

Ablauf Eintragung neuer Gebinde/Stoffe/Mischungen

Neues Gebinde anlegen:

1. <Chemikalien>/<Neues Gebinde>
2. Unter Allgemein, im bei <Suchen> die **CAS/Namen** des Stoffs eingeben, die sich öffnende Auswahlliste zeigt, ob der Reinstoff/Lösung/Mischung bereits vorhanden ist. Wenn ja, dann den korrekten Eintrag auswählen (Lösungen in unterschiedlichen Lösemitteln und Mischungen haben meist andere Sicherheitsdaten als der Reinstoff). Ist der Stoff noch nicht in der Datenbank vorhanden findet sich unten auf der Seite der Bereich, in dem der Stoff gleich mit angelegt werden kann.
3. Als **Abteilung** muss die entsprechende Arbeitsgruppe/Bereich ausgewählt werden.
4. Bei **Gebindegröße** müssen die Anzahl und die Masse oder das Volumen angegeben werden.
5. Unter **Lagerort** muss ein sinnvoller Lagerort ausgewählt werden, dabei sollte das Feld in Fach möglichst auch genutzt werden.
6. Weitere Informationen können hilfreich sein, um z.B. ein Gebinde zu identifizieren (**Behälterart, Reinheit, Lieferant**) sind aber nicht verpflichtend. Der **Lieferant** (oder **Hersteller**, wenn bekannt) kann, unter Bestellung (rechter Bildschirmrand, wenn geschlossen, sonst unten) eingetragen werden. Die **Reinheit** wird im Laborjournal verwendet, sollte also korrekt oder nicht eingetragen werden. Bleibt das Feld leer wird als Reinheit im Laborjournal 100% angenommen.

Neue Reinstoffe anlegen:

1. <Chemikalien>/<Neue Substanz>
2. **CAS** eingeben, dann über das Feld <Daten von Anbieter holen> und in dem sich öffnenden Fenster, eine Quelle für die Sicherheitsdaten wählen. Es sollte möglichst zunächst nur eine Quelle gewählt werden, denn meist ergeben sich dann nicht zu viele Dubletten oder Inkonsistenzen in den Sicherheitsdaten und Eigenschaften. Als Quelle ist der Lieferant der Substanz oder einer der großen Lieferanten zu wählen. Zum Schluss müssen alle Sicherheitsdaten und Moleküleigenschaften nochmal überprüft werden. Werden keine Quellen zur Extraktion gefunden müssen die Daten natürlich, anhand von Daten des Lieferanten (SDB) oder Gestis Daten, manuell eingegeben werden.
3. Liste der **Namen/Synonyme** bereinigen (nur gebräuchliche und sinnvolle Begriffe) es sollten sowohl deutsch wie auch englische Namen eingetragen werden. Der Punkt in der linken Spalte markiert den **Standard-Namen**.
4. Unter Allgemein, muss eine korrekte **Strukturformel** vorhanden sein (Summenformel/MW werden daraus berechnet und im Laborjournal verwendet), die **Dichte** muss überprüft und korrigiert oder gelöscht werden. (Die Dichte-Werte werden von Laborjournal verwendet). Als **Kommentar** sollten Informationen wie luftempfindlich, hygroskopisch, lichtempfindlich ... eingetragen werden (SDB Kap. 7.2 Lagerungsbedingungen). Wird als Lagertemperatur nicht RT empfohlen (Gebinde oder SDB Kap. 7.2) muss der Lagertemperaturbereich angegeben werden. Als Abteilung sollte für allgemein-gepflegten Stoffe <everyone> (Standard) ausgewählt sein ansonsten die entsprechende Arbeitsgruppe/Bereich ausgewählt werden. Im letzteren Fall muss die regelmäßige Aktualisierung der Sicherheitsdaten natürlich von der Arbeitsgruppe durchgeführt werden.
5. Sicherheitsdaten überprüfen und korrigieren: Sinnvoll sind meist die Daten von Merck oder Sigma. Die **GHS-Symbole, Signalwort, H-Sätze** (SDB Kap. 2.2+2.3) und **Lagerklasse** (oft SDB Kap. 7.2), die Liste der **P-Sätze** sollte so kurz wie möglich aber so lang wie nötig sein. Die Lagerklasse wird weiter unten bei den Eigenschaften eingetragen/korrigiert. Die **CMS-Klassen** überprüfen und korrigieren, oft fehlt ein A oder B (Info's finden sich im SDB Kap. 2.1 Einstufung ...). Die CMS-Klasse lässt sich auch über die H-Sätze herleiten. VO (EG) 1272/2008 Anhang VII, Tabelle 1.1.
6. Physikalische Daten, wie: **Siede-/Schmelzpunkt, Brechungsindex** und **Aggregatzustand** sollten überprüft und korrigiert oder gelöscht werden.
7. Unter **Eigenschaften** können sich neben der Lagerklasse auch weitere hilfreiche Daten eingetragen werden. Es finden sich hier auch alle, von den Anbieter bezogenen, Eigenschaften und auch Sicherheitsdaten nochmals inkl. der Quellenangaben. Hier sollten sich widersprechende Daten oder unplausible Daten korrigiert oder entfernt werden. (vergl. SDB Kap. 9, Kap. 10, Kap. 14)

8. Werden die Daten manuell eingetragen muss mindestens ein deutsches oder englisches **SDB** hinzugefügt werden (ideal englisch und deutsch). Beim Hinzufügen muss die **Quelle** (des SDB), wenn möglich die **URL** (wird dann automatisch heruntergeladen), die korrekte **Sprache** und das **Datum der letzten Überprüfung** (Anfang SBD) eingetragen werden. Kann keine URL angegeben werden muss das SDB als PDF heruntergeladen oder gescannt werden und wird <hochgeladen>.

Lösungen/Mischungen:

Da Lösungen/Mischungen andere Eigenschaften und Sicherheitsdaten haben als der Reinstoff, müssen für Lösungen/Mischungen eigene Substanz-/Stoff-Einträge angelegt werden. Z.B. Salzsäure, HCl-Gas hat andere Eigenschaften und Gefährdungen als rauchende Salzsäure (37% in Wasser) oder als 1M HCl (in Wasser oder in Methanol). Bei wässrigen HCl Lösungen wird die Gefährdung bei hoher Konzentration durch die HCl bestimmt, die Gefährdung verschwindet aber mit abnehmender Konzentration in der Regel. Die Gefährdung von methanolischer HCl Lösung wird aber bei hoher Konzentration von HCl und Methanol bestimmt, bei abnehmender Konzentration bestimmt weiterhin das Methanol die Gefährdung.

Wenn der Reinstoff stabil und bekannt ist oder verkauft wird, sollte zunächst dieser als neue Substanz angelegt werden. Es wird danach die Lösung/Mischung als neue Substanz angelegt und dazu entsprechenden Gebinde. Ggf. werden bereits bestehende Gebinde der Lösung/Mischung können dann dem entsprechenden Substanz-/Stoffeintrag zugeordnet.

Neue Lösungen/Mischungen anlegen:

1. <Chemikalien>/<Neue Substanz>
2. **CAS** eingeben, dann <Daten von Anbieter holen>, dabei werden allerdings meist die falschen Daten (Reinstoff oder anderes Lösungsmittel) eingetragen, es muss also viel korrigiert werden.
3. Für derartige Einträge sollte immer der Haken bei "**Nur manuell aktualisieren**" gesetzt werden.
4. Die Liste der **Namen/Synonyme** korrigieren/ergänzen (nur gängige und sinnvolle Begriffe) es sollten sowohl deutsch wie auch englische Namen eingetragen werden. Der Punkt in der linken Spalte markiert den **Standard-Namen**. Sinnvoll ist bei Lösungen z.B. Salzsäure (wässrige Lösung) oder Salzsäure (Lösung in Methanol) sowie die jeweiligen englischen Begriffe.
5. Unter Komponenten (rechts neben Namen), werden danach die **Komponenten** der Lösung oder Mischung hinzugefügt. Dazu werden unter <Suchen> die **CAS/Namen** der Komponenten eingeben, in der sich öffnenden Auswahlliste werden die, bereits zuvor als Reinstoff eingetragenen, Komponenten ausgewählt. Danach werden analog **weitere Komponenten** hinzugefügt.
6. Der Konzentrationsbereich muss angegeben werden, für den die eingetragenen Sicherheitsdaten gültig sind (wenn nicht bekannt wird nur die Konzentration eingetragen für die das SDB vorliegt).
7. Aktiviert man das Feld unter dem **Achtungssymbol** werden die Sicherheitsdaten dieses Reinstoffs für die Lösung/Mischung übernommen, ansonsten gelten die Sicherheitsdaten, die später manuell eingetragen werden.
8. Aktiviert man das Feld unter dem **Benzolsymbol** wird die Strukturformel dieses Reinstoffs für die Lösung/Mischung übernommen, ansonsten wird die Strukturformel manuell eingetragen. (Die Strukturformel bei Lösung darf keine Hydrate oder Lösungsmittel enthalten, da ansonsten Umrechnungen zwischen Stoffmengen- und Massenkonzentrationen, im Laborjournal fehlerhaft sind)
9. Alle fehlenden Daten (vergl. "Neuen Reinstoff anlegen") auch die SDB's der Lösung werden manuell eingetragen/hinzugefügt. Die **URL** zum jeweiligen **SDB** ist hier besonders hilfreich. Die fehlenden Daten sind natürlich den korrekten SDB zu entnehmen.

Ist der Reinstoff nicht stabil oder nicht bekannt, kann auf das Anlegen eines Eintrags für den Reinstoffs natürlich verzichtet werden. Es wird dann nur der Eintrag für die Lösung/Mischung angelegt. Auf das hinzufügen der Komponenten muss dann natürlich verzichtet werden (Punkte 5-8), da es ja keinen Eintrag für den Reinstoff in der Datenbank gibt. Ansonsten wird vorgegangen wie für Lösungen/Mischungen beschrieben, das automatisierte Holen der Daten vom Anbieter dürfte in dem Fall aber besser funktionieren. Es sollte trotzdem auch hier der Haken bei "**Nur manuell aktualisieren**" gesetzt werden.