

Schlussbericht, Dezember 2005

# Ökoinventare von petrochemischen Lösungsmitteln

Autoren	Jürgen Sutter, Christian Capello
beauftragte Institution	Gruppe für Umwelt- und Sicherheitstechnologie; ETH Zürich
Adresse	ETH Hönggerberg HCI G 143; 8093 Zürich
Telefon, E-mail,	01 / 633 44 01, christian.capello@chem.ethz.ch,
Internetadresse	<a href="http://www.sust-chem.ethz.ch">http://www.sust-chem.ethz.ch</a>
BFE-Nummern	Projekt: 100970; Verfügung: 151138
Dauer des Projekts	vom 15.09.2004 bis 15.12.2005

## Zusammenfassung

Das Ziel des Projektes „Ökoinventare von petrochemischen Lösungsmitteln“ war, für die in der Schweizerischen chemischen Industrie eingesetzten Lösungsmittel qualitativ hochwertige, homogenisierte Inventardaten zu erarbeiten. Von den wichtigsten 10 Lösungsmitteln sind 5 bereits in der ecoinvent-Datenbank enthalten. Für die verbleibenden 5 Lösungsmittel (Essigester, Ethanol, Tetrahydrofuran, Cyclohexan und Heptan) wurde im Rahmen dieses Projekts eine Datenvollerhebung durchgeführt.

Weitere 40 Lösungsmittel werden in der Schweizerischen chemischen Industrie eingesetzt, wovon 8 in der ecoinvent-Datenbank enthalten sind. Für die fehlenden 32 Lösungsmittel wurden Daten erhoben, soweit sie verfügbar waren. Die fehlenden Daten wurden anhand von Daten ähnlicher Prozessschritte abgeschätzt. Zu diesem Zweck wurden die Produktionsrouten mit den einzelnen Prozessschritten für alle 50 Lösungsmittel untersucht. Dabei lässt sich die Lösungsmittelherstellung im Wesentlichen in 4 Produktionsrouten unterteilen: Methanol-Route, Dampfcracker-Route, BTX-Splitting Route und die Molekularsieb-Route.



## 1 Einführung

Für die Anwendung von Lebenszyklusanalysen (Ökobilanz, LCA) in der chemischen Industrie werden Ökoinventare zur Herstellung der verwendeten Chemikalien benötigt. Hierbei stellt sich aber das Problem, dass noch nicht einmal die Basischemikalien umfassend inventarisiert sind, obwohl in der Schweiz mit dem Projekt ecoinvent ein sehr guter Ansatz besteht. Zu den wichtigsten Basischemikalien in der chemischen Industrie gehören Lösungsmittel (LM), da diese in grossen Mengen gebraucht werden. Inventare der verwendeten Lösungsmittel stehen aber noch nicht in ausreichendem Masse zur Verfügung, wodurch die Anwendung von Ökobilanzen in der chemischen Industrie erschwert wird.

## 2 Zielsetzungen für das Projekt

Im Projekt „Ökoinventare von petrochemischen Lösungsmitteln“ sollten umfassende Ökoinventare von hoher Qualität für die Herstellung der in der Schweizerischen Pharma- und Spezialitätenchemie verwendeten Lösungsmittel erstellt werden, gemäss den Qualitätsrichtlinien von ecoinvent.

Zunächst wurde eine Liste der wichtigen LM erstellt und überprüft, für welche dieser Lösungsmittel Datensätze in ecoinvent bereits enthalten sind.

Für die zehn wichtigsten LM sollen qualitativ hochwertige Inventardaten vorhanden sein. Die Auswahl der wichtigsten Lösungsmittel wurde nach folgenden Kriterien gemacht:

- Die Lösungsmittel müssen mengenmässig bedeutend sein für die Schweizerische Pharma- und Spezialitätenchemie
- Es müssen unterschiedliche Substanzklassen vertreten sein (Aliphate, Alkohole, Aldehyde, Ketone, Ether, Ester, Amine, chlorierte Kohlenwasserstoffe und höherwertige Heterozyklen)
- Es sollen Lösungsmittel von stark unterschiedlichem ökonomischen Wert vertreten sein.
- Lösungsmittel, die als Hilfsstoffe speziell bei Destillationen eingesetzt werden, sollen vertreten sein.

Für die übrigen LM sollten je nach Datenlage Abschätzungen der Elementarflüsse gemacht werden. Dazu sollten die Produktionsrouten aller LM analysiert werden, um ähnliche Produktionsprozesse zu erkennen und fehlende Daten aus Inventaren für vergleichbare Produktionsrouten abzuschätzen.

### 3 Ergebnisse

#### 3.1 LISTE DER LÖSUNGSMITTEL

In den im Projekt beteiligten Unternehmen werden 50 verschiedene organische Lösungsmittel als Synthesereaktionsmedium eingesetzt (vgl. Tabelle 1 im Anhang). In der ecoinvent Datenbank sind davon 14 enthalten.

#### 3.2 DATENVOLLERHEBUNG FÜR DIE 10 WICHTIGSTEN LÖSUNGSMITTEL

In Tabelle 2 (siehe Anhang) sind die 10 wichtigsten LM aufgeführt. Für die Hälfte dieser nach den obigen Kriterien als wichtig eingestuft Lösungsmitteln existieren bereits qualitativ gute Ökoinventare in ecoinvent. Die übrigen Lösungsmittel wurden bis anhin überhaupt nicht oder nur in ungenügender Form bilanziert. Daher wurden in diesem Projekt Datensätze für Cyclohexan, Essigester, Ethanol, Heptan und Tetrahydrofuran erhoben.

Als Beispiel der modularen Inventarerhebung gemäss den ecoinvent Richtlinien wird in Abbildung 1 die Umweltwirkung der Tetrahydrofuran-Herstellung angeführt. Ausgehend von Methanol wurden für jeden weiteren Produktionsschritt über Formaldehyd zu Butylenglykol und schliesslich bis zu Tetrahydrofuran die Inventardaten erhoben. In Abbildung 1 wird deren jeweilige Umweltwirkung als Kumulierten Energieaufwand (CED, cumulative energy demand) dargestellt.

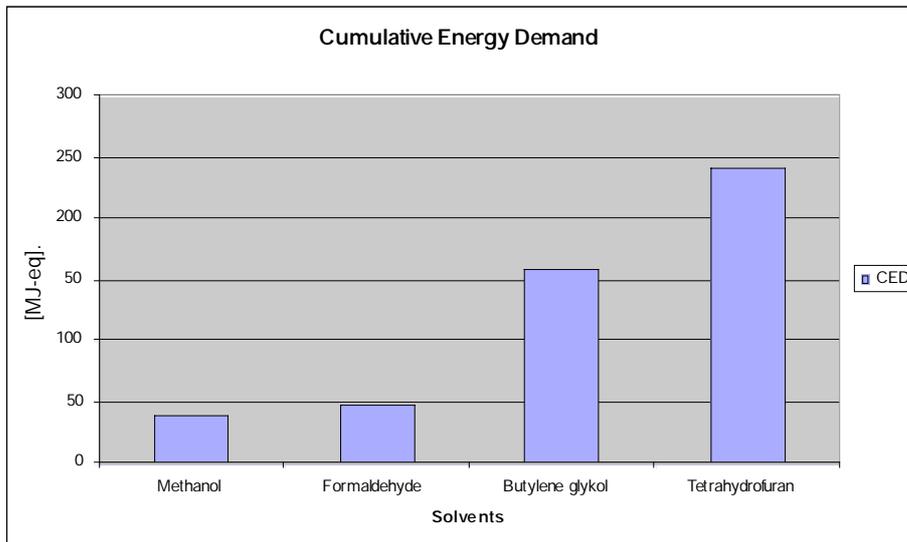


Abb. 1: Kumulierter Energieaufwand (CED) für Tetrahydrofuran und seine Vorstufen in der Produktionskette.

### 3.3 ÜBRIGE LÖSUNGSMITTEL

Von den übrigen 40 Lösungsmitteln sind 8 in ecoinvent enthalten. Für die fehlenden 32 LM wurden Daten erhoben, soweit sie verfügbar waren. Die fehlenden Daten wurden anhand von Daten ähnliche Produktionsprozesse abgeschätzt. Zur Datenverfügbarkeit siehe Tabelle 3 im Anhang.

Die 50 LM werden im Wesentlichen über vier Produktionsrouten hergestellt:

- Herstellung aus Methanol (vgl. Abb. 2 im Anhang)
- Herstellung aus den Produkten des Dampfcrackers (vgl. Abb. 3 im Anhang)
- BTX splitting (vgl. Abb. 4 im Anhang)
- Separation von Naphtha oder BTX, v. a. über das Molekularsiebverfahren (vgl. Abb. 5 im Anhang)

Die Abschätzung fehlender Daten wurde für jeden Prozessschritt gemäss Abbildungen 2 bis 5 wie folgt vorgenommen:

Daten zum Rohstoffverbrauch wurden aus dem Ertrag errechnet (vgl. Geisler 2004).

Da zu Luft und Wasseremissionen selten Daten verfügbar waren, wurde hier eine Abschätzung mit ecoinvent-Standardwerten (vgl. Hischier 2005) vorgenommen.

Fehlende Daten zum Energieverbrauch wurden aus folgenden vergleichbaren Prozessen abgeschätzt:

- Aus der Hydratation von *Ethylene* zu *Ethanol* wurden Isopropanol (aus Propylen) und Isoamylalkohol (aus 2-Methyl-Butylen) abgeschätzt.
- Aus der Veresterung von *Ethanol* zu *Essigester* wurden Butylacetat (aus Butanol), Isobutylacetat (aus Isobutanol), Isopropylacetat (aus Isopropanol) und Isoamylacetat (aus Isoamylalkohol) abgeschätzt.
- Aus der Hydroformylierung von *Propylen* zu *1-Butanol* wurden Propanal (aus *Ethylene*), Isobutanol (aus Propylene) sowie 1-Pentanol und 2-Methyl-2-Butanol (aus Butylen) abgeschätzt.
- Aus der Hydrogenierung von *Benzol* zu *Cyclohexan* wurde Methylcyclohexan (aus Toluol) abgeschätzt.

Der Wasserverbrauch wurde analog zu ecoinvent mit Daten aus Gendorf 2000 berechnet (vgl. Hischier 2005). Transporte und Infrastruktur wurden mit Standardwerten aus ecoinvent abgeschätzt (vgl. Frischknecht 2003). Die Unsicherheiten der verwendeten Werte wurden mit dem ecoinvent-Standardverfahren (vgl. Frischknecht 2003) errechnet.

## 4 Ausblick

Die erhobenen Lösungsmittelinventare sollen mittelfristig (2006/2007) im Zuge des Datenbankupdates V2.0 als Datensätze in die ecoinvent-Datenbank eingespeist werden. Ein Artikel, der die erarbeitete Methodik der Datenabschätzung beschreibt, wird zur Zeit noch bearbeitet und soll in Form einer Publikation in einer gängigen Fachzeitschrift präsentiert werden.

## 5 Referenzen

- Frischknecht 2003 Frischknecht R., Jungbluth N., Althaus H.-J., Hischier R., Spielmann M., Nemecek T., Hellweg S. and Dones R. (2003) Overview and Methodology. Final report ecoinvent 2000 No. 1. ESU-services, Uster, Swiss Centre for Life Cycle Inventories, Dübendorf, CH, Online-Version under: [www.ecoinvent.ch](http://www.ecoinvent.ch).
- Geisler 2004 Geisler, Georg/Hofstetter, Thomas/Hungerbühler, Konrad: Production of Fine and Speciality Chemicals - Procedure for the Estimation of LCIs. In: Journal of LCA (2) 101-113 (2004)
- Gendorf 2000 Gendorf (2000) Umwelterklärung 2000, Werk Gendorf. Werk Gendorf, Burgkirchen as pdf-File under: <http://www.gendorf.de/pdf/umwelterklaerung2000.pdf>
- Hischier 2005 Hischier, Roland/Hellweg, Stefanie/Capello, Christian/Primas, Alex: Establishing Life Cycle Inventories of Chemicals Based on Differing Data Availability. In: Journal of LCA 10 (1) 59-67 (2005)

## 6 Anhang

Tabelle 1: Liste der 50 organischen Lösungsmittel, welche bei den Projektpartnern des BfE Projektes „Abfallösungsmittelverwertung in der chemischen Industrie, Phase 2“ aus der Pharma- und Spezialitätenchemie eingesetzt werden.

Lösungsmittel	CAS-Nr.	LCI vorhanden	Lösungsmittel	CAS-Nr.	LCI vorhanden
Aliphatische Kohlenwasserstoffe			Karbonsäuren		
Pentan	109-66-0	ecoinvent	Ameisensäure	64-18-6	
Hexan	110-54-3		Essigsäure	64-19-7	ecoinvent
Isohexan (Methylpentan)	96-14-0		Ketone		
Heptan	142-82-5		Aceton	67-64-1	ecoinvent
Cycloaliphatische Kohlenwasserstoffe			Cyclohexanon		
Cyclohexan	110-82-7		Methylethylketon	78-93-3	ecoinvent
Methylcyclohexan	108-87-2		Methylisobutylketon	108-10-1	
Aromatische Kohlenwasserstoffe			Ester		
Ethylbenzol	100-41-4	ecoinvent	Methylformiat	592-84-7	
Toluol	108-88-3	ecoinvent	Butylacetat	141-78-6	
Xylol-Isomerengemisch	1330-20-7	ecoinvent	Essigester	123-86-4	
Chlorierte Kohlenwasserstoffe			Isobutylacetat		
Chlorbenzol	108-90-7		Isopropylacetat	108-21-4	
Methylenchlorid	75-09-2	ecoinvent	Isoamylacetat	628-63-7	
Alkohole			Methylacetat		
Benzylalkohol	100-51-6		Ether und Glykolether		
1-Butanol	71-36-3	ecoinvent	diethyl ether	60-29-7	
2-Butanol	78-92-2		Diethylether	123-91-1	
Isobutanol	78-83-1		Dioxan	629-14-1	
Butylenglykol	110-63-4		Ethylenglykoldimethylether	110-71-4	
Ethanol	64-17-5		Ethylenglykolmonoethylether	110-80-5	
Methanol	67-56-1	ecoinvent	Ethylenglykoldiethylether		
Pentanol	71-41-0		Methyltertbutylether	1634-04-4	ecoinvent
2-Methyl-2-Butanol	75-85-4		Tetrahydrofuran		
Isoamylalkohol	123-51-3		Amide und andere Stickstoffverbindungen		
1-Propanol	71-23-8		Acetonitril	75-05-8	
Isoropropanol	67-63-0	ecoinvent	Dimethylformamid	68-12-2	
Aldehyde			Weitere Lösungsmittel		
Benzaldehyd	100-52-7		Dimethylsulfoxid	67-68-5	
Formaldehyd	50-00-0	ecoinvent	Essigsäureanhydrid	108-24-7	**
Propionaldehyd	123-38-6		N-Methyl-2-Pyrrolidon	872-50-4	

\*\* Der ecoinvent-Datensatz „acetic anhydride, at plant, RER“ wurde mit Hilfe genauerer Daten verbessert.

Tabelle 2 Die 10 wichtigsten Lösungsmittel und deren Verfügbarkeit von Inventardaten

Lösungsmittel	Substanzklasse	Verfügbarkeit von Inventaren
Methanol	Alkohol	ecoinvent
Toluol	Aromatische Kohlenwasserstoffe	ecoinvent
Isopropanol	Alkohol	ecoinvent
Essigester	Ester	Nicht bilanziert
Aceton	Keton	ecoinvent
Ethanol	Alkohol	Nicht bilanziert
Tetrahydrofuran (THF)	Ether	Nicht bilanziert
Cyclohexan	Cycloaliphatische Kohlenwasserstoffe	Nicht bilanziert
Heptan	Aliphatische Kohlenwasserstoffe	Nicht bilanziert
Methylenchlorid	Chlorierte Kohlenwasserstoffe	ecoinvent

Tabelle 3: Verfügbarkeit von Daten 32 weiteren LM

Datenqualität	LM
Roh- und Hilfsstoffe: Daten verfügbar	Benzylalkohol
Wasserverbrauch: Daten verfügbar	Butylenglykol
Energieverbrauch: Daten verfügbar	Heptan
Luftemissionen: Daten verfügbar	Hexan
Wasseremissionen: Daten verfügbar	Methylisobutylketon
Transporte: abgeschätzt	Monochlorobenzol
Infrastruktur: abgeschätzt	Propanol
Roh- und Hilfsstoffe: Daten verfügbar	Essigsäureanhydrid
Wasserverbrauch: Daten verfügbar	Acetonitril
Energieverbrauch: Daten verfügbar	2-Butanol
Luftemissionen: abgeschätzt	Cyklohexan
Wasseremissionen: abgeschätzt	Cyklohexanon
Transporte: abgeschätzt	Diethylether
Infrastruktur: abgeschätzt	Ethanol
	Essigester
	Ameisensäure
	Isobutanol
	Methylacetat
Roh- und Hilfsstoffe: errechnet aus dem Ertrag	Benzaldehyd
Energieverbrauch: Daten verfügbar	N,N-dimethylformamid
Wasserverbrauch: abgeschätzt	Dioxan
Luftemissionen: abgeschätzt	Isohexan
Wasseremissionen: abgeschätzt	Methylformat
Transporte: abgeschätzt	Tetrahydrofuran
Infrastruktur: abgeschätzt	
Roh- und Hilfsstoffe: errechnet aus dem Ertrag	Amylalkohol
Wasserverbrauch: abgeschätzt	Butylacetat
Energieverbrauch: abgeschätzt aus vergleichbarem Prozess	Isoamylacetat
Luftemissionen: abgeschätzt	Isobutylacetat
Wasseremissionen: abgeschätzt	Isopropylacetat
Transporte: abgeschätzt	2-Methyl-2-butanol
Infrastruktur: abgeschätzt	Methylcyclohexan
	Propanal
Roh- und Hilfsstoffe: errechnet aus dem Ertrag	Dimethylsulfoxid
Wasserverbrauch: abgeschätzt	Ethyleneglycoldiethylether
Energieverbrauch: abgeschätzt	Ethyleneglycoldimethylether
Luftemissionen: abgeschätzt	Ethylene glycol monoethyl ether
Wasseremissionen: abgeschätzt	
Transporte: abgeschätzt	N-Methyl-2-pyrrolidon
Infrastruktur: abgeschätzt	

Abbildung 2: Methanol-Route

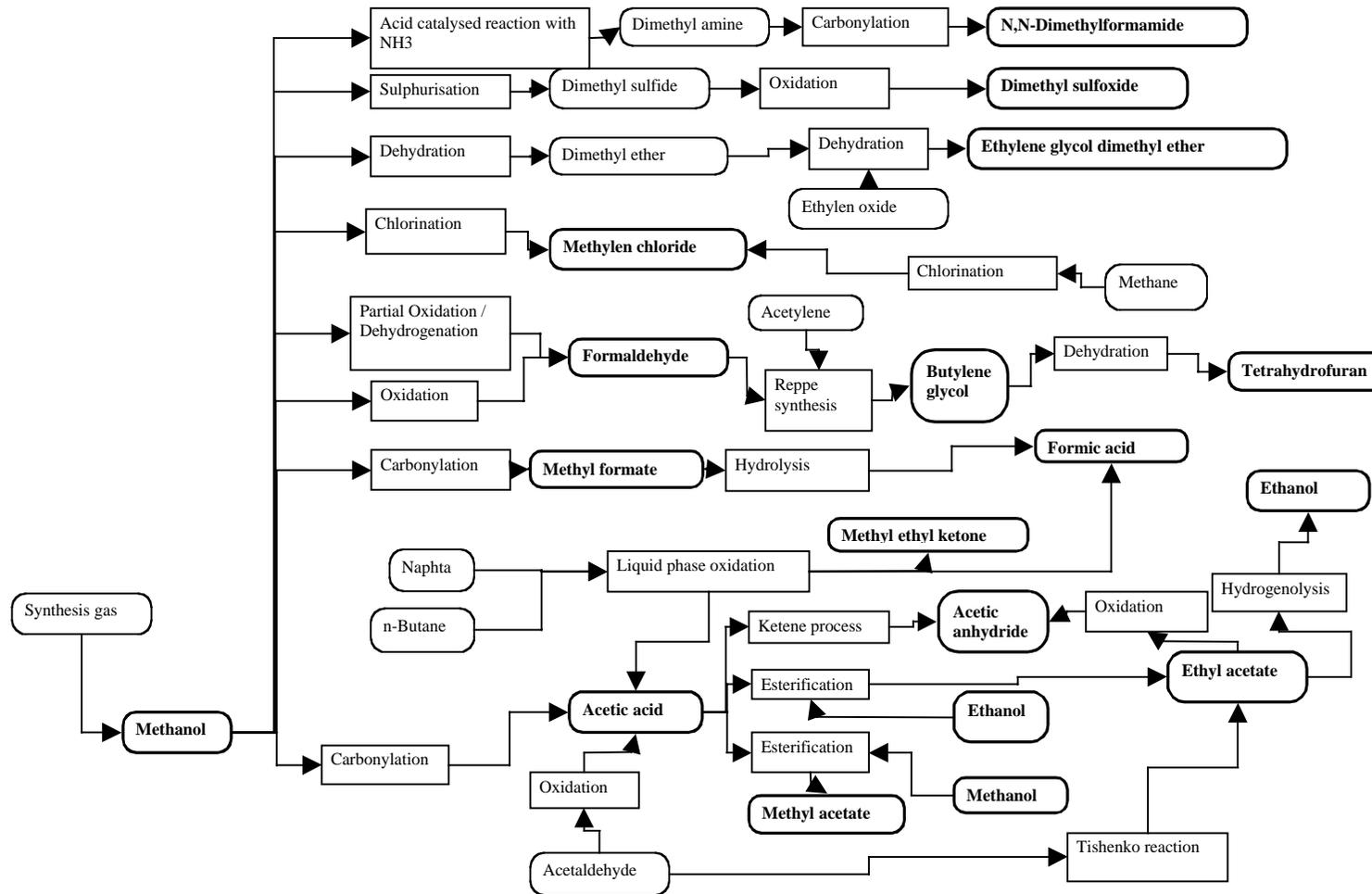


Abbildung 3: Dampfcracker-Route

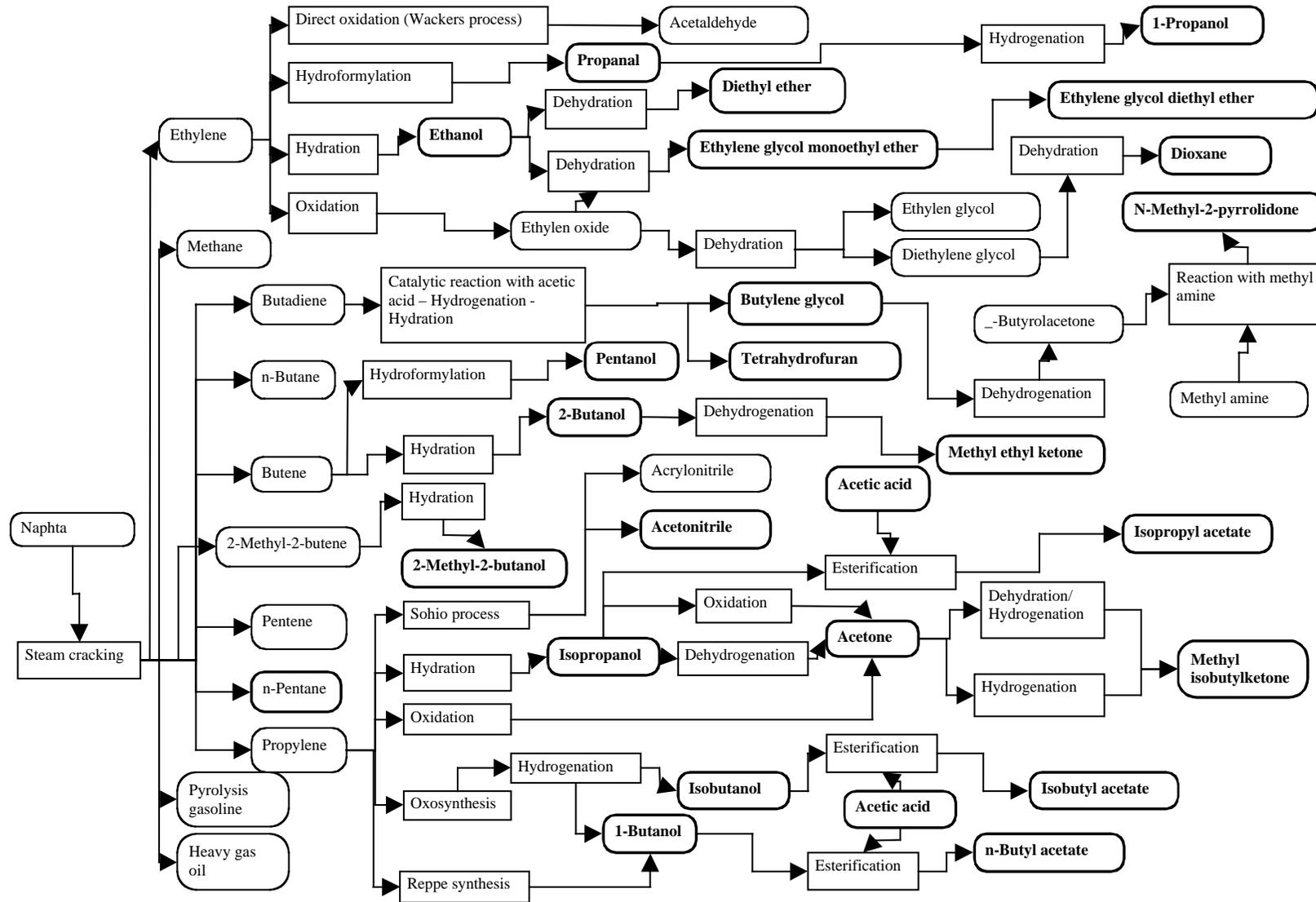


Abbildung 4: BTX splitting Route

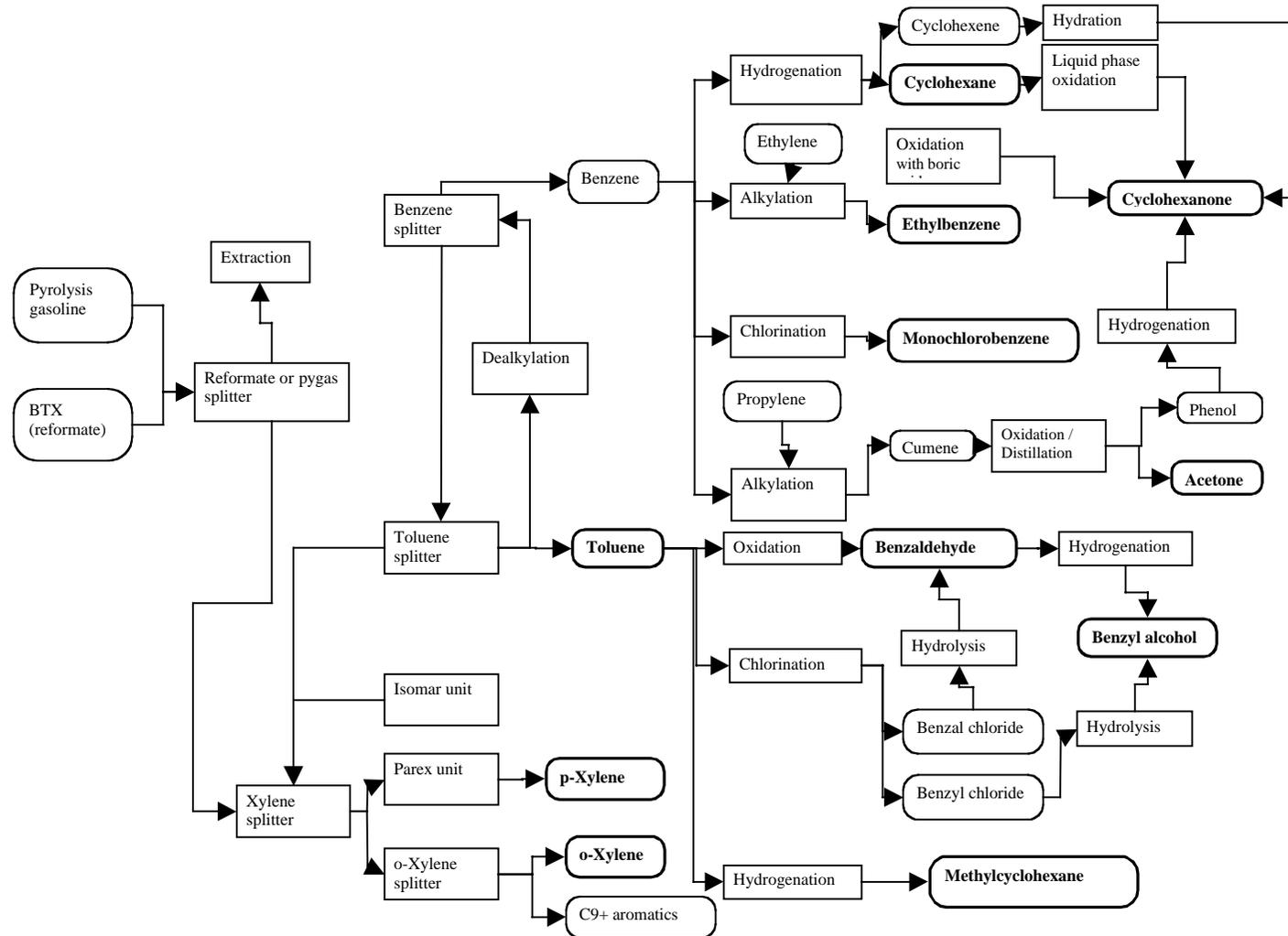


Abbildung 5: BTX/Naphta Separationsroute

