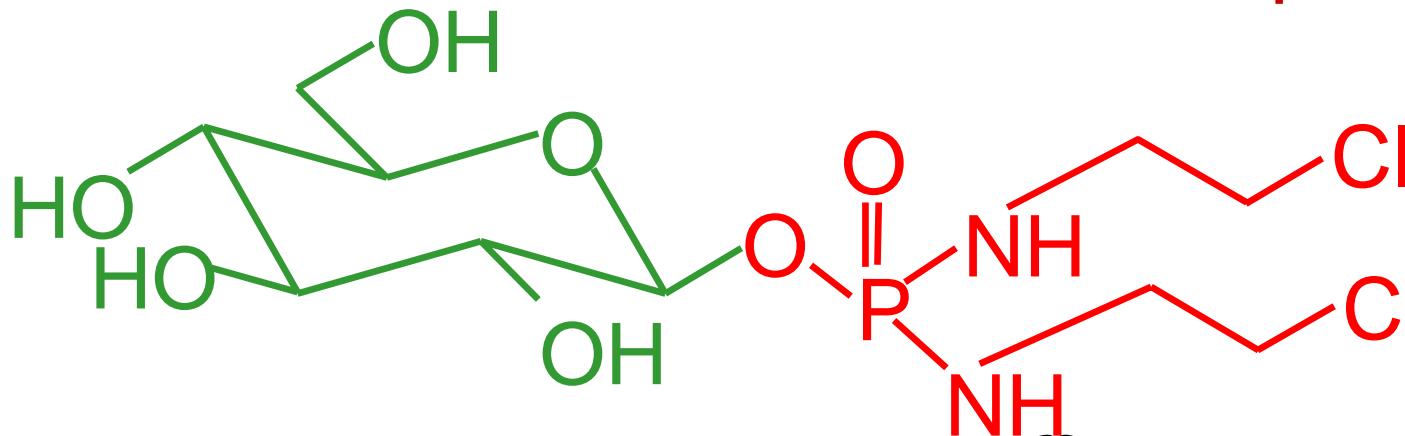


Ifosfamid

Beibehalten der Wirkstruktur

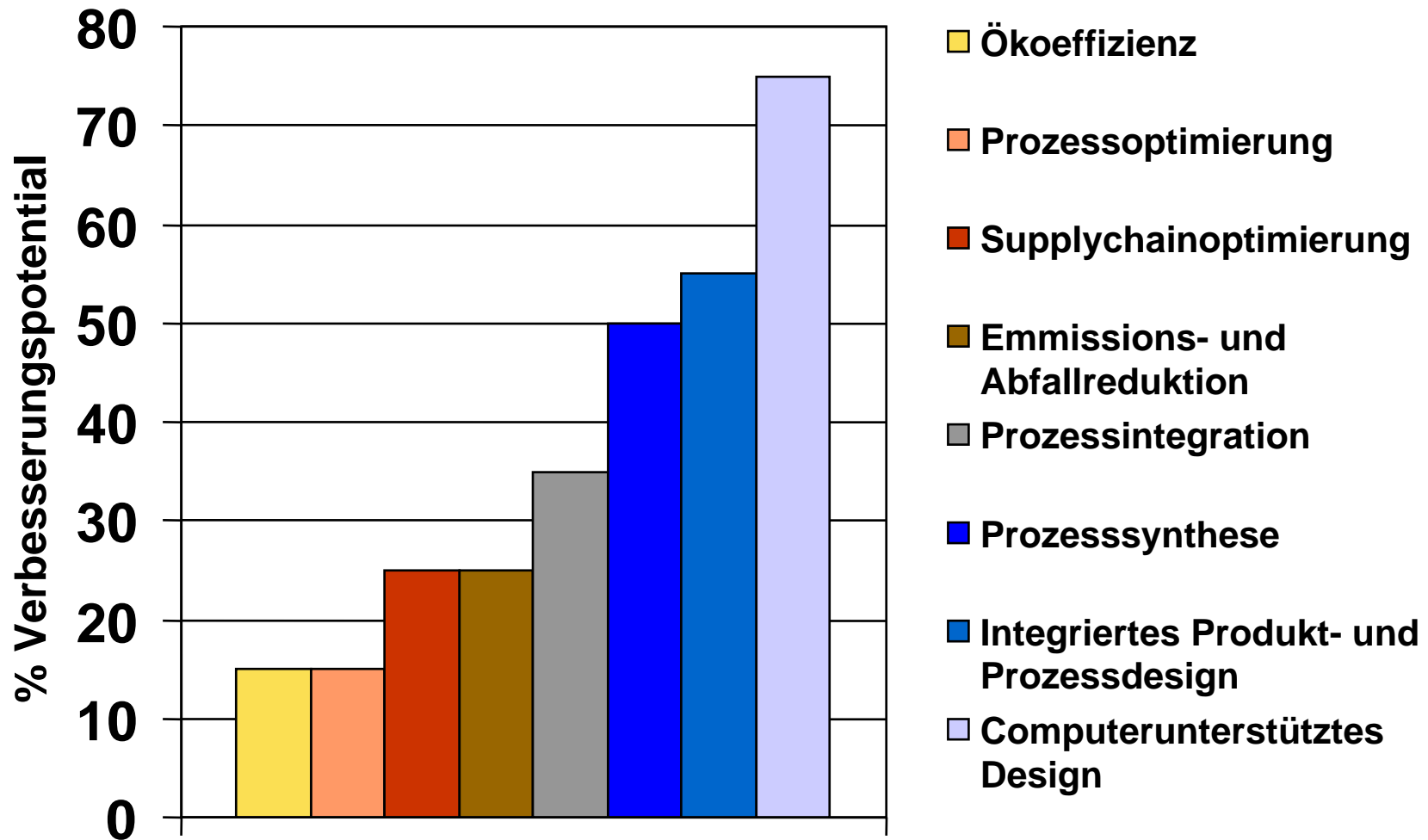
β -D-Glc-IPM („Glufosfamid“)

sehr gut biologisch abbaubar,
verbesserte Resorption im Darm







Wießler et al. 1998, Kümmerer et al. 2000

Verbesserungspotentiale



Potential

- **... Forschungsschwerpunkte unter anderem ... die Intensivierung der Forschung im Bereich der Entwicklung sicherer Ersatzstoffe ... Langlebigkeit ... nicht ausreichend kontrolliert werden können ...**
 Agenda 21, Rio 1992, 19.21
- **... innerhalb einer Generation sollten ausschließlich Chemikalien produziert und angewendet werden, die keine nachteilige Wirkung auf die Umwelt haben.**
 EU-Parlament and EU-Kommission 2002
- **... Mittel- und langfristig wird es eine Zunahme von Innovationen und ökonomische Vorteile für gesunde und umweltfreundliche Produkte geben.**
 Sachverständigenrat für Umweltfragen 2003
- **... Molekulares Design für Nachhaltigkeit beinhaltet ... die Entwicklung ganzheitlich optimierter molekularer Produkte.**
 SusChem Implementierungsplan für Deutschland 2006

