



Schweizerische Eidgenossenschaft
Confédération suisse
Confederazione Svizzera
Confederaziun svizra

Eidgenössisches Departement für
Umwelt, Verkehr, Energie und Kommunikation UVEK
Bundesamt für Energie BFE

METHODEN UND INSTRUMENTE ZUR ÖKOLOGISCHEN BEWERTUNG DER ABFALL-LÖSUNGSMITTELBEHANDLUNG IN DER CHEMISCHEN INDUSTRIE

Schlussbericht

Ausgearbeitet durch

Christian Capello,

Gruppe für Umwelt- und Sicherheitstechnologie

ETH Zürich

8093 Zürich

christian.capello@chem.ethz.ch

www.sust-chem.ethz.ch/tools/ecosolvent

Impressum

Datum: 13. November 2006

Im Auftrag des Bundesamt für Energie, Forschungsprogramm Verfahrenstechnische Prozesse VTP

Mühlestrasse 4, CH-3063 Ittigen

Postadresse: CH-3003 Bern

Tel. +41 31 322 56 11, Fax +41 31 323 25 00

www.bfe.admin.ch

BFE-Projektleiter: Bereichsleiter, martin.stettler@bfe.admin.ch

Projektnummer: 100065

Bezugsort der Publikation: www.energieforschung.ch

Für den Inhalt und die Schlussfolgerungen ist ausschliesslich der Autor dieses Berichts verantwortlich.

Vorwort zum Schlussbericht

Im Rahmen des Projektes "Abfall-Lösungsmittelbehandlung in der chemischen Industrie" wurden unterschiedliche Aspekte des ökologischen Umgangs mit Abfall-Lösungsmitteln untersucht. Als Resultat dieses Projektes wurden Methoden und Instrumente zur ökologischen Bewertung der Abfall-Lösungsmittelbehandlung in der chemischen Industrie erarbeitet. Dieser Bericht greift die wichtigsten Ergebnisse dieses Projektes auf, die über

- das Abfall-Lösungsmittelmanagement,
- das Inventarmodell der destillativen Lösungsmittelrückgewinnung,
- das Software Tool "ecosolvent" sowie
- den systematischen Vergleich von Abfall-Lösungsmittelbehandlungstechnologien und den 45 wichtigsten Lösungsmitteln

angefertigt wurden und gibt einen umfassenden Überblick über die erreichten Ziele. Der Schwerpunkt bildet das Kapitel über das *ecosolvent Tool*, das einen ökologischen Vergleich verschiedener Behandlungstechnologien für spezifische, benutzerdefinierte Abfall-Lösungsmittelgemische ermöglicht. Dieses Instrument unterstützt die Entscheidungsfindung im Abfall-Lösungsmittelmanagement mit ökologischen Kriterien. Das *ecosolvent Tool* kann kostenlos bezogen werden unter:

www.sust-chem.ethz.ch/tools/ecosolvent.

Für die technische Umsetzung des *ecosolvent Tools* danken wir David Weber von der Telekurs AG.

Dieses Projekt konnte nur in dieser Form realisiert werden, da auf bestehende Arbeiten zurückgegriffen werden konnte, die in der Gruppe für Umwelt- und Sicherheitstechnologie durchgeführt wurden. Dafür danken wir Christina Seyler, Annette Köhler und Jürgen Sutter.

Grundlage für die Durchführung dieses Projektes war die enge Zusammenarbeit mit dem Bundesamt für Energie und der chemischen Industrie, d.h. den Firmen Ciba Spezialitätenchemie AG, Ems-Dottikon AG, Hoffmann-La Roche AG, Lonza AG, Novartis Pharma AG, Siegfried Ltd. und Valorec Services AG. Nebst der finanziellen Unterstützung und dem zur Verfügung stellen wichtiger Daten über Destillationsprozesse und Lösungsmittelflüsse hat die Expertise der verschiedenen Fachleute, die in den regelmässigen Treffen der Begleitgruppe in dieses Projekt einfließen konnte, entscheidend zum Gelingen des Projekts beigetragen. Unser Dank für diese Kooperation gilt

- Thomas Kopp und Martin Stettler als Projektbegleiter des Bundesamtes für Energie,
- David Bayne, Hugo Betschart, Thomas Güttinger und Christian Klaubert von Ciba Spezialitätenchemie AG,
- Heinz Schmid von Ems-Dottikon AG,
- Hans-Peter Isenring und Klaus Berger von Hoffmann-La Roche AG,
- Alfred Huwiler und Bruno Ruppen von Lonza AG,
- Urs Rohr, Ulrich Weber und Bernhard Rätz von Novartis Pharma AG,
- Karin Knobloch von Siegfried Ltd.,
- Beat Badertscher von Valorec Services AG.

Zürich, November 2006

Christian Capello

Stefanie Hellweg

Konrad Hungerbühler

Zusammenfassung

Die Schweizerische chemische Industrie ist bestrebt, ihre Abfall-Lösungsmittel (ALM) ökologisch nachhaltig zu behandeln. Bis zum jetzigen Zeitpunkt wurden aber noch keinerlei Instrumente oder Computerprogramme entwickelt, welche die Umweltauswirkungen der ALM-Behandlungstechnologien (Verbrennung, Lösungsmittelregeneration mittels Destillation, Kanalisierung in Abwasserreinigungsanlagen (ARA)) quantitativ erfassen können. Deshalb war es das Ziel dieses Projektes, basierend auf der Methode der Ökobilanz ein Verfahren zu entwickeln, mit der Umweltwirkungen quantifiziert und diese als ökologische Kriterien in die Entscheidungsfindung im ALM-Management aufgenommen werden können.

Die Umweltwirkung einer ALM-Behandlungstechnologie hängt stark von den physikalisch-chemischen Eigenschaften des ALM und von den verfahrenstechnischen Eigenschaften ab. Daher werden Modelle benötigt, um fallspezifische Umweltwirkungen zu berechnen. In dieser Arbeit wurde ein solches Modell für die Destillation von ALM entwickelt. Es basiert auf generischen Wertebereichen, die durch eine umfassende statistische Analyse von 150 industriellen ALM-Destillationen berechnet wurden. Diese generischen Wertebereiche werden als Näherung verwendet, falls keine Primärdaten für einen Destillationsprozess zur Verfügung stehen.

Um die Umweltwirkungen der ALM-Behandlung für spezifische ALM-Gemische zu vergleichen, wurde das neu entwickelte Modell der Destillation mit bestehenden Modellen der ALM-Verbrennung und ARA in einem Softwaretool namens "*ecosolvent*" vereint. Um verlässliche Resultate zu erhalten, werden darin Parameterunsicherheiten quantitativ erfasst. Dies geschieht mittels stochastischer Modellierung (Monte Carlo Analyse). Dabei nimmt die Unsicherheit der Resultate ab, je mehr Information über eine Behandlungstechnologie zur Verfügung steht.

In einem letzten Schritt wurde die Destillation systematisch mit der Verbrennung verglichen. Dazu wurde das *ecosolvent Tool* benutzt, um die Umweltwirkungen beider Technologien für verschiedene ALM-Gemische und unter unterschiedlichen Prozessbedingungen zu berechnen. Es zeigte sich, dass keine Technologie grundsätzlich umweltfreundlicher ist, aber dass je nach ALM-Gemisch und Prozessbedingungen eine Technologie signifikant unterschiedliche Umweltwirkungen aufweisen kann. Auf Grund dieser Analyse konnten allgemeingültige Daumenregeln abgeleitet werden, die helfen, je nach ALM-Eigenschaften die ökologisch bessere Technologie zu identifizieren. Zusätzlich wurde für die 45 wichtigsten Lösungsmittel, die in der Schweizerischen chemischen Industrie eingesetzt werden, eine Übersichtstabelle erarbeitet. Diese zeigt spezifisch für alle Lösungsmittel, unter welchen Prozessbedingungen die Destillation die umweltfreundlichere Technologie ist gegenüber der Verbrennung.

Basierend auf den Daumenregeln, der Übersichtstabelle und dem *ecosolvent Tool* wurde ein Verfahren entwickelt, das die Entscheidungsfindung im ALM-Management unterstützt, indem ökologische Kriterien während unterschiedlicher Stufen der Prozessentwicklung bereitgestellt werden. Das entwickelte Verfahren ist auch für Nicht-Umweltexperten einfach anwendbar. Zudem ist es sehr flexibel betreffend der benötigten Eingabeinformationen. Daher kann dieses Verfahren vielseitig eingesetzt werden. Zum einen kann es angewendet werden, um bestehende Prozesse ökologisch zu bewerten. Eine solche retrospektive Bewertung hat oft den Vorteil, dass genaue (Mess-) Daten zur Verfügung stehen und somit die Resultate mit sehr kleinen Unsicherheiten behaftet sind. Andererseits können aber auch Umweltwirkungen von Prozessen abgeschätzt werden, die noch in der Planungsphase sind, weil fehlende Informationen mittels der generischen Wertebereiche und allgemeingültigen Daumenregeln näherungsweise bestimmt werden. Der Vorteil der Prozessbewertung während der frühen Planungsphasen ist, dass eine Änderung der ALM-Behandlungstechnologie einfacher durchführbar ist, als bei bereits bestehenden Prozessen. Schliesslich kann dieses Verfahren wegen der hohen Flexibilität auch bei strategischen Investitionsentscheiden im Zusammenhang mit der Entwicklung neuer Produktionsprozesse oder mit einem vergrösserten Produktionsvolumen und damit benötigter neuer ALM-Behandlungskapazität angewendet werden.

Abstract

The Swiss chemical industry is striving to achieve sustainable treatment of their waste solvents. But so far no instruments or tools have been developed that allow for a quantitative environmental assessment of waste-solvent treatment technologies, such as incineration, solvent regeneration, and treatment in wastewater treatment plants. Therefore, it is the goal of this project to provide a framework based on the life-cycle assessment (LCA) methodology that facilitates decision support for the environmental improvement of waste-solvent treatment in chemical industry

To this end, a model for waste-solvent distillation is developed. The model allows for the estimation of energy and ancillary use as well as of the amounts of emissions as a function of only a few input parameters that are typically available to decision makers in the chemical industry. Generic data ranges for this purpose were calculated based on a comprehensive statistical analysis of 150 industrial waste-solvent distillation processes. These data ranges can be used as generic values when primary data of distillation processes are missing. Moreover, distribution functions were fitted to the empirical data.

In order to compare environmental impacts of treatment technologies for specific, user-defined waste-solvent mixtures, the new model of distillation has been combined with existing models of incineration and a wastewater treatment plant in a software tool named *ecosolvent*. The tool is designed with a tiered structure to allow for a high degree of flexibility regarding information needs. Uncertainties of the model outputs are calculated quantitatively using stochastic modeling (Monte Carlo analysis). Generally, the more complete the user information is, the lower the uncertainties in the model outputs.

Finally, a systematic comparison of distillation and incineration was made to derive general recommendations for the environmental optimal choice of treatment technology. To this end, the *ecosolvent tool* was used to calculate systematically the environmental impact considering a large range of process conditions and waste-solvent mixtures. The results showed that none of the treatment technologies is generally environmentally superior to another, but that the optimal option depends on the waste-solvent mixture and process conditions. Rules of thumb were derived that help to identify the environmentally favorable treatment technology depending on the waste-solvent properties. Additionally, a result table is presented for the 45 most important solvents used in Swiss chemical industry showing under which process conditions distillation is generally environmentally superior to incineration. For six solvents, distillation was the environmentally optimal treatment technology, even at low solvent recoveries in the distillation process.

Based on the general recommendations and the *ecosolvent tool* a framework for decision support in waste-solvent management was developed. This framework is easily applicable and can therefore be used by non-environmental experts. It is very flexible in terms of information needs. Thus, it can be used to assess the environmental impact of waste-solvent treatment processes in retrospect. Retrospective assessments often have the advantage of accurate data being available that leads to results with small uncertainty ranges. It can also be used in the early phase of process development, making use of the reliable generic data ranges and generally applicable rules of thumb. In the early phase of process development, changes in the waste-solvent treatment technology as a consequence of environmental considerations is more practicable than in established processes. Finally, the proposed framework may also be used to promote strategic investment decisions when new production processes are developed or production volume is increased and, as a consequence, new waste-solvent treatment capacity is needed.

Inhaltsverzeichnis

Vorwort zum Schlussbericht.....	i
Zusammenfassung.....	ii
Abstract	iii
Inhaltsverzeichnis.....	iv
1. Ausgangslage.....	1
2. Ziel der Arbeit	2
3. Lösungsweg	3
4. Ergebnisse.....	4
4.1. Analyse der Abfall-Lösungsmittelflüsse und Behandlungstechnologien	4
4.2. Systemmodell der Ökobilanz	8
4.3. Inventarmodelle	9
4.4. Das Software-Tool <i>ecosolvent</i>	11
4.4.1. Aufbau des <i>ecosolvent Tools</i>	11
4.4.2. Unsicherheitsquantifizierung der Sachbilanz	12
4.4.3. Wirkungsabschätzung.....	12
4.4.4. Technische Angaben zum <i>ecosolvent Tool</i>	14
4.4.5. Fallbeispiel Toluol-Gemisch	14
4.5. Systematische Bewertung der Abfall-Lösungsmittelbehandlung	17
4.5.1. Technologiebewertung.....	17
4.5.2. Lösungsmittelbewertung	18
4.5.3. Daumenregeln.....	22
4.6. Synthese: Verfahren zur ökologischen Bewertung der Abfall-Lösungsmittelbehandlung.....	24
5. Diskussion	25
6. Schlussfolgerungen.....	26
Abkürzungsverzeichnis	27
Referenzen	28
Anhang	31

1. Ausgangslage

Die Schweizerische chemische Industrie ist praktisch ausschliesslich im Bereich der Spezialitätenchemie tätig. Der Anteil der Spezialitäten am Gesamtproduktportfolio beträgt heute weit über 90 %. Die Aufteilung nach Produktgruppen zeigt, dass ca. 53% des Gesamtumsatzes auf Pharmazeutika entfallen, gefolgt von Feinchemikalien (24%), Pflanzenbehandlungsmittel (9%), Diagnostika (8%) und Vitamine, Aromen und Duftstoffe (6%) [53].

Die Produktion dieser hochwertigen Produkte bedingt komplexe Produktionsrouten mit mehreren Produktionsschritten. Daher werden auch grosse Mengen unterschiedlicher organischer Lösungsmittel benötigt. Die Lösungsmittel werden als Reaktionsmedium, Rohmaterial für Produktesynthesen, als Reinigungsmittel und zur Formulierung von Produkten (z.B. Farben, Lacke) verwendet [20,56]. Im Jahr 2004 wurden ca. 250'000 Tonnen frische Lösungsmittel in der Schweizerischen chemischen Industrie verbraucht zur Herstellung von rund 30'000 Produkten [53]. Diese hohe Menge zeigt, dass organische Lösungsmittel mengenmässig zu den wichtigsten Chemikalien gehören.

Nach dem Gebrauch von Lösungsmitteln in einem chemischen Produktionsprozess können diese oftmals nicht direkt wiederverwendet werden, da sie gemischt sind mit anderen Lösungsmitteln, anderweitig verunreinigt sind oder auf Grund von Qualitätsvorschriften nicht mehr eingesetzt werden dürfen. Diese Lösungsmittel werden als Abfall-Lösungsmittel thermisch behandelt, regeneriert oder entsorgt [18]. Für alle diese Behandlungsoptionen stehen eine Vielzahl von Technologien zur Verfügung, wie z.B. Sonderabfallverbrennungsöfen, Zementwerke, destillative Aufbereitung oder die Kanalisierung in Abwasserreinigungsanlagen [11,51,50].

Mit Beginn der Achzigerjahre steigerte sich auch das Umweltbewusstsein in der chemischen Industrie [40]. So begannen die meisten Firmen ihre Umweltauswirkung zu bewerten, beispielsweise indem sie sich dem „Responsible Care Programm [32]“ verpflichteten oder regelmässige Umweltberichte erstellen (z.B. [10,26]). Die Umweltauswirkung der Abfall-Lösungsmittelbehandlung wurde aber bis heute nicht spezifisch untersucht [18], obwohl daraus eine Vielzahl von Umweltbelastungen resultieren. Beispielsweise tragen CO₂ Emissionen der Abfall-Lösungsmittelverbrennung zur Treibhausentwicklung bei oder VOC Emissionen von Destillationsprozessen sind mitverantwortlich für die bodennahe Ozonbildung (Sommersmog). Zudem verursacht die Behandlung von Abfall-Lösungsmittel auch indirekte Umweltwirkungen, die im Zusammenhang mit der zur Behandlung nötiger Energie- und Hilfsstoffherstellung stehen (z.B. Natronlauge im Wäscher der Verbrennungsanlagen oder Schleppmittel, die für Destillationen benötigt werden). Schliesslich muss auch berücksichtigt werden, dass das Behandeln von Abfall-Lösungsmittel auch Nutzen für die Umwelt mit sich bringt, indem bei der Verbrennung die freiwerdende Energie genutzt wird (Vermeidung des Einsatzes fossiler Brennstoffe) oder bei der Destillation das regenerierte Lösungsmittel wiederverwendet wird (Vermeidung der Produktion frischer Lösungsmittel). Eine fundierte Umweltbewertung der Abfall-Lösungsmittelbehandlung muss demzufolge alle diese Aspekte berücksichtigen. Die Ökobilanz (Lebenszyklusanalyse), dargelegt in den ISO-Richtlinien 14040 ff. [13-16], ist eine Methode, mit der die Umweltwirkungen über den gesamten Lebenszyklus eines Produktes quantifiziert werden können. Deshalb ist die Ökobilanz auch geeignet, um die Umweltwirkungen verschiedener Abfall-Lösungsmittelbehandlungstechnologien miteinander zu vergleichen.

In der chemischen Industrie wurden bereits Tools basierend auf der Ökobilanz-Methodik entwickelt und zahlreiche Studien publiziert, die den Einsatz der Ökobilanz in diesem Umfeld zeigen: Bretz und Frankhauser präsentierten ein Tool zur ökologischen Optimierung chemischer Prozesse [3]. Die Firma BASF entwickelte das „Eco-Efficiency Analysis Tool“, das darauf abzielt, Ökologie zusammen mit Ökonomie eines Prozesses oder Produktes über den gesamten Lebenszyklus zu quantifizieren [43]. Desweiteren wurde die Methode der Ökobilanz angewandt, um ökologische Gesichtspunkte in das Design von neuen Chemikalien [55], chemischen Produktionsprozessen [25,39,42,44], in die Anwendung von Chemikalien [21,22] und in die Abfallbehandlung [34,41] zu integrieren. Im Bereich der Abfall-Lösungsmittelbehandlung wurden bis anhin Fallstudien publiziert, in denen die Behandlung spezifischer Gemische in Verbrennungsanlagen und Destillationsprozessen miteinander verglichen wurden [29,31]. Technologiespezifische Modelle wurden für Verbrennungsanlagen [35,47,48] und Abwasserreinigungsanlagen [35,37] präsentiert. Mit diesen Modellen können Inventardaten (Emissionen, Hilfsstoffverbräuche) in Abhängigkeit der elementaren Abfall-Lösungsmittelzusammensetzung berechnet werden. Eine Verknüpfung dieser Modelle, die einen systematischen Vergleich dieser Technologien ermöglichen würde, wurde bis anhin aber noch nicht gemacht. Bezüglich der Regeneration (Destillation) wurden meist nur der direkte Energieverbrauch

und die Lösungsmittelrückgewinnungsrate betrachtet. Diese Parameter wurden für spezifische Abfall-Lösungsmittelgemische entweder mit Hilfe von Software-Tools [35] oder empirischer Algorithmen [2] berechnet oder es wurden Schätzwerte von Experten verwendet [22], um Inventardaten zu bestimmen. Vergleichbare Modelle zur Verbrennung gibt es noch nicht.

2. Ziel der Arbeit

Das Ziel dieses Projektes war, ein Verfahren zur Entscheidungshilfe ökologisch nachhaltiger Abfall-Lösungsmittelbehandlung für die Anwendung in der chemischen Industrie zu erarbeiten. Zu diesem Zweck soll die Ökobilanz-Methodik angewendet werden, um ökologische Vergleiche relevanter Behandlungstechnologien für spezifische Abfall-Lösungsmittelgemische zu ermöglichen. Die detaillierten Ziele dieser Arbeit umfassen:

- 1) Eine Analyse der Abfall-Lösungsmittelflüsse und Technologien, die zur Abfall-Lösungsmittelbehandlung in der Schweizerischen chemischen Industrie eingesetzt werden. Spezifisch,
 - die Identifizierung der wichtigsten Behandlungstechnologien zur Abfall-Lösungsmittel Verbrennung, Entsorgung und Aufbereitung.
 - die Identifizierung der wichtigsten Lösungsmittel, die berücksichtigt werden müssen.
 - die Evaluation der Anforderungen und Möglichkeiten für die Anwendung von Entscheidungshilfen im Rahmen des Abfall-Lösungsmittelmanagements.

- 2) Entwicklung eines Inventarmodelles für die Lösungsmittelaufbereitung (Destillation), das
 - eine Quantifizierung von Inventardaten für verschiedene Destillationstechnologien ermöglicht.
 - auf realen Industriedaten basiert.
 - auch eingesetzt werden kann, falls genaue Angaben zu Aufarbeitungsprozessen fehlen (z.B. keine Messwerte vorhanden sind).

- 3) Entwicklung eines einfach handhabbaren Software-Tools, das
 - den ökologischen Vergleich der wichtigsten Behandlungstechnologien für spezifische, benutzerdefinierte Abfall-Lösungsmittel ermöglicht, basierend auf der Ökobilanz-Methodik.
 - auch Unsicherheiten in den Inventardaten quantifiziert als Basis für verlässliche Vergleiche zwischen Technologien.
 - flexibel bezüglich der zu Verfügung stehenden Information über die Behandlungsprozesse ist und damit auch in frühen Entwicklungsphasen eingesetzt werden kann.

- 4) Systematische Bewertung der Abfall-Lösungsmittelbehandlung, um allgemeingültige Empfehlungen zur ökologischen Technologiewahl zu ermöglichen, die
 - zur schnellen Entscheidungsfindung beitragen.
 - als Daumenregeln angewendet werden können.
 - spezifische Resultate für die wichtigsten Lösungsmittel, die in der Schweizerischen chemischen Industrie eingesetzt werden, enthalten.

3. Lösungsweg

Um die in Kapitel 2 definierten Ziele zu erreichen, wurde schrittweise vorgegangen. Dabei konnte teilweise auch auf bestehende Arbeiten zurückgegriffen werden. Jeder Schritt wird in diesem Bericht in einem eigenen Unterkapitel diskutiert. Die meisten Resultate wurden auch in Form einer wissenschaftlichen Publikation abgefasst. Abbildung 1 zeigt den verfolgten Lösungsweg und die aus diesem Projekt hervorgegangenen Publikationen.

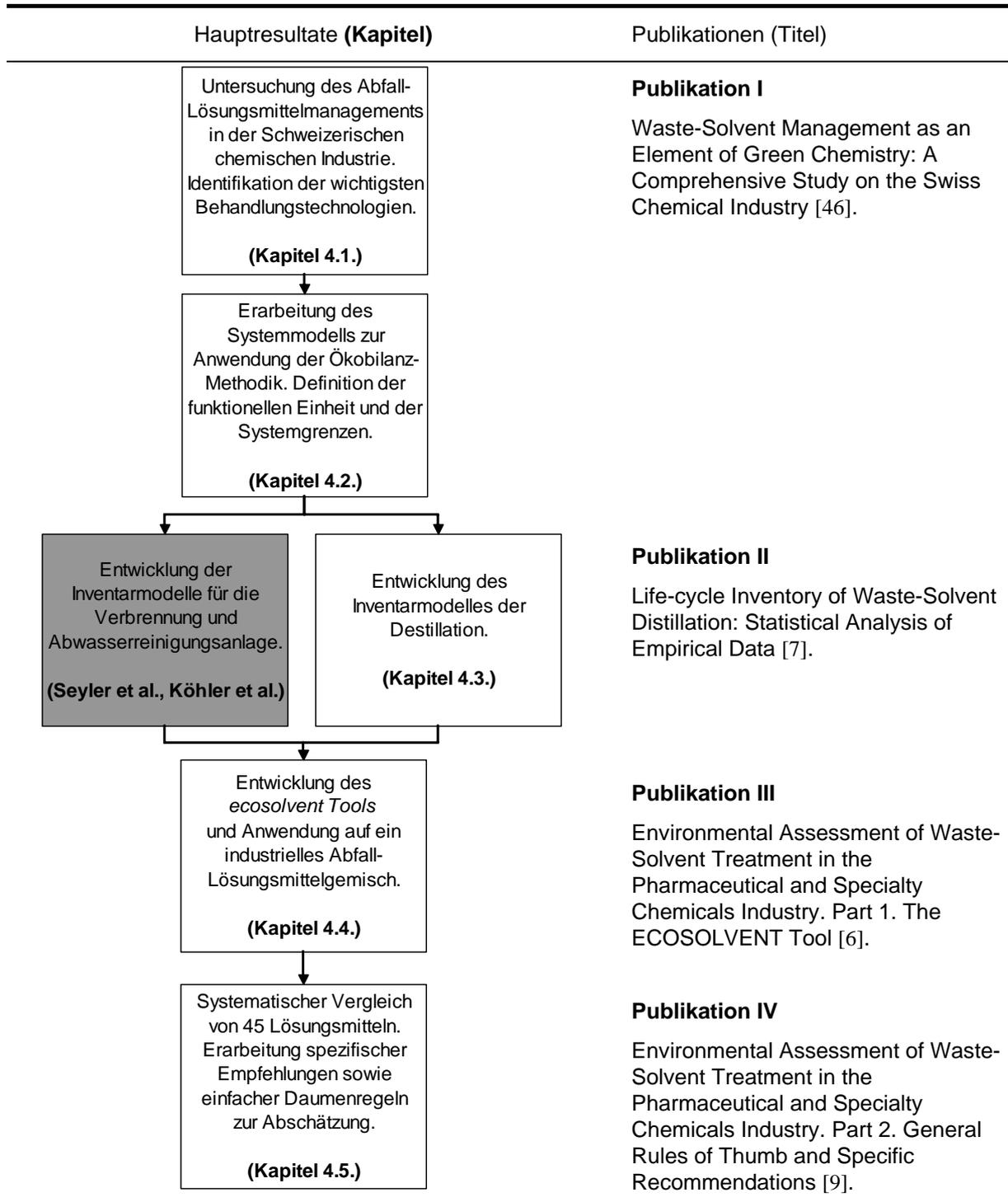


Abbildung 1: Gewählter Lösungsweg zum Erreichen der in Kapitel 2 definierten Ziele und Angaben zu den wissenschaftlichen Publikationen. Die graue Box bezeichnet die Arbeiten von Seyler et al. [47,48] und Köhler et al. [38], die für dieses Projekt verwendet wurden und bereits publiziert sind.

4. Ergebnisse

4.1. ANALYSE DER ABFALL-LÖSUNGSMITTELFÜSSE UND BEHANDLUNGSTECHNOLOGIEN

Das Ziel der Analyse der Abfall-Lösungsmittelflüsse und Behandlungstechnologien war die Identifizierung relevanter Lösungsmittel und Technologien. Um verlässliche Resultate zu erhalten, wurde eine Umfrage unter den Projektpartnern aus der chemischen Industrie [18] durchgeführt. In dieser Erhebung werden sechs der grössten chemischen Produktionsstandorte der Schweiz berücksichtigt. In diesen Produktionsstandorten werden jährlich ca. 120'000 Tonnen frische Lösungsmittel benötigt, was rund der Hälfte der gesamten Schweizerischen Jahresmenge von 250'000 Tonnen entspricht [53]. Die Umfrage ergab, dass im Jahr 2002 rund 50 Lösungsmittel in Mengen von über 10 Tonnen pro Jahr eingesetzt wurden. Die detaillierte Liste der 50 Lösungsmittel befindet sich im Anhang (Tabelle 4).

Die 50 Lösungsmittel wurden in sehr unterschiedlichen Mengen eingesetzt. Abbildung 2 zeigt die 15 mengenmässig wichtigsten Lösungsmittel in den sechs untersuchten Produktionsstandorten. Zudem wurde auch berücksichtigt, dass die Bedeutung der einzelnen Lösungsmittel stark vom Produktionsstandort abhängen kann. Deshalb wurde für jeden der sechs Produktionsstandorte ein Ranking von 1 bis 10 basierend auf den eingesetzten Mengen erstellt. Für das mengenmässig bedeutendste Lösungsmittel wurden 10 Punkte vergeben. Die Punkte wurden nun für alle Lösungsmittel zusammengezählt. Diese relative Wichtigkeit der Lösungsmittel wird ebenfalls in Abbildung 2 gezeigt.

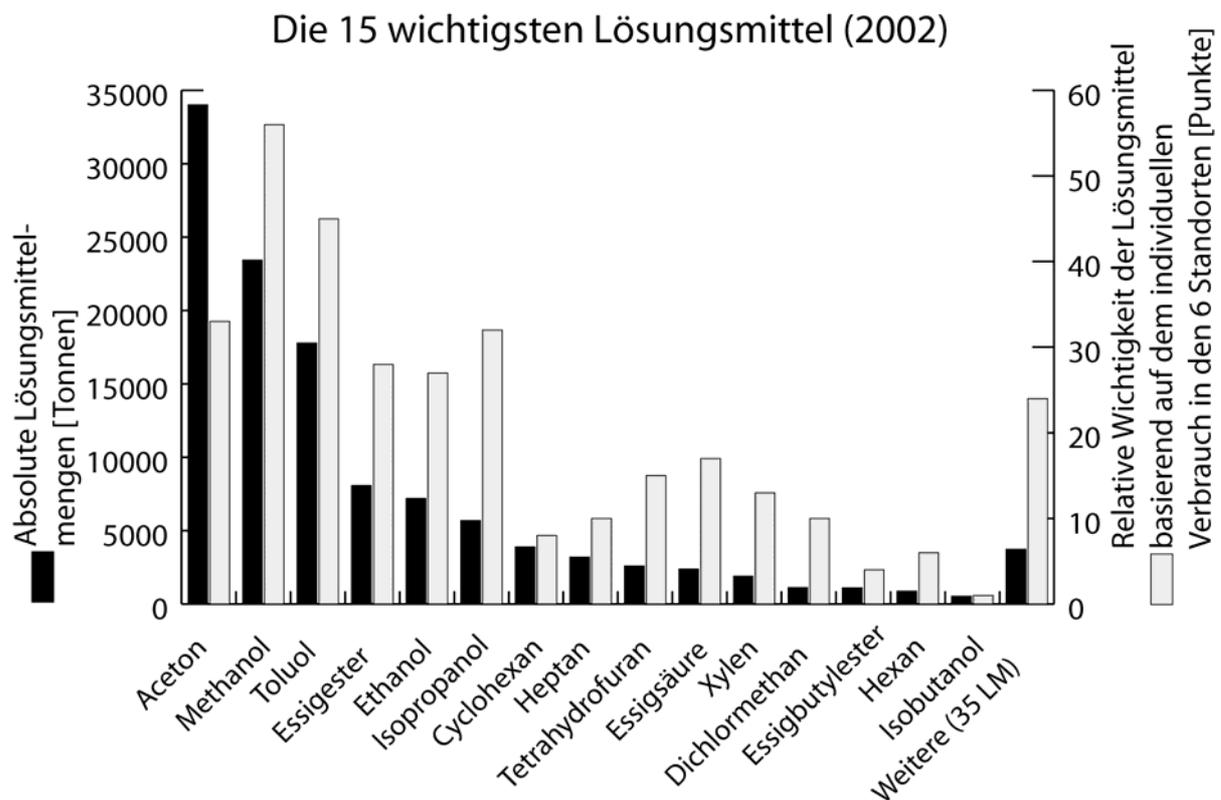


Abbildung 2 Die 15 mengenmässig wichtigsten Lösungsmittel in den sechs untersuchten Produktionsstandorten im Jahr 2002. Sowohl die absoluten Mengen sind abgebildet (schwarze Balken) als auch eine relative Wichtigkeit (graue Balken). Quelle: Seyler et al., 2006 [46].

Die drei wichtigsten Lösungsmittel tragen zu ca. 65% zum totalen Lösungsmittelverbrauch bei. Aceton ist mit 30% (34'000 Tonnen) das mengenmässig bedeutendste Lösungsmittel gefolgt von Methanol mit 20% (23'000 Tonnen) und Toluol mit 15% (18'000 Tonnen). Das relative Ranking bestätigt, dass Methanol, Aceton und Toluol die wichtigsten Lösungsmittel sind. Zusätzlich zeigen Isopropanol, Essigsäureethylester und Ethanol eine hohe Relevanz. Viele Lösungsmittel werden in kleineren Mengen (<100 Tonnen) eingesetzt.

Aus diesen Lösungsmitteln kann nun eine beinahe unbegrenzte Anzahl Abfall-Lösungsmittelgemische entstehen. Mit dieser Variabilität muss auch im folgenden Abfall-Lösungsmittelmanagement umgegangen werden. Das meiste Abfall-Lösungsmittel wird prozessintern aufgearbeitet, d.h. es wird innerhalb eines Produktionsprozesses in einem Kreislauf gehalten. Sobald aber Lösungsmittel aus einem Prozess austritt wird es oftmals zentral gesammelt und behandelt. Für die Behandlung dieses Abfall-Lösungsmittels bieten sich drei verschiedene Varianten an:

- **Die Abfall-Lösungsmittel Entsorgung**

Bei der Entsorgung geht aus der Behandlung des Abfall-Lösungsmittels kein direkter Nutzen hervor. Das heisst, weder der Rohstoff noch der Energieinhalt des Abfall-Lösungsmittels wird verwertet. Die wichtigste Technologie der Entsorgung ist die Kanalisierung des Abfall-Lösungsmittels in Abwasserreinigungsanlagen (ARA).

- **Die thermische Abfall-Lösungsmittelverwertung**

Bei der thermischen Verwertung wird die im Abfall-Lösungsmittel chemisch gebundene Energie zurückgewonnen. Oftmals substituiert das Abfall-Lösungsmittel dabei fossile Brennstoffe und trägt zur Energieproduktion eines Produktionsstandortes bei. Abfall-Lösungsmittel wird zum grössten Teil in Sondermüllverbrennungsöfen (Abfall-Lösungsmittelverwertungsanlagen (ALV) oder Sonderabfallverbrennungsanlagen (SAVA)) thermisch verwertet. Andere Optionen sind die Verbrennung in Zementwerken, Kesselhäusern oder in thermischen Abluftverwertungsanlagen (TAV).

- **Die zentrale stoffliche Abfall-Lösungsmittelverwertung**

Die stoffliche Abfall-Lösungsmittelverwertung bezweckt die Wiedergewinnung von Lösungsmittel aus einem Abfall-Lösungsmittel bzw. das Entfernen von Verunreinigungen. Dabei können unterschiedliche Produkte mit verschiedenen Einsatzzwecken hervorgehen. Vereinfachend werden vier Möglichkeiten unterschieden, wie mit dem Abfall-Lösungsmittel verfahren wird: (1) Die Regeneration zu hochwertigem Lösungsmittel und Einsatz in der gleichen Prozessstufe (Stufenregeneration), (2) die Regeneration zu hochwertigem Lösungsmittel und Einsatz in einer vergleichbaren Prozessstufe (Pool-Lösungsmittel). Dabei werden Regenerate aus verschiedenen Aufarbeitungen zusammengeführt und gesammelt. Diese gepoolten Regenerate müssen vorgeschriebene Spezifikationen einhalten, sowohl was die technische Reinheit als auch das Spektrum der NebenkompONENTEN betrifft. Dies erfordert einen hohen Aufwand für analytische Untersuchungen. Eine weitere Möglichkeit (3) ist das Downcycling. Dabei wird aus dem Abfall-Lösungsmittel „minderwertiges“ Lösungsmittel gewonnen. Als „minderwertig“ werden Lösungsmittel bezeichnet, die nicht eine hohe technische Reinheit haben und/oder viele bzw. ein unbekanntes Spektrum an NebenkompONENTEN aufweisen. Diese Regenerate werden nicht mehr in der Pharma- und Spezialitätenchemie eingesetzt, sondern werden an andere Industriezweige verkauft, die nicht so strengen Auflagen gerecht werden müssen. Dort können sie einerseits wieder als Synthesereaktionsmedium verwendet werden oder sie werden Produkten beigemischt (z.B. Reinigungsmittel). Als letzte Möglichkeit (4) wird das Abfall-Lösungsmittel zu Ersatzbrennstoff aufgearbeitet. Dazu werden nicht Komponenten des Abfall-Lösungsmittels zurückgewonnen, sondern es werden Verunreinigungen (z.B. Halogene, Metalle, Feststoffe) entfernt. Zudem kann der Wassergehalt verringert werden, damit ein Mindestbrennwert des Gemisches erreicht wird.

In Abbildung 3 wird der Einsatz der obig erwähnten Technologien im Rahmen des Lebenszyklus von Lösungsmitteln in der Pharma- und Spezialitätenchemie schematisch gezeigt.

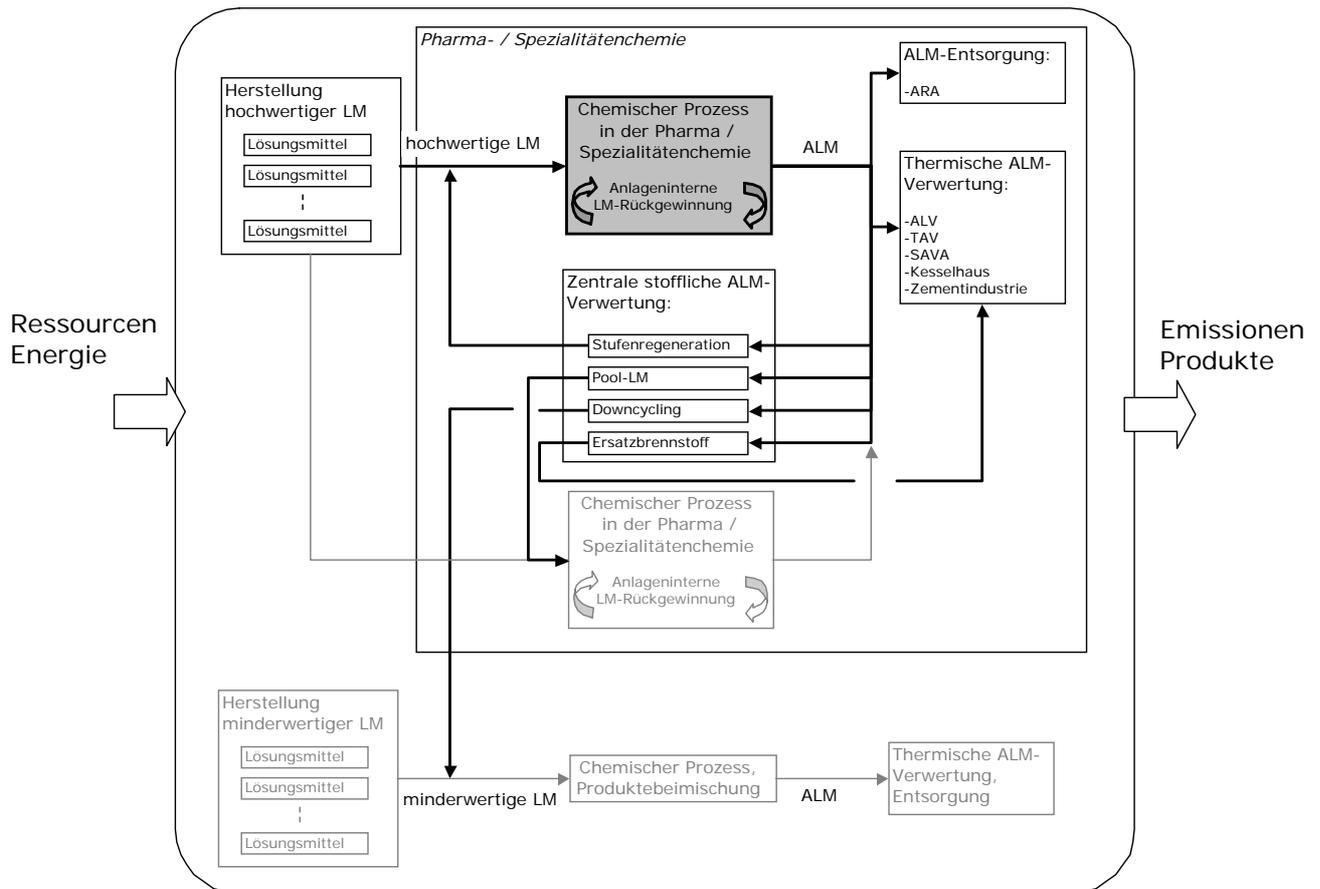


Abbildung 3: Schematische Darstellung des Lebenszyklus von Lösungsmitteln in der chemischen Industrie. Diese Abbildung zeigt ein vereinfachtes Bild; es werden nur die bedeutendsten Varianten des Lebenszyklus von Lösungsmitteln gezeigt. Drei Behandlungsoptionen können unterschieden werden: (1) Entsorgung (Abwasserreinigungsanlage (ARA)), (2) thermische Verwertung (Abfall-Lösungsmittelverwertungsanlage (ALV), Thermische Abluftverwertungsanlage (TAV), Sonderabfallverbrennungsanlage (SAVA), Kesselhaus oder Brennstoff in der Zementindustrie) und (3) stoffliche Aufbereitung in der zentralen stofflichen Verwertung.

Die verschiedenen Behandlungsoptionen für das Abfall-Lösungsmittel sind von unterschiedlicher Wichtigkeit. Abbildung 4 zeigt die prozentualen Anteile der einzelnen Behandlungsoptionen, wobei die stoffliche Verwertung detailliert dargestellt wird. Die Stufenregenerate und die Pool-Lösungsmittel werden unter Lösungsmittel-Regeneration zusammengefasst. Die Prozentangaben sind Durchschnittswerte der Mengenanteile der einzelnen Unternehmen.

Wichtigkeit der ALM-Behandlungsoptionen (2002)

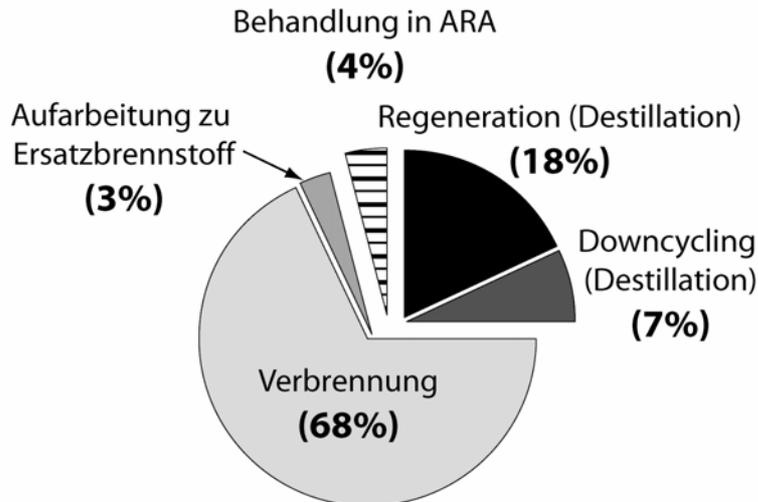


Abbildung 4: Darstellung der prozentualen Anteile der einzelnen ALM-Behandlungsoptionen für 2002. Dabei wird die stoffliche Verwertung detailliert gezeigt. Die Stufenregeneration und die Pool-Lösungsmittel (vgl. Abb. 3) werden zusammengefasst als Lösungsmittel-Regeneration. Die Prozentangaben sind Durchschnittswerte der Mengenanteile der befragten Unternehmen. Quelle: Seyler et al., 2006 [46].

Aus Abbildung 4 geht hervor, dass die thermische Verwertung von Abfall-Lösungsmittel die Behandlungsoption mit dem grössten Anteil ist. Dies deckt sich auch mit Resultaten vergleichbarer Untersuchungen [4,49]. Begründet wird dieses Resultat vor allem mit der grossen Flexibilität der thermischen Verwertung bezüglich der Zusammensetzung der Abfall-Lösungsmittel. Dies ist insbesondere in der Pharma- und Spezialitätenchemie wichtig, da hier eine Vielzahl unterschiedlicher Lösungsmittel in kleineren Mengen eingesetzt wird. Auf der anderen Seite bietet die Rektifikation eine Flexibilität gegenüber der anfallenden Menge an Abfall-Lösungsmittel, denn diese Anlagen können ohne Probleme auch für eine gewisse Zeit abgeschaltet werden, wohingegen die Verbrennungsanlagen kontinuierlich betrieben wird.

Das Abfall-Lösungsmittelmanagement eines Chemieunternehmens ist ein äusserst komplexes System. Für die Entscheidungsfindung, auf welche Weise ein Abfall-Lösungsmittel behandelt werden kann, werden viele Kriterien beurteilt. Die berücksichtigten Kriterien können grob in 5 Klassen eingeteilt werden: Kriterien bezüglich (1) Vorschriften, (2) Logistik, (3) Kosten, (4) Zusammensetzung des Abfall-Lösungsmittels und (5) Entstehung des Abfall-Lösungsmittels. Dabei kann zwischen zwei Arten von Kriterien unterschieden werden. Zum einen gibt es Kriterien, die zwingend erfüllt werden müssen, damit eine Technologie eingesetzt werden kann (z.B. Einhaltung von Richtlinien, das Abfall-Lösungsmittel muss gewisse physikalische Eigenschaften wie Trennbarkeit aufweisen oder es müssen ausreichende Lagerkapazitäten vorhanden sein). Daneben werden Kriterien beurteilt, die je nach Sachverhalt die Entscheidungsfindung hinsichtlich einer Behandlungsoption oder Technologie begünstigen (z.B. Abfall-Lösungsmittel mit hohem C-Gehalt machen die Verbrennung wegen des hohen Brennwertes attraktiv, hingegen Gemische mit hohem Wasseranteil begünstigen die Entsorgung in der ARA). Eine Anforderung an alle Behandlungsoptionen ist die Sicherheit. Um dieser Anforderung zu genügen, müssen Vorschriften und interne Weisungen eingehalten werden. Detaillierte Ausführungen zu dieser Untersuchung können der Publikation Seyler et al., 2006 [46] entnommen werden.

Im Rahmen dieses Projektes konnten nicht alle in Abbildung 3 gezeigten Technologien berücksichtigt werden. Tabelle 1 zeigt die Technologieauswahl, die in diesem Projekt vertieft untersucht und verglichen wurde. Dabei wurde das Augenmerk hauptsächlich auf den Vergleich der thermischen und stofflichen ALM-Behandlung gelegt, da dies die wichtigsten Behandlungsoptionen für organische ALM sind (vgl. Abbildung 4).

Tabelle 1: Technologieauswahl, die im Rahmen dieses Projektes vertieft untersucht wurde.

ALM-Behandlungsoption	Berücksichtigte Technologie
Thermische Verwertung	Abfall-Lösungsmittelverwertungsanlage (ALV) Zementwerk
Stoffliche Verwertung	Lösungsmittelregeneration mittels Destillation
Entsorgung	Abwasserreinigungsanlage (ARA)

4.2. SYSTEMMODELL DER ÖKOBILANZ

Für die Bewertung der Umweltauswirkungen der verschiedenen Behandlungsoptionen mittels Ökobilanz muss ein Systemmodell erstellt werden. Dabei kann auf frühere Arbeiten zurückgegriffen werden [27,28]. Die Behandlungsoptionen können auf Grund einer gemeinsamen funktionellen Einheit, der Dienstleistung eines Lösungsmittels in der chemischen Produktion, verglichen werden. Der funktionellen Einheit vorgelagert ist die petrochemische Herstellung von Lösungsmittel. Die nachgelagerten Prozesse sind je nach Abfall-Lösungsmittelbehandlung verschieden. Wird das Abfall-Lösungsmittel verwertet, so wird das gemäss diesem Systemmodell mit ökologischen Gutschriften gewertet. Dem liegt die Annahme zugrunde, dass die Verwertung von Abfall-Lösungsmittel den Gebrauch von Rohmaterialien vermeidet. So wird die Erzeugung von Dampf und Strom mittels Abfall-Lösungsmittelverbrennung in dem Masse vergütet, wie die resultierende Umweltbelastung durch die Verbrennung von Heizöl wäre. Werden bei der Abfall-Lösungsmittelbehandlung Lösungsmittel zurückgewonnen, so entspricht die ökologische Gutschrift der Umweltbelastung der petrochemischen Lösungsmittelherstellung.

In Anlehnung an Tabelle 1, die die Auswahl an für dieses Projekt relevanten Technologien auflistet, können drei unterschiedliche Varianten definiert werden:

(1) Thermische Abfallbehandlung:

Das Abfall-Lösungsmittel wird thermisch verwertet. Die Verbrennung in der ALV führt zu Dampf und Stromproduktion. Eine ökologische Gutschrift wird gegeben, da die Energiebereitstellung mittels fossiler Energieträger vermieden wird. Bei der Verbrennung in Zementwerken wird direkt fossiler Brennstoff substituiert. Hier werden ökologische Gutschriften gemäss der eingesparten fossilen Energie gegeben.

(2) Recycling-System mit einem geschlossenen Kreislauf:

Das Abfall-Lösungsmittel wird rektifiziert. Die Rückstände werden thermisch verwertet oder kanalisiert. Das regenerierte Lösungsmittel wird im selben oder einem vergleichbaren Prozess wieder verwendet. Eine ökologische Gutschrift wird gegeben, da eine petrochemische Herstellung von hochwertigen Lösungsmitteln vermieden wird.

(3) Abwasserbehandlung:

Das Abfall-Lösungsmittel wird in einer Abwasser-Reinigungsanlage kanalisiert und somit entsorgt. Es werden keine ökologischen Gutschriften gegeben.

Abbildung 5 zeigt das Systemmodell der Ökobilanz mit den drei Varianten schematisch. Mit der Wahl dieses Systemmodelles werden für ein definiertes Abfall-Lösungsmittel die Varianten miteinander verglichen. Die Variante der Kanalisierung ist aber für die meisten Abfall-Lösungsmittel keine durchführbare Option (siehe auch Abbildung 4) und spielt deshalb in den folgenden Vergleichen nur eine untergeordnete Rolle.

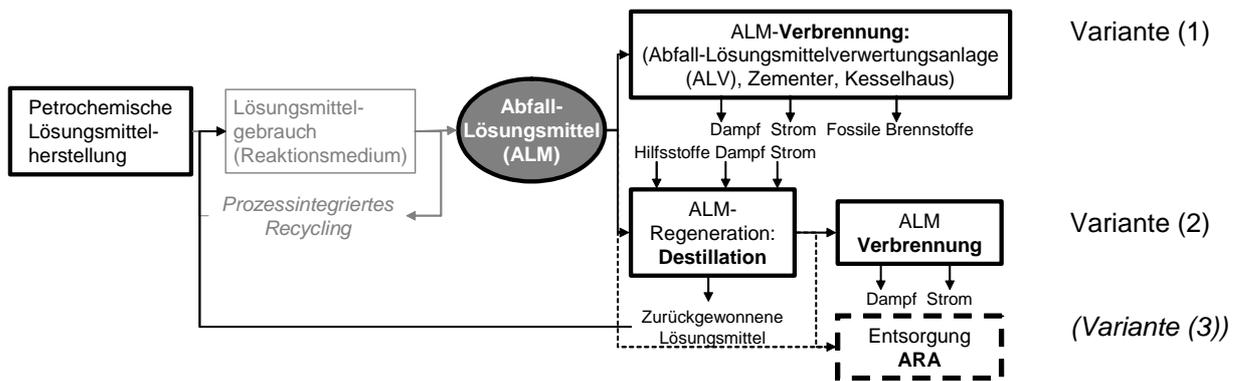


Abbildung 5: Systemmodell der drei untersuchten Varianten der Abfall-Lösungsmittelbehandlung. Die funktionelle Einheit wurde definiert als die Dienstleistung eines Lösungsmittels in einem Prozess der chemischen Industrie mit nachfolgender Behandlung in einer der drei Varianten. Variante (3) ist aber für die meisten Abfall-Lösungsmittel keine Option (vgl. Abb. 4).

4.3. INVENTARMODELLE

Damit die Umweltwirkungen der ausgewählten Technologien (vgl. Tabelle 1) für spezifische Abfall-Lösungsmittelgemische berechnet werden können, werden Inventarmodelle verwendet. Solche Inventarmodelle ermöglichen die Bestimmung von Inventardaten (Emissionen, Hilfsstoffverbräuche) für benutzerdefinierte Abfall-Lösungsmittel. Für die Inventarmodelle der Verbrennung in der ALV und Zementwerken sowie der Kanalisierung in ARA's wurde auf bestehende Arbeiten zurückgegriffen [38,47,48].

Die Inventarmodelle der Verbrennung berechnen Inventardaten als Funktion der elementaren Zusammensetzung und der Abfallmenge. Dabei werden physikalisch / chemische Beziehungen zwischen der Abfall-Lösungsmittelzusammensetzung und dem Verbrauch an Hilfsstoffen (z.B. Natronlauge, Eisenchlorid) und Energie (z.B. Strom), der Generierung von Ko-produkten (Dampf und Strom) sowie den Emissionen (z.B. CO₂, NO_x) benutzt, um sogenannte Verbrauchs- und Emissionsfaktoren sowie Transferkoeffizienten zu bestimmen. Die darauf basierenden Multi-Input Allokationsmodelle erlauben die Berechnung abfallspezifischer Inventare. Das Modell der ALV beschreibt eine Abfall-Lösungsmittelverwertungsanlage mit einer Jahreskapazität von rund 35'000 Tonnen, die sich in einem grossen Schweizer Chemiewerk befindet. In dieser Anlage werden hauptsächlich flüssige Abfälle (Lösungsmittel, Altöl, verunreinigte Abwässer) thermisch verwertet werden [48]. Das Modell des Zementwerkes beschreibt die Verwendung von Abfall-Lösungsmittel zur Substitution von Kohle und Schweröl in Zementwerken. Dieses Modell bildet dabei ein durchschnittliches Schweizer Zementwerk ab [47].

Das Inventarmodell der Abwasserreinigungsanlage ist vergleichbar zu den Inventarmodellen der Verbrennung. Mit diesem Modell wird das abfallspezifische Inventar berechnet als Funktion der Abwasserzusammensetzung (z.B. TOC-Gehalt). Das Modell basiert ebenfalls auf Industriedaten. Verbrauchs- und Emissionsfaktoren sowie Transferkoeffizienten wurden bestimmt für verschiedene Reinigungsstufen der ARA (mechanisch-biologische Stufe, Extraktion, Umkehrosiose) [38].

Für das Inventarmodell der Destillation war es nicht möglich, ein der Verbrennung und Abwasserreinigungsanlage analoger Modelltyp basierend auf physikalisch / chemischen Zusammenhängen zu erstellen. Der Grund dazu ist, dass Destillationsprozesse sehr spezifisch sind, da je nach Reinheitsanforderung an das Destillat, Gemischzusammensetzung und Destillationsequipment die Aufwendungen bzw. die Ausbeute und die Menge und Art der Hilfsstoffe variieren. Allgemeine Informationen über Abfall-Lösungsmitteldestillationen sind daher selten und beschränken sich meist nur auf Fallbeispiele (vgl. z.B. [27,31]). Zur Bestimmung der Umweltwirkung von Destillationsprozessen im Rahmen der Ökobilanzmethodik müssen die folgenden Parameter quantifiziert werden: der Aufwand an Dampf (Heizen), Strom (Pumpen), Stickstoff (Inertisierung), Hilfsstoffen (pH-Korrektur, Reinigung der Anlage, Schlepplmittel) und Kühlwasser (Kondensator) sowie die Menge an Destillat, Abluft und organischen und wässrigen Rückständen.

Das Inventarmodell der Destillation beruht auf empirischen Beziehungen. So wurden für jeden Inventarparameter statistisch robuste Wertebereiche bestimmt, die die Variabilitäten auf Grund von unterschiedlichen Gemischzusammensetzungen, Destillatsreinheiten und Destillationsequipment

mitberücksichtigen. Zu diesem Zweck wurden in Zusammenarbeit mit der chemischen Industrie Daten zu rund 150 Abfall-Lösungsmitteldestillationen erhoben und statistisch ausgewertet. Die Stichprobe beinhaltete Gemische, deren zurückgewonnene Lösungsmittel Siedepunkte zwischen 50°C und 200°C und einen Feststoffanteil von maximal 10 gew.% hatten. Das Destillationsequipment bestand aus grosstechnischen Destillationsanlagen, die sowohl kontinuierlich als auch batchweise betrieben wurden. In einer ersten Analyse wurden für jeden Parameter statistische Minimum-, Maximum- und Durchschnittswerte aus der gesamten Stichprobe bestimmt. Dazu wurde das empirische 95%-Intervall verwendet, um robustere Werte zu erhalten. Diese Resultate werden in Abbildung 6 gezeigt (Quelle: Capello et al., 2005 [7]).

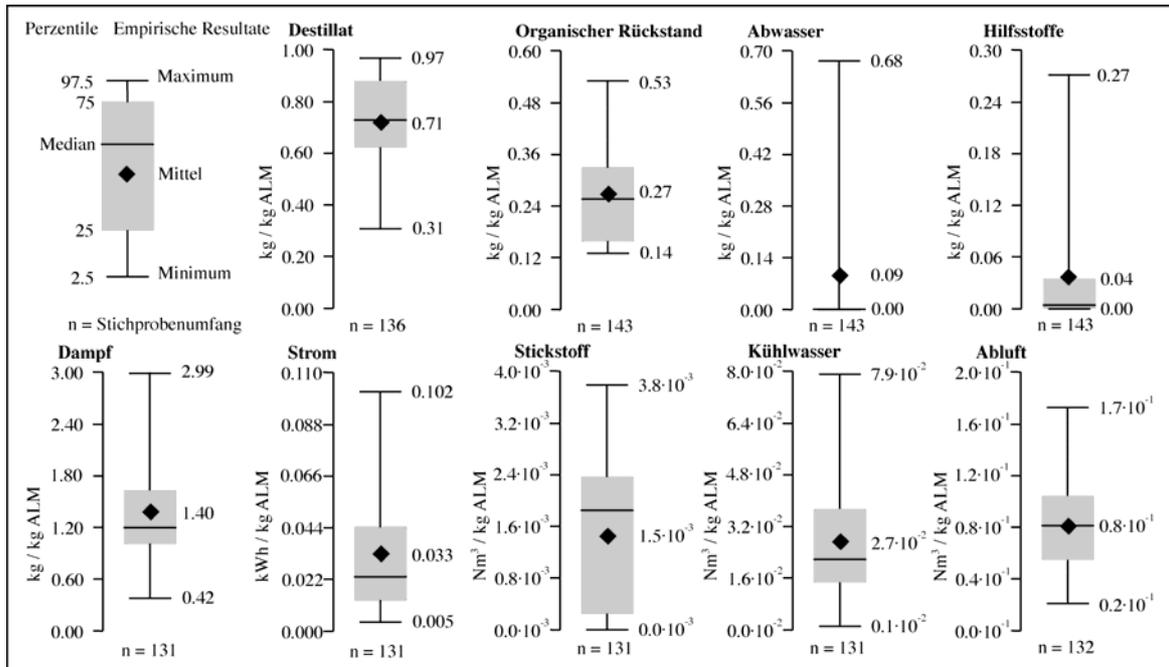


Abbildung 6: Generische Wertebereiche aller Inventarparameter der Destillation. Diese Resultate basieren auf der gesamten Stichprobenmenge von rund 150 Destillationen. Quelle: Capello et al. 2005 [7].

Weiterführend zu dieser deskriptiven Statistik wurde untersucht, wie die Variabilität der einzelnen Parameter beeinflusst wird. Zu diesem Zweck wurde mittels statistischer Tests geprüft, ob die Technologie (Batch- oder kontinuierliche Destillation) oder die Zusammensetzung des Abfall-Lösungsmittelgemisches (pH, Polarität und Siedepunkt) einen signifikanten Einfluss auf die Variabilität haben. Diese Untersuchung ermöglichte die Einteilung der Destillationsparameter in 3 Gruppen. Die erste Gruppe beinhaltet die Inventarparameter, deren Variabilität weder von der Technologie noch von der Zusammensetzung des Gemisches abhängt. Es sind dies Kühlwasser und Strom. Die Inventarparameter der zweiten Gruppe weisen signifikant verschiedene Werte für Batch- und kontinuierliche Destillationen auf. Dazu gehören der Aufwand an Stickstoff und Dampf sowie die Menge an Destillat, organischen Rückständen und Abluft. Die dritte Gruppe beinhaltet Inventarparameter, die von der Zusammensetzung des Abfall-Lösungsmittelgemisches abhängen. Dies sind die Menge Hilfsstoffe und Abwasser. Innerhalb dieser Gruppen war es nun wiederum möglich, empirische 95% Intervalle mit neuen Minimum-, Maximum- und Mittelwerten zu bilden. Diese Wertebereiche sind meist enger und geben daher genauere Wertebereiche an, aber sie erfordern auch ein höheres Mass an Information über einen Destillationsprozess. Zusätzlich zu den empirischen Wertebereichen wurden für jede Untergruppe auch Wahrscheinlichkeitsverteilungen angepasst. Die Beschreibung der Variabilität der Untergruppen mittels solcher Wahrscheinlichkeitsmodelle ermöglicht die Verwendung der Resultate für quantitative Unsicherheitsbetrachtungen (Monte-Carlo Analyse) [54]. Detaillierte Ausführungen und Resultate zu dieser statistischen Auswertung können aus Capello et al., 2005 [7] entnommen werden.

4.4. DAS SOFTWARE-TOOL ECOSOLVENT

4.4.1. Aufbau des *ecosolvent Tools*

Um die Behandlung eines spezifischen Abfall-Lösungsmittelgemisches mit verschiedenen Technologien ökologisch zu vergleichen, wurde das Software Tool „*ecosolvent*“ entwickelt [8]. Das *ecosolvent Tool* vereint die Inventarmodelle der Verbrennung (ALV [48] und Zementwerk [47]), der Abwasserreinigungsanlage [38] und der Destillation [7]. Um die Sachbilanz zu vervollständigen, müssen die mit den Inventarmodellen berechneten Vordergrundinventare (z.B. ALV benötigt x kWh Strom und die Destillation y kg Schleppmittel) verknüpft werden mit den Hintergrundinventaren (vorgelagerte Produktionsketten von Lösungsmitteln, Hilfsstoffen, Treibstoffen, Energie, etc.). Diese Hintergrundinventare wurden aus der Inventardatenbank „ecoinvent [12]“ bezogen, aus Industriedaten abgeleitet oder im Falle der Lösungsmittel zu einem grossen Teil selbst erstellt. Dabei gilt es zu beachten, dass von den 50 Lösungsmitteln (Tabelle 4, Anhang) lediglich 45 im *ecosolvent Tool V1.0* enthalten sind, da einige Inventararbeiten noch im Gange sind (vgl. Angaben in Tabelle 4, Anhang). Abbildung 7 zeigt schematisch die Sachbilanz im *ecosolvent Tool* erstellt wird.

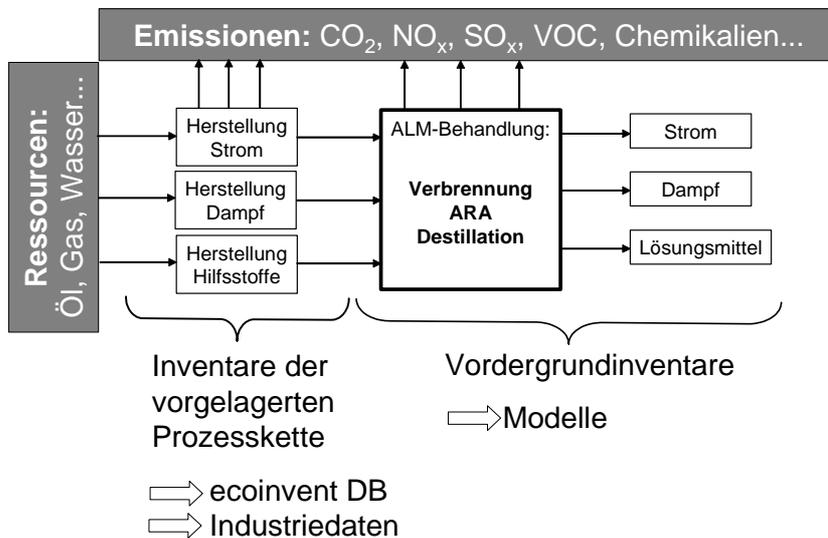


Abbildung 7: Die Sachbilanz im *ecosolvent Tool* setzt sich zusammen aus den berechneten Vordergrundinventaren (Modelle ALV, Zementwerk, ARA, Destillation) und den damit verknüpften Hintergrundinventaren, die grossteils aus der ecoinvent Datenbank [12] stammen oder im Falle der Lösungsmittel selbst erhoben wurden (Tabelle 4, Anhang).

Zur Benutzung des *ecosolvent Tools* muss eine Abfall-Lösungsmittelzusammensetzung vom Benutzer spezifiziert werden und welche Technologien miteinander verglichen werden sollen. Falls zusätzliche Informationen zu den Behandlungstechnologien, v.a. zur Destillation zur Verfügung stehen, so können diese ebenfalls eingegeben werden. Es werden dabei drei Informationslevel unterschieden:

- **Level 1: Volle Information verfügbar.**

Es stehen genaue Angaben zur Verfügung. Für die Destillation sind Messdaten oder Simulationswerte für die Destillationsparameter vorhanden (z.B. Dampfverbrauch) und für die Verbrennung ist z.B. die Effizienz der DeNO_x-Anlage bekannt.

- **Level 2: Informationen sind nur teilweise verfügbar.**

Beispielsweise kennt man die Destillationstechnologie (Batch oder kont. Destillation) aber die genaue Ausbeute ist unbekannt oder man weiss, dass Schleppmittel für die Destillation benötigt wird, kennt aber die genaue Menge nicht.

- **Level 3: keine zusätzlichen Informationen verfügbar.**

Es sind nur die Behandlungsoptionen und die Abfall-Lösungsmittelzusammensetzung sind bekannt (z.B. kann für die Destillation nicht bestimmt werden, ob sie im batch oder kontinuierlichen Betrieb durchgeführt wird).

Das *ecosolvent Tool* ist hierarchisch organisiert: Level 1→Level 2→Level 3. Das Prinzip im *ecosolvent Tool* ist, mit zunehmender Verfügbarkeit von Information mit immer genaueren Wertebereichen zu rechnen. Für die Destillation bedeutet dies, dass wenn keine Information über einen Destillationsparameter zur Verfügung steht, mit den generischen Wertebereichen (angepassten Wahrscheinlichkeitsfunktionen) gerechnet wird, die in Abbildung 6 gezeigt werden (Level 3). Wenn wenig Information zur Verfügung steht, werden die genaueren Wertebereiche der Untergruppen verwendet (Level 2). Sind aber genaue Informationen vorhanden (z.B. auf Grund von Messungen an der Destillationskolonne), werden auch diese im Modell verwendet (Level 1). Dabei wird für jeden Parameter spezifisch analysiert, welche Informationen vorliegen. Das bedeutet, dass z.B. der Dampfbedarf einer Destillation gemessen wird (Level 1), der Kühlwasserbedarf hingegen ist gänzlich unbekannt (Level 3). Allgemein gilt, je höher der Informationslevel, desto genauer werden die berechneten Resultate (vgl. auch Abschnitt 4.4.2. Unsicherheitsquantifizierung). Abbildung 8 verdeutlicht dieses Konzept der verschiedenen Informationslevel und zeigt schematisch, wie das *ecosolvent Tool* funktioniert.

4.4.2. Unsicherheitsquantifizierung der Sachbilanz

Bei der Berechnung der Inventardaten mit dem *ecosolvent Tool* werden Parameterunsicherheiten quantitativ erfasst. Dies wird mittels quantitativer stochastischer Modellierung (Monte Carlo Analyse) erreicht [54]. Zu diesem Zweck werden Wahrscheinlichkeitsverteilungen für alle Modellparameter benutzt, um deren jeweilige Variabilität zu beschreiben. Für die Destillationsparameter wurden solche Wahrscheinlichkeitsverteilungen aus Capello et al. [7], für die ALV aus Seyler et al. [48], für das Zementwerk aus Seyler et al. [47] und Baumbach [1] und für die Abwasserreinigungsanlage aus Köhler et al. [38] entnommen. Für die Hintergrundinventare wurden die Unsicherheitsinformationen aus der *ecoinvent* Datenbank [12] oder generische Unsicherheitsfaktoren (veröffentlicht von Finnveden und Lindfors [19] und interpretiert als Dispersionsfaktoren von Huijbregts [30]) benutzt, um Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die einzelnen Inventare abzuleiten. Als Resultat dieser stochastischen Modellierung werden alle berechneten Inventarparameter mit einem Unsicherheitsbereich angegeben.

4.4.3. Wirkungsabschätzung

Für die Wirkungsabschätzung im Rahmen der Ökobilanz stehen zahlreiche Methoden zur Verfügung. Für das *ecosolvent Tool* wurde die folgende Auswahl implementiert:

Eco-indicator 99 (H/A): Mit dieser Bewertungsmethode wird versucht, für alle Emissionen und Ressourcenverbräuche einen Schaden zu quantifizieren. Im *ecosolvent Tool* wird der vollaggregierte Indikator (durchschnittliche hierarchische Perspektive (H/A)) angewendet [23].

Methode der ökologischen Knappheit (UBP'97): In dieser Methode werden sog. Ökofaktoren verwendet, die aktuelle Verschmutzungslevel mit kritischen Flüssen vergleichen. Diese kritischen Flüsse werden von den gesetzlichen Zielen der Schweizerischen Umweltpolitik abgeleitet [24].

Global Warming Potential (GWP): Das Global Warming Potential quantifiziert den Beitrag von Treibhausgasen zur Klimaerwärmung. Dieses Klimaerwärmungspotential wird gemäss den veröffentlichten Faktoren des Intergovernmental Panel of Climate Change (IPCC) berechnet. Es wurden die Faktoren der 100 jährigen Perspektive verwendet [33].

Cumulative Energy Demand (CED): Mit der Methode des Cumulative Energy Demand wird der Primärenergiebedarf berechnet [36].

CO₂-balance: Berechnet die CO₂-Bilanz.

CO₂-balance without waste emissions: Bei dieser Methode wird ebenfalls die CO₂-Bilanz berechnet. Allerdings werden keine CO₂ Emissionen aufgeführt, die direkt aus der Verbrennung von Abfall (Abfall-Lösungsmittel) hervorgehen. Diese Methode trägt einer möglichen Besteuerung der CO₂ Emissionen Rechnung, wie sie in der Schweiz geplant ist. Dabei werden CO₂ Emissionen aus der Abfallverbrennung nicht besteuert werden [45].

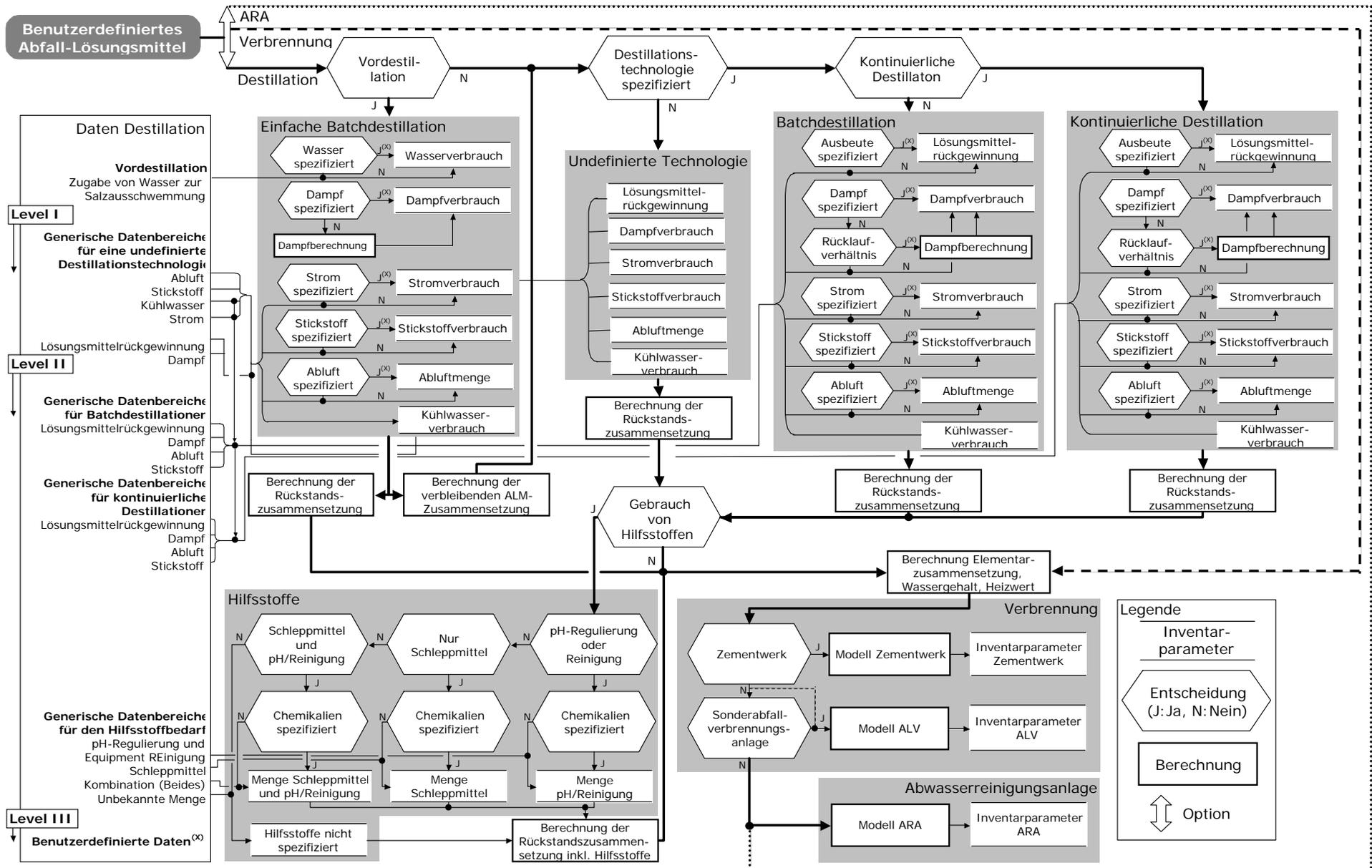


Abbildung 8: Schematische Darstellung der Funktionsweise des *ecosolvent Tools*. Quelle: Capello et al., 2006 [6].

4.4.4. Technische Angaben zum *ecosolvent Tool*

Das *ecosolvent Tool* wurde im Rahmen des BfE-Zusatzprojektes Nr. 101743 vollständig in JAVA™ (ab JAVA 1.4.) programmiert [52]. Es ist somit lauffähig auf gängigen Plattformen (Windows, MacOS X, Unix). Das *ecosolvent Tool* ist eine Open Source Software und ist frei erhältlich unter

www.sust-chem.ethz.ch/tools/ecosolvent

Ebenfalls unter dieser Adresse können das Benutzerhandbuch und die Code-Dokumentation bezogen werden.

4.4.5. Fallbeispiel Toluol-Gemisch

Die Benutzung des *ecosolvent Tools* wird im Folgenden anhand eines Fallbeispiels aufgezeigt. Ausgangslage ist ein Toluol-Gemisch (Toluol 98%, Methanol 1,5%, Wasser 0.5%), das in der Industrie zwecks Toluol-Rückgewinnung destilliert wird (Option Destillation, Abb 9) [29]. Alternativ dazu kann das Gemisch aber auch in der ALV thermisch verwertet werden (Option Verbrennung, Abb. 9). Abbildung 9 zeigt die möglichen Behandlungsoptionen des Toluol-Gemisches im Detail. Zudem sind in Abbildung 9 alle bekannten Informationen zum industriellen Destillationsprozess aufgelistet. Die Mengenangaben beziehen sich auf 13760kg Toluol-Gemisch, was einem Batch der Destillation entspricht.

Mögliche Behandlungsoptionen	Angaben zur Destillation																																																													
<p><i>Option Destillation</i></p> <p><i>Option Verbrennung</i></p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="3">Input D1 (Batch)</th> <th colspan="3">Output D1</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>ALM</td> <td>Toluol</td> <td>13485 kg</td> <td>Produkt</td> <td>Toluol (99.5%)</td> <td>11610 kg</td> </tr> <tr> <td></td> <td>Methanol</td> <td>206 kg</td> <td></td> <td>Toluol</td> <td>11552 kg</td> </tr> <tr> <td></td> <td>Wasser</td> <td>69 kg</td> <td></td> <td>Methanol</td> <td>46 kg</td> </tr> <tr> <td></td> <td>Hiifst.</td> <td>Methanol</td> <td></td> <td>Wasser</td> <td>12 kg</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td>500 kg</td> <td></td> <td colspan="2"><i>Rückstand -> Verbrennung</i></td> </tr> <tr> <td>Energien</td> <td>Strommenge</td> <td>unbekannt</td> <td></td> <td>Toluol</td> <td>1933 kg</td> </tr> <tr> <td></td> <td>Stromproduktion</td> <td>CH</td> <td></td> <td>Methanol</td> <td>160 kg</td> </tr> <tr> <td></td> <td>Dampfmenge</td> <td>unbekannt</td> <td></td> <td>Wasser</td> <td>57 kg</td> </tr> <tr> <td></td> <td>Dampfproduktion</td> <td>aus ALM</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	Input D1 (Batch)			Output D1			ALM	Toluol	13485 kg	Produkt	Toluol (99.5%)	11610 kg		Methanol	206 kg		Toluol	11552 kg		Wasser	69 kg		Methanol	46 kg		Hiifst.	Methanol		Wasser	12 kg			500 kg		<i>Rückstand -> Verbrennung</i>		Energien	Strommenge	unbekannt		Toluol	1933 kg		Stromproduktion	CH		Methanol	160 kg		Dampfmenge	unbekannt		Wasser	57 kg		Dampfproduktion	aus ALM				
Input D1 (Batch)			Output D1																																																											
ALM	Toluol	13485 kg	Produkt	Toluol (99.5%)	11610 kg																																																									
	Methanol	206 kg		Toluol	11552 kg																																																									
	Wasser	69 kg		Methanol	46 kg																																																									
	Hiifst.	Methanol		Wasser	12 kg																																																									
		500 kg		<i>Rückstand -> Verbrennung</i>																																																										
Energien	Strommenge	unbekannt		Toluol	1933 kg																																																									
	Stromproduktion	CH		Methanol	160 kg																																																									
	Dampfmenge	unbekannt		Wasser	57 kg																																																									
	Dampfproduktion	aus ALM																																																												

Abbildung 9: Behandlungsoptionen des Toluol-Gemisches und Informationen zur Destillation.

Eingabe des Toluol-Gemisches im *ecosolvent Tool*:

Abbildung 10 zeigt, wie in einem ersten Schritt die drei Komponenten des Toluol-Gemisches (1) und die zu vergleichenden Technologien (2) spezifiziert werden. Die Eingabe von bis zu vier Lösungsmittelkomponenten und zusätzlichen Verunreinigungen durch Salze, Metalle oder andere Feststoffe ist im *ecosolvent Tool* möglich (Abbildung 10).

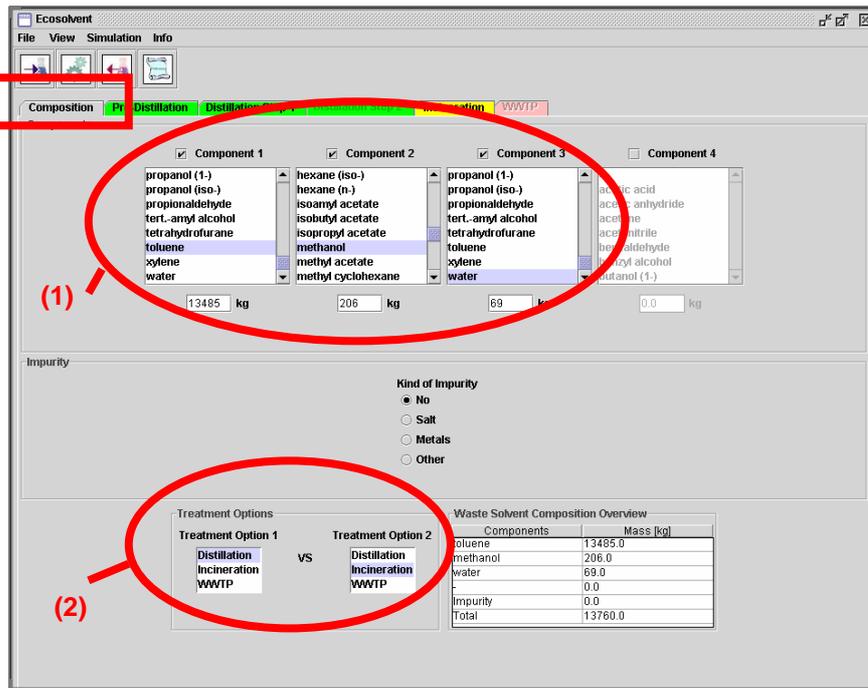


Abbildung 10: Eingabe der Lösungsmittelzusammensetzung (1) sowie der zu vergleichenden Behandlungstechnologien (2) im *ecosolvent Tool* für das Toluol-Gemisch.

In einem zweiten Schritt werden die Informationen zur Destillation eingegeben (Abbildung 11). Spezifiziert werden die Destillationstechnologie (Batch) (1), die zurückgewonnene Menge (11610 kg Toluol) und Reinheit des Lösungsmittels (99.5%) (2), der Gebrauch von Hilfsstoffen (500 kg Methanol) (3), die Behandlung des Rückstandes („waste-solvent incineration, WSI“) (4), die Energie (Dampf und Strom) (5) und weitere Parameter (Abluftbehandlung, Stickstoffverbrauch, Transport) (6). Für die Verbrennung muss lediglich die Technologie spezifiziert werden (ALV oder Zementwerk) (7).



Abbildung 11: Angaben zur Destillation. In dieser Eingabemaske werden Destillationstechnologie (1), regeneriertes Lösungsmittel (1), Menge (2), Reinheit (2), Hilfsstoffe (3), Rückstandbehandlung (4), Energie (5) und weitere Parameter (6) der Destillation angegeben. Die Angaben zur Verbrennungstechnologie werden unter „Incineration“ (7) gemacht.

Das Resultat der Wirkungsabschätzung des Toluol-Gemisches wird in Abbildung 12 gezeigt für die Bewertungsmethode „Global Warming Potential (GWP)“. Dabei wird die Umweltwirkung in CO₂-Equivalenten ausgedrückt. Positive Werte (>0) entsprechen einer Umweltbelastung (z.B. wegen der benötigten Energie in der Destillation oder der direkten Emissionen in der Verbrennung). Negative Werte (<0) hingegen bezeichnen Umweltgutschriften (z.B. für die Lösungsmittel- oder Energierückgewinnung, vgl. Abschnitt 4.2, Systemmodell der Ökobilanz). Die Resultate werden auf Grund der Unsicherheitsanalyse (Monte Carlo Analyse, vgl. Abschnitt 4.4.2.) als Box-Whisker Plots dargestellt, wobei das 2.5te, 25igste, 50igste, 75igste und 97.5te Perzentil der berechneten Unsicherheitsverteilungen der Resultate gezeigt werden.

Anhand dieses Resultateplots können die einzelnen Beiträge, die zur Umweltwirkung einer Behandlungsoption führen untersucht werden. So zeigt sich, dass das Resultat der Destillation hauptsächlich durch die Gutschriften der Toluolrückgewinnung zustande kommt (D1: Solvent recovery). Ein weiterer wichtiger Beitrag kommt auch von der Energie, die für die Destillation benötigt wird (D1: Energy). Das totale Global Warming Potential der Destillation der 13760 kg Toluol-Gemisch liegt im Bereich von 8000 und 20000 kg CO₂-Equivalenten (D: Total Distillation). Dies liegt unter der totalen Umweltwirkung der Verbrennung, die zwischen 25000 und 50000 kg CO₂-Equivalenten verursacht (I: Total Incineration). Daher ist die Destillation - für dieses spezifische Gemisch und aus Sicht dieser Wirkungsabschätzungsmethode - der Verbrennung aus ökologischen Gründen vorzuziehen. Im *ecosolvent Tool* stehen neben diesem Übersichtsplot auch Reports für weiterführende Analysen zur Verfügung, die auch als pdf Dateien abgespeichert oder nach MS Excel exportiert werden können. Weitere Fallbeispiele sind im *ecosolvent* Benutzerhandbuch enthalten [8].

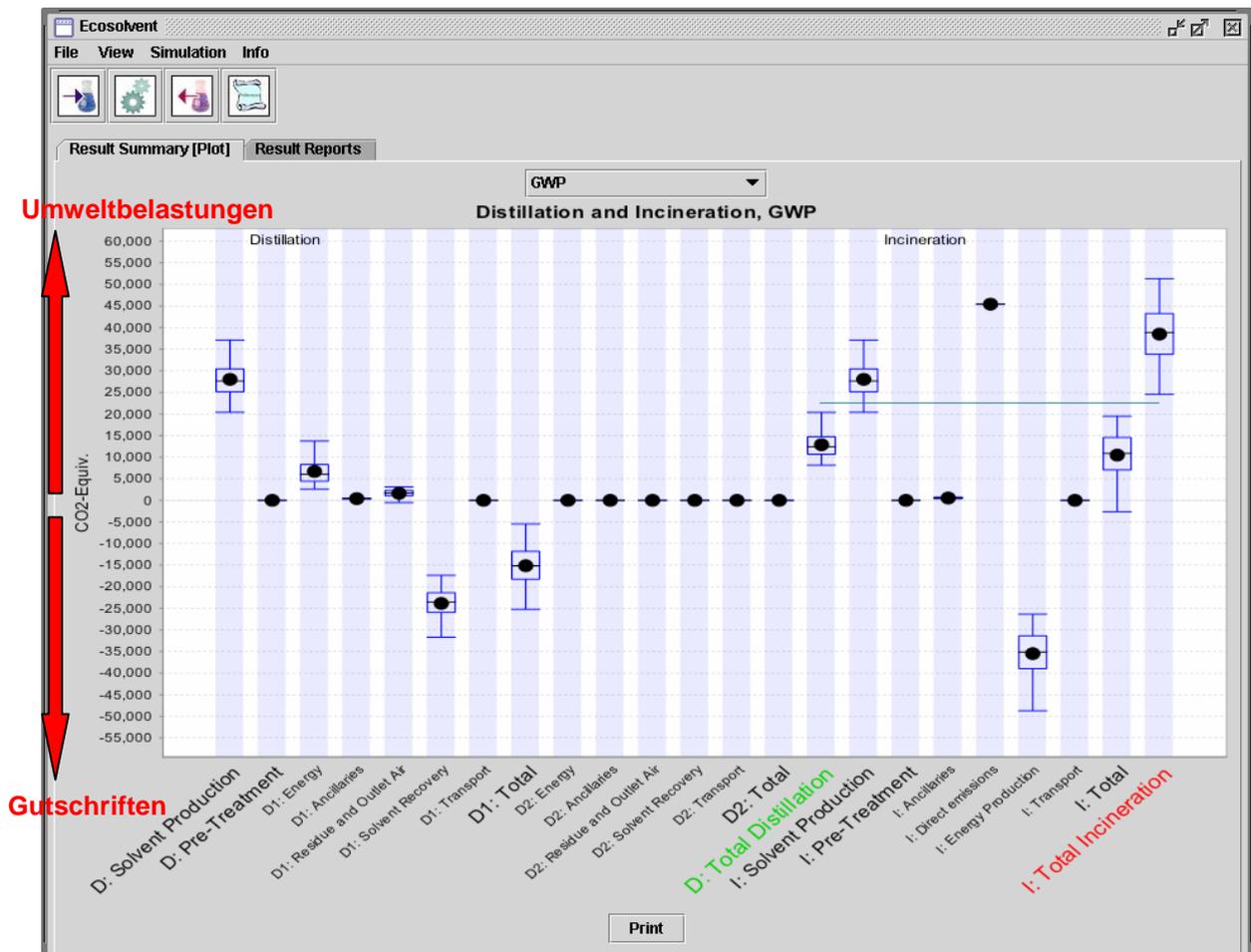


Abbildung 12: Wirkungsabschätzung des Toluol-Gemisches mittels „Global Warming Potential“. Positive Werte entsprechen Umweltbelastungen; Umweltgutschriften werden als negative Werte dargestellt. Die Destillation des Toluol-Gemisches führt zu einer niedrigeren Umweltbelastung (D: Total Distillation) als die Verbrennung (I: Total Incineration).

4.5. SYSTEMATISCHE BEWERTUNG DER ABFALL-LÖSUNGSMITTELBEHANDLUNG

Um allgemeingültige Resultate oder „Daumenregeln“ zu erarbeiten, wurde das *ecosolvent Tool* verwendet, um systematisch Abfall-Lösungsmittelgemische zu testen. Zu diesem Zweck wurde untersucht, ob (1) eine Technologie (ALV, Zementwerk, Destillation) grundsätzlich, d.h. unabhängig der Abfallzusammensetzung, ökologisch besser ist als andere Technologien und (2) ob für spezifische Lösungsmittel generell eine Technologie aus ökologischer Sicht zu bevorzugen ist.

4.5.1. Technologiebewertung

Um zu eruieren, ob eine bestimmte Technologie grundsätzlich ökologisch besser ist, wurden die potentiell möglichen Umweltwirkungen durch die Abfall-Lösungsmittelbehandlung in den Technologien Destillation, ALV, Zementwerk für die Wirkungsabschätzungsmethoden Eco-indicator 99, Methode der ökologischen Knappheit, Cumulative Energy Demand und Global Warming Potential berechnet. Die Umweltwirkung einer Technologie setzt sich zusammen aus den Umweltwirkungen der einzelnen Inventarparameter (Emissionen, Hilfsstoffverbräuche, Energie und ökologischen Gutschriften). Zur Berechnung der potentiell möglichen Umweltwirkung wurde ein ökologisches Bestcase (minimale Umweltbelastung) und Worstcase (maximale Umweltbelastung) Szenario gerechnet, d.h. das Abfall-Lösungsmittelgemisch so definiert, dass die Inventarparameter einen maximal möglichen (Worstcase) oder minimal möglichen (Bestcase) Wert erhalten. Einen detaillierten Beschrieb der Inventarparameter und der Annahmen für die beiden Szenarien sind im Anhang gegeben und wurden ausführlich behandelt in Capello et al. 2006 [9].

Das Resultat der Technologiebewertung zeigt, dass mit allen Wirkungsabschätzungen die Umweltwirkungen der einzelnen Technologien überlappen (Abbildung 13). Das bedeutet, dass keine Technologie als grundsätzlich ökologisch besser betrachtet werden kann. Allgemeingültige Resultate können somit nur für spezifische Lösungsmittel, nicht aber auf Ebene Technologie getroffen werden.

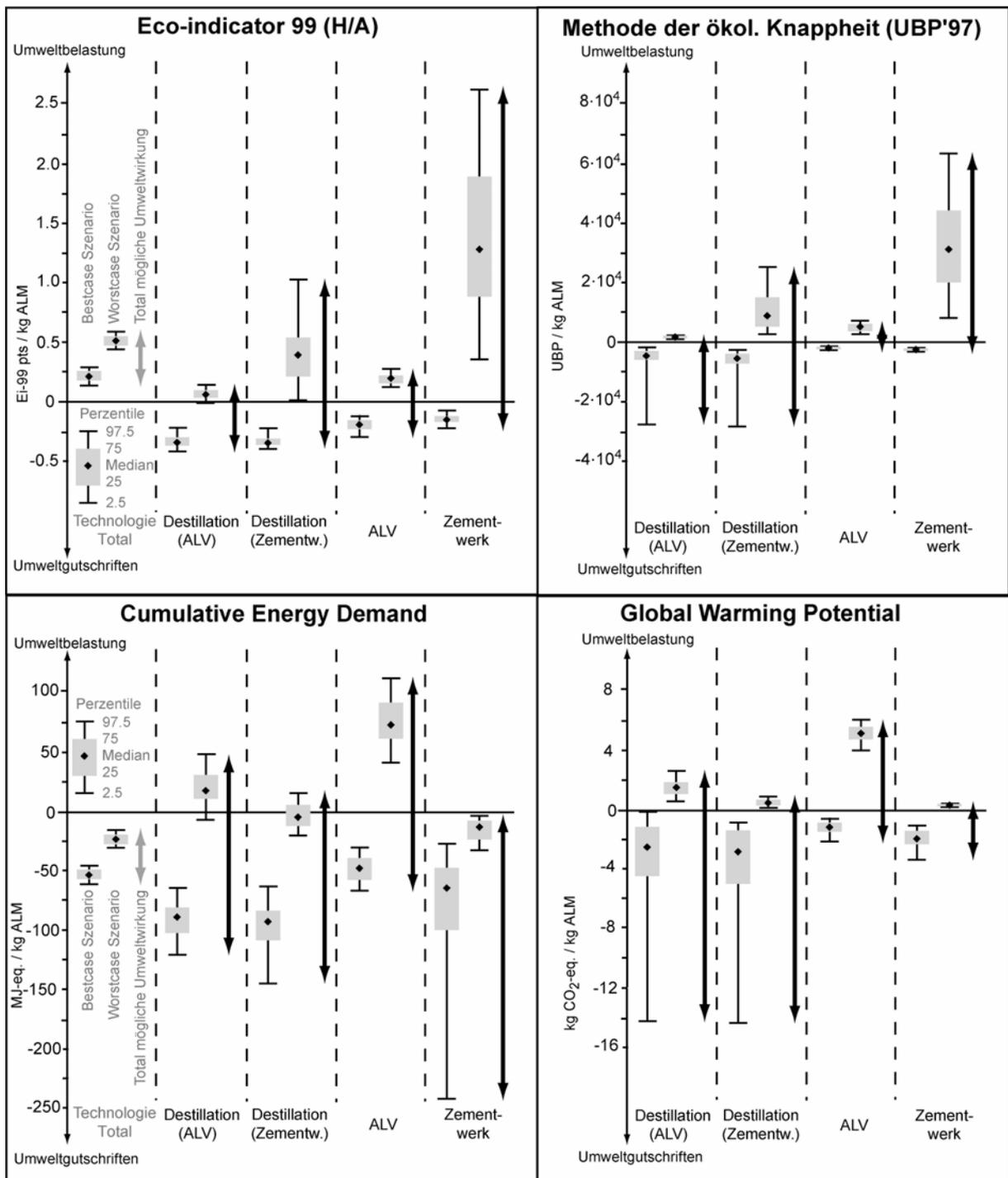


Abbildung 13: Potentielle Umweltwirkung (Belastungen und Gutschriften) der drei Behandlungstechnologien. Für die Destillation werden sowohl für eine Rückstandsbehandlung in der ALV als auch dem Zementwerk Resultate gezeigt. Quelle: Capello et al., 2006 [9].

4.5.2. Lösungsmittelbewertung

Zur Bestimmung lösungsmittelspezifischer Resultat wurden die 45 in *ecosolvent* enthaltenen Lösungsmittel (vgl. Tabelle 4, Anhang) jeweils mit einer definierten Nebenkomponente als binäre Gemische untersucht. Für die Behandlung dieser binären Gemische mittels Destillation, ALV oder Zementwerk wurden drei Szenarien berücksichtigt, die eine minimale, mittlere und maximale Umweltwirkung repräsentieren. Dazu wurde zum einen die mittels Monte Carlo Analyse berechnete Parameterunsicherheit verwendet (2.5tes, 50igstes, 97.5tes Perzentil) und zum anderen wurden im Fall der Destillation noch zusätzliche Annahmen zur Dampf- und Stromproduktion, dem Einsatz von Hilfsstoffen und der Abluftbehandlung getroffen (Tabelle 2).

Tabelle 2: Szenariodefinition für die Lösungsmittelspezifische Bewertung.

Modell Destillation					
<i>Szenario</i>	<i>Dampfproduktion</i>	<i>Einsatz von Hilfsstoffen</i>	<i>Abluftbehandlung</i>	<i>Energiebedarf (Dampf, Strom, Stickstoff)</i>	<i>Parameterunsicherheit</i>
Minimale Umweltwirkung Destillation	Abfallverbrennung	keine	Abluftverbrennung	Generischer Wertebereich kontinuierliche Destillation	Bestcase: 2.5tes Perzentil
Mittlere Umweltwirkung Destillation	Abfallverbrennung	pH Regulierung und Reinigungsmittel	Abluftverbrennung	Generischer Wertebereich kontinuierliche Destillation	Durchschnitt: 50igstes Perzentil
Maximale Umweltwirkung Destillation	Verbrennung fossile Brennstoffe	Schleppmittel	Emission von Abluft als NMVOC (Non-methane volatile organic carbon)	Generischer Wertebereich Batchdestillation	Worstcase 97.5igstes Perzentil
Modelle Verbrennung (ALV und Zementwerk)					
Minimale Umweltwirkung Verbrennung	-	-	-	-	Bestcase: 2.5tes Perzentil
Mittlere Umweltwirkung Verbrennung	-	-	-	-	Durchschnitt: 50igstes Perzentil
Maximale Umweltwirkung Verbrennung	-	-	-	-	Worstcase 97.5tes Perzentil

Zusätzlich zu der in Tabelle 2 beschriebenen Szenariodefinitionen wurde angenommen, dass die Destillationsrückstände thermisch verwertet werden (ALV). Die Menge des zurückgewonnenen Lösungsmittels wurde speziell berücksichtigt, da es sich dabei um eine Schlüsselgrösse der Destillation handelt, wie frühere Studien bereits gezeigt haben [6,29].

In einem ersten Schritt wurde untersucht, für welche Lösungsmittel und Prozessbedingungen die Destillation ökologisch besser ist als die Verbrennung. Für diesen Vergleich wurde angenommen, dass jedes der 45 Lösungsmittel in dem jeweiligen binären Gemisch als Hauptkomponente vorliegt. Die Zweitkomponente wurde so gewählt, dass sie in der Verbrennung minimale Umweltwirkung zeigt. Der Anteil der Hauptkomponente wurde kontinuierlich erhöht von minimal 0.34 kg / kg ALM bis zu maximal 0.98 kg / kg ALM. Als Lösungsmittelrückgewinnungsrate wurden 90% angenommen für einen Hauptkomponentenanteil von kleiner als 0.9 kg/kg ALM. Bei steigendem Anteil der Hauptkomponente wurde die Lösungsmittelrückgewinnungsrate kontinuierlich auf bis 99% erhöht. Mit diesen Annahmen variiert die Menge des zurückgewonnenen Lösungsmittels von 0.31 kg / kg ALM bis 0.97 kg / kg ALM, was dem Wertebereich aus der chemischen Industrie entspricht (vgl. statistische Untersuchung der 150 Destillationen, Abbildung 6).

Mit diesen Annahmen wird die Umweltwirkung von Destillation und Verbrennung als Funktion der Lösungsmittelrückgewinnung berechnet: Mit zunehmendem Anteil der Hauptkomponente im binären Gemisch verbessert sich die Umweltwirkung der Destillation wegen der Erhöhung der ökologischen Gutschriften. Die Umweltwirkung der Verbrennung hingegen verschlechtert sich, da sich der Anteil der für Verbrennungsanlagen optimalen Zweitkomponente verringert. Mit dieser Vorgehensweise lässt sich die Lösungsmittelrückgewinnungen bestimmen wo beide Technologien die gleiche Umweltwirkung aufweisen. Dabei wurden die drei Szenarien der Destillation mit der minimalen Umweltwirkung der Verbrennung verglichen.

Abbildung 14 illustriert dieses Vorgehen am Beispiel der Monochlorbenzol (Hauptkomponente) / Pentan Mischung. Im Bestcase Szenario ist die Destillation immer die ökologisch bessere Behandlungstechnologie als die ALV. Das Durchschnittsszenario zeigt, dass die Destillation ökologisch besser wird als die ALV sobald eine Lösungsmittelrückgewinnung von 0.48 kg / kg ALM erreicht wird (Punkt B in Abbildung 14). Bei einer Lösungsmittelrückgewinnung von über 0.85 kg / kg ALM wird die Destillation generell zur ökologisch besseren Behandlungstechnologie, sogar unter Annahme des Worstcase Szenarios (Punkt A in Abbildung 14).

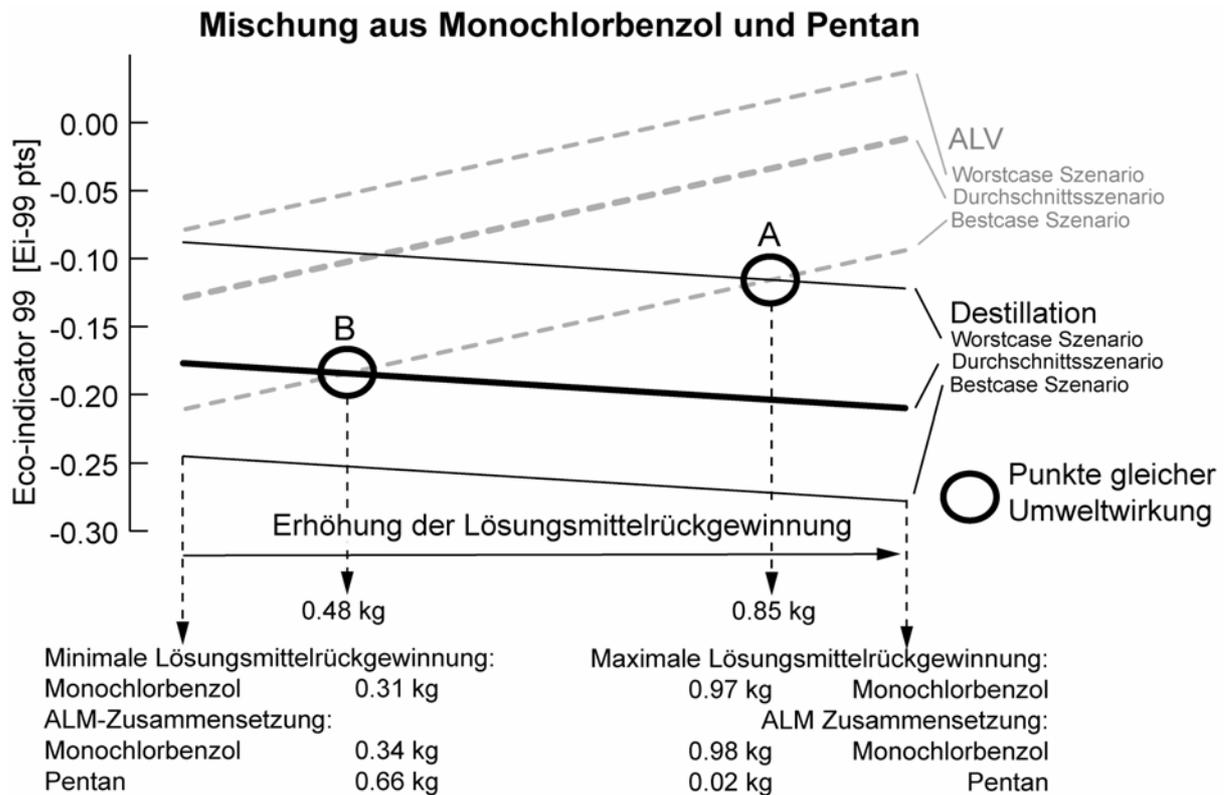


Abbildung 14 Berechnung der Umweltwirkung von einem Kilogramm Lösungsmittelgemisch als Funktion der Lösungsmittelrückgewinnung. Mit steigender Lösungsmittelrückgewinnung (d.h. höherem Anteil der Hauptkomponente (hier Monochlorbenzol)) erhält die Destillation höhere ökologische Gutschriften und gleichzeitig verursacht die Verbrennung höhere Umweltbelastungen, da der Anteil der in der Verbrennung optimaler Zweitkomponente (hier Pentan) abnimmt. Dadurch entstehen Technologieschnittpunkte, die Prozessbedingungen ausweisen, wo beide Technologien die gleiche Umweltwirkung verursachen (Punkte A und B). Quelle: Capello et al., 2006 [9].

Die in Abbildung 14 illustrierte Vorgehensweise wurde auf alle 45 binären Lösungsmittelgemische und die vier Wirkungsabschätzungsmethoden Eco-indicator 99, CED, UBP'97 und GWP angewendet. Tabelle 3 zeigt die Resultate, die für alle vier Wirkungsabschätzungsmethoden gelten. So ist beispielsweise der Wert 0.67 bei Essigsäureanhydrid so zu interpretieren, dass die Behandlung von Essigsäureanhydrid mittels Destillation ab einer Lösungsmittelrückgewinnung von 0.67 kg / kg ALM für alle Prozessbedingungen, Zweitkomponenten und Wirkungsabschätzungsmethoden ökologisch besser ist als die Verbrennung in der ALV. Ein detaillierter Beschrieb dieser Evaluation ist in Capello et al., 2006 [9] gegeben.

Tabelle 3: Angaben zur Lösungsmittelrückgewinnung (in kg / kg ALM) für die 45 Lösungsmittel, ab der die Destillation generell die ökologisch bessere Behandlungsoption gegenüber der Verbrennung (ALV, Zementwerk) ist. Quelle: Capello et al., 2006 [9].

Lösungsmittel	CAS-Nr.	Die Destillation ist ökologisch besser als die Verbrennung in der ALV ab einer Lösungsmittelrückgewinnung von			Die Destillation ist ökologisch besser als die Verbrennung im Zementwerk ab einer Lösungsmittelrückgewinnung von		
		Worstcase Destillation	Durchschnitt Destillation	Bestcase Destillation	Worstcase Destillation	Durchschnitt Destillation	Bestcase Destillation
Aceton	67-64-1	Nie	0.61	Immer ^(a)	Nie	Nie	Nie
Acetonitril	75-05-8	0.80	0.45	Immer ^(a)	Nie	Nie	Nie
Ameisensäure	64-18-6	0.69	0.32	Immer ^(a)	0.89	0.72	0.53
Benzaldehyd	100-52-7	0.84	0.32	Immer ^(a)	Nie	Nie	0.73
Benzylalkohol	100-51-6	0.88	0.41	Immer ^(a)	Nie	Nie	Nie
Butanol (1-)	71-36-3	Nie	0.95	0.58	Nie	Nie	Nie
Butanol (2-)	78-92-2	Nie	0.74	0.44	Nie	Nie	Nie
Butanol (Iso)	78-83-1	Nie	0.81	0.46	Nie	Nie	Nie
Butylester	123-86-4	0.77	0.44	Immer ^(a)	Nie	Nie	0.79
Butylenglykol	110-63-4	0.51	Immer ^(a)	Immer ^(a)	Nie	0.70	0.45
Cyclohexan	110-82-7	Nie	Nie	0.85	Nie	Nie	Nie
Cyclohexanon	108-94-1	0.82	0.43	Immer ^(a)	Nie	Nie	0.77
Dichloromethan	75-09-2	0.87	Immer ^(a)	Immer ^(a)	Nie	0.94	0.78
Diethylether	60-29-7	Nie	Nie	Nie	Nie	Nie	Nie
Dimethylformamid	68-12-2	0.83	0.40	Immer ^(a)	Nie	Nie	0.83
Dioxan	123-91-1	0.89	0.45	Immer ^(a)	Nie	Nie	0.86
Essigsäure	64-19-7	Nie	0.48	Immer ^(a)	Nie	Nie	0.87
Essigsäureanhydrid	108-24-7	0.67	Immer ^(a)	Immer ^(a)	Nie	0.78	0.59
Essigsäureethylester	141-78-6	0.77	0.40	Immer ^(a)	Nie	Nie	0.83
Ethanol	64-17-5	Nie	Nie	0.54	Nie	Nie	Nie
Ethylbenzol	100-41-4	Nie	Nie	0.69	Nie	Nie	Nie
Formaldehyd	50-00-0	Nie	Nie	Nie	Nie	Nie	0.94
Heptan	142-82-5	Nie	Nie	Nie	Nie	Nie	Nie
Hexan (n-)	110-54-3	Nie	Nie	Nie	Nie	Nie	Nie
Hexan (Iso)	96-14-0	Nie	Nie	0.57	Nie	Nie	Nie
Isoamylester	628-63-7	0.78	0.44	Immer ^(a)	Nie	Nie	0.74
Isobutylester	110-19-0	0.75	0.43	Immer ^(a)	Nie	Nie	0.80
Isopropylester	108-21-4	0.84	0.42	Immer ^(a)	Nie	Nie	0.89
Methanol	67-56-1	Nie	Nie	0.64	Nie	Nie	Nie
Essigsäuremethylester	79-20-9	Nie	0.76	0.40	Nie	Nie	Nie
Methylcyclohexan	108-87-2	Nie	0.65	0.36	Nie	Nie	Nie
Methylethylketon	78-93-3	Nie	0.88	0.54	Nie	Nie	Nie
Methylformat	592-84-7	0.94	0.47	Immer ^(a)	Nie	Nie	0.82
Methylisobutylketon	108-10-1	0.39	Immer ^(a)	Immer ^(a)	Nie	0.70	0.53
Monochlorbenzol	108-	0.85	0.48	Immer ^(a)	Nie	Nie	Nie

MTBE	90-7 1634- 04-4	Nie	Nie	Nie	Nie	Nie	Nie
Pentan	109- 66-0	Nie	Nie	Nie	Nie	Nie	Nie
Pentanol	71- 41-0	0.97	0.60	0.36	Nie	Nie	Nie
Propanol (1-)	71- 23-8	0.74	0.38	Immer ^(a)	Nie	Nie	0.92
Propanol (Iso)	67- 63-0	Nie	0.81	0.40	Nie	Nie	Nie
Propionaldehyd	123- 38-6	0.82	0.48	Immer ^(a)	Nie	Nie	0.96
Tert.-Amylalkohol	75- 85-4	Nie	0.87	0.52	Nie	Nie	Nie
Tetrahydrofuran	109- 99-9	0.41	Immer ^(a)	Immer ^(a)	0.84	0.53	0.32
Toluol	108- 88-3	Nie	Nie	0.46	Nie	Nie	Nie
Xylen	1330- 20-7	Nie	Nie	0.39	Nie	Nie	Nie

^(a) Die Destillation ist ökologischer als die Verbrennung ab einer minimalen Lösungsmittelrückgewinnung von 0.31 kg / kg ALM [7].

In einem zweiten Schritt wurde untersucht, für welche Lösungsmittel und unter welchen Prozessbedingungen die Verbrennung grundsätzlich die ökologischere Behandlungstechnologie ist. Analog zur ersten Evaluation wurde nun die Zweitkomponente der binären Gemische so gewählt, dass sie maximale Belastung in der Verbrennung verursacht. Die drei Szenarien der Verbrennung wurden nun ebenfalls als Funktion der Lösungsmittelrückgewinnung mit dem Szenario der geringsten Umweltbelastung der Destillation verglichen. Es zeigte sich, dass unter diesen Bedingungen keine Lösungsmittel gefunden wurden, wo die Verbrennung grundsätzlich ökologischer als die Destillation ist, obwohl dies der Fall sein kann in spezifischen Fällen [6].

Für die Interpretation der Resultate gilt es zu beachten, dass diese Bewertungen auf Annahmen basieren. So wird beispielsweise davon ausgegangen, dass keine Vorbehandlungsprozesse benötigt werden, die Destillationsrückstände nicht in die ARA oder ein Zementwerk geleitet werden und die Lösungsmittelrückgewinnungsrate beträgt 90%. In einigen Fällen werden diese Annahmen nicht den tatsächlichen Prozessbedingungen entsprechen. Aber sie repräsentieren generelle Bedingungen, wie sie in der chemischen Industrie vorherrschen [18].

4.5.3. Daumenregeln

Zusätzlich zu den quantitativen Resultaten (vgl. Tabelle 3) konnten auch qualitative "Daumenregeln" aus der systematischen Bewertung der Lösungsmittel abgeleitet werden. Diese Daumenregeln beziehen sich auf Lösungsmittelgruppen oder bestimmte Lösungsmiteleigenschaften:

- (1) **Lösungsmittel mit hohem Brennwert** verursachen eine geringe Umweltwirkung in der Verbrennung wegen der hohen ökologischen Gütschriften für die Energierückgewinnung (Beispiele: Alkane, Aromaten)
- (2) **Lösungsmittel, die Heteroatome enthalten** (N, S, X, wobei X = Cl, Br, F), verursachen eine sehr hohe Umweltbelastung in der Verbrennung wegen erhöhter Emissionen (NO_x, SO_x) oder wegen eines erhöhten Hilfsstoffbedarfes (z.B. NaOH) für die Behandlung dieser Emissionen in der Verbrennungsanlagen (Beispiele: Acetonitril, Monochlorobenzene, Dimethylsulfoxid).
- (3) **Lösungsmittel mit sehr tiefem Brennwert** (z.B. Lösungsmittel mit hohem O₂ oder X-Gehalt) verursachen eine hohe Umweltwirkung in der Verbrennung wegen der tiefen Energiegütschriften. Besonders in der ALV, da bei diesen Lösungsmitteln zusätzlich fossile Brennstoffe zugegeben werden muss (Beispiele: Ameisensäure, Methanol).
- (4) **Hohe Lösungsmittelrückgewinnung** in der Destillation führen zu hohen ökologischen Gütschriften, die die Gesamtumweltwirkung der Destillation bestimmen. So wird die Destillation zur ökologisch besseren Behandlungstechnologie 16 (ALV) bzw. 12 (Zementwerk) Lösungsmittel, wenn anstelle einer durchschnittlichen Lösungsmittelrückgewinnung von 0.71 kg / kg ALM (vgl. Abbildung 6) eine gute

Lösungsmittelrückgewinnung von 0.85 kg / kg ALM (vgl. Abbildung 6) [7] erreicht wird (Tabelle 3).

- (5) **Die Rückgewinnung aufwändig hergestellter Lösungsmittel** in der Destillation führt ebenfalls zu hohen ökologischen Gutschriften, die die Gesamtwirkung der Destillation bestimmen. Sogar einzelne Prozessschritte in der petrochemischen Herstellung können die ökologische Bewertung stark beeinflussen. So führt beispielsweise die zusätzlich vermiedene Umweltbelastung der Veresterung von Isobutanol zu Isobutylester oder Isopropanol zu Isopropylester dazu, dass die Destillation im Worstcase Szenario (ALV) und im Bestcase Szenario (Zementwerk) die ökologisch bessere Technologie wird bei hohen Lösungsmittelrückgewinnungen (Tabelle 3). Ein vergleichbarer Einfluss ist bei der Isomerisierung von n-Hexan zu Isohexan zu beobachten (Tabelle 3) (Beispiele für sehr hochwertige Lösungsmittel sind Essigsäureanhydrid, Butylenglykol, Methylisobutylketon, Tetrahydrofuran).
- (6) **Die Rückgewinnung einfacher Lösungsmittel**, die oftmals nahe am Petrostamm liegen und deshalb nur mit tiefen Gutschriften bewertet werden, führt zu hoher Umweltbelastung der Destillation (Beispiele: Ethanol, Methanol, Formaldehyd).

In vielen Fällen beeinflussen Faktoren mehrerer Daumenregeln das Resultat des ökologischen Vergleiches zwischen den Technologien. Beispielsweise eignet sich Methanol wegen seines geringen Brennwertes nicht besonders gut für eine Verbrennung, in der Destillation werden aber ebenfalls kaum Umweltgutschriften erzielt, da es sich um ein sehr einfaches Lösungsmittel handelt. Deshalb dienen diese Daumenregeln auch nur für eine grobe Einschätzung eines Abfall-Lösungsmittelgemisches. Um eine fundierte Entscheidungsgrundlage zu erhalten, sollte deshalb auf die quantitative Bewertung mittels dem *ecosolvent Tool* zurückgegriffen werden.

4.6. SYNTHESE: VERFAHREN ZUR ÖKOLOGISCHEN BEWERTUNG DER ABFALL-LÖSUNGSMITTELBEHANDLUNG

Durch die Zusammenführung der obig präsentierten Resultate wurde ein Verfahren zur ökologischen Bewertung der Abfall-Lösungsmittelbehandlung erarbeitet (Abbildung 15). Dieses Verfahren kann angewendet werden, um den Entscheidungsprozess der Technologiewahl im ALM-Management mit ökologischen Empfehlungen zu unterstützen. Dabei ist das Verfahren so einfach anwendbar, dass es nicht nur von Umweltexperten angewendet werden kann.

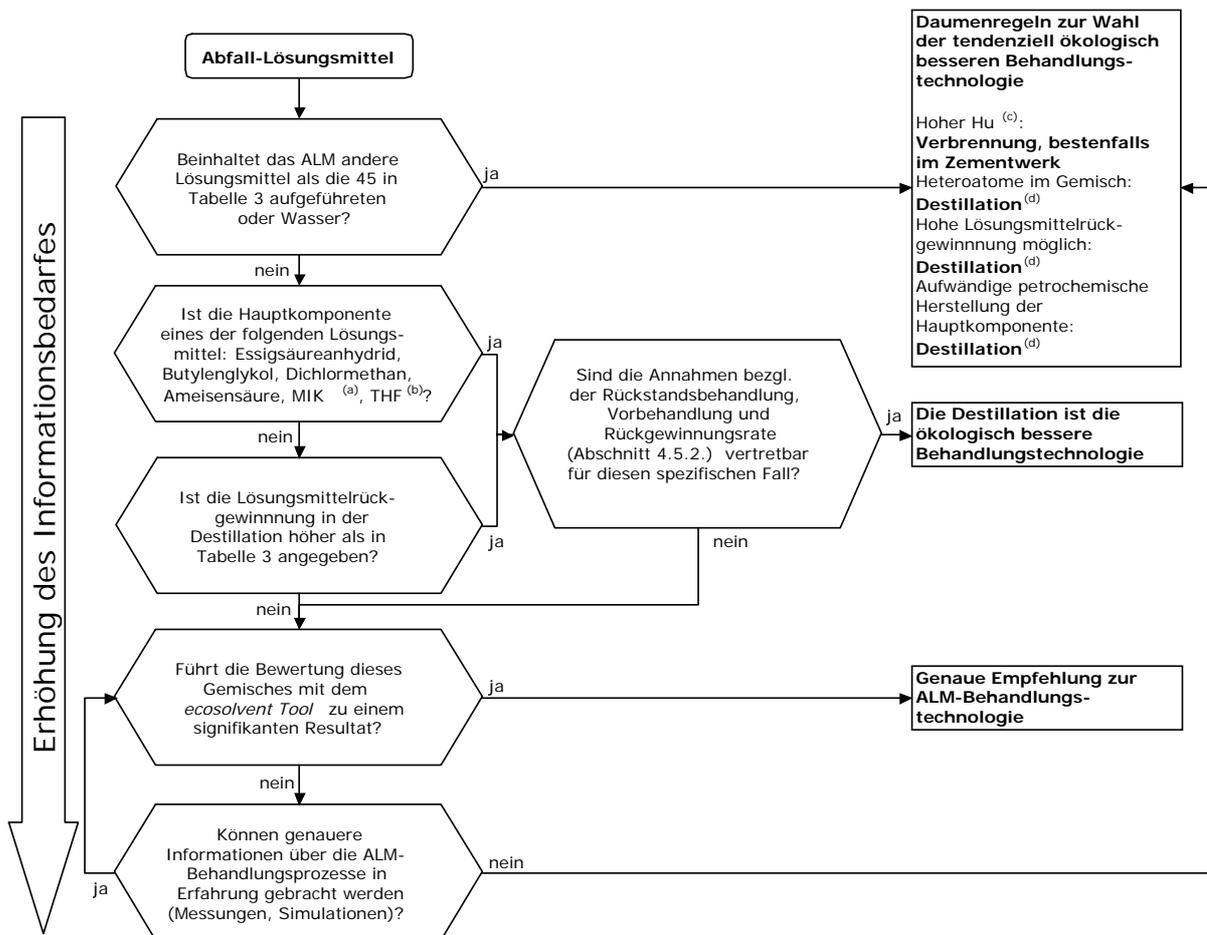


Abbildung 15: Verfahren zur ökologischen Bewertung der Abfall-Lösungsmittelbehandlung. Die Anwendung dieses Verfahrens führt in vielen Fällen zu konkreten Empfehlungen der ökologisch optimalen Technologiewahl. Falls keine konkreten Empfehlungen erreicht werden, helfen die Daumenregeln für eine Abschätzung. ^(a)Methylisobutylketon, ^(b)Tetrahydrofuran, ^(c)unterer Heizwert, ^(d)Falls möglich kontinuierliche Destillation.

Mit diesem Verfahren können in vielen Fällen genaue Empfehlungen bezgl. der ökologisch optimalen Technologiewahl für ein spezifisches Abfall-Lösungsmittelgemisch gemacht werden. Falls das Gemisch als Hauptkomponente eines der Lösungsmittel Ameisensäure, Butylenglykol, Dichlormethan, Essigsäureanhydrid, MIK (Methylisobutylketon) oder THF (Tetrahydrofuran) enthält wird die Destillation schon bei geringer Lösungsmittelrückgewinnung zur ökologisch besseren Behandlungstechnologie (vgl. Resultate Tabelle 3). Falls die Lösungsmittelrückgewinnung bekannt ist, können diese mit den in Tabelle 3 präsentierten Resultaten verglichen werden. Und falls aus den ersten Schritten keine klare Empfehlung hervorgeht, kann dies mit dem Gebrauch des *ecosolvent Tools* erzielt werden. Falls eine Bewertung mit dem *ecosolvent Tool* ebenfalls nicht zu einer klaren Entscheidungshilfe führt, sollten mehr Informationen über die Destillation eingeholt werden (Lösungsmittelrückgewinnung, Energie und Hilfsstoffeinsatz), beispielsweise mittels Messungen, Simulationen oder einem Pilotversuch. Dadurch verringert sich die Unsicherheit der Resultate und dies kann zu einem signifikanten Ergebnis führen. Trotzdem können Fälle auftreten, wo mit dem

ecosolvent Tool keine klare Entscheidung möglich ist oder weil andere als die untersuchten 45 Lösungsmittel im Gemisch enthalten sind. In solchen Fällen helfen die in Abschnitt 4.5.3. präsentierten Daumenregeln, die Technologie zu identifizieren, mit der die Behandlung tendenziell ökologisch besser ist.

5. Diskussion

Die Untersuchung des Abfall-Lösungsmittelmanagements in der chemischen Industrie hat gezeigt, dass Instrumente zur ökologischen Bewertung von Behandlungsoptionen nicht vorhanden sind. In der jetzigen Situation werden Entscheidungen auf Grund ökonomischer Überlegungen, bestehender Infrastruktur und logistischer Rahmenbedingungen getroffen [46]. Für Unternehmen, die eine ökologisch nachhaltige Verbesserung der bestehenden und künftigen Produktionsprozesse anstreben, ergibt sich dadurch ein grosses Bedürfnis nach geeigneten Instrumenten. Um diesem Bedarf gerecht zu werden, wurde in diesem Projekt ein Verfahren zur ökologischen Bewertung der Abfall-Lösungsmittelbehandlung in Zusammenarbeit mit Vertretern der chemischen Industrie erarbeitet.

Im Rahmen dieses Verfahrens wurde ein Inventarmodell für industrielle Destillationen entwickelt. Mit diesem Modell können Inventarparameter abgeschätzt werden, falls keine Mess- oder Simulationswerte verfügbar sind. Dabei wurde ein neuer Typ von Inventarmodellen erarbeitet: In Inventarmodellen für Verbrennungs- oder Abwasserreinigungsanlagen werden Inventardaten als Funktion der elementaren Abfallzusammensetzung, Brennwert, Wassergehalt oder TOC Abbaubarkeit berechnet. Als Grundlage für diese Berechnungen dienen chemisch / physikalische Beziehungen zwischen der Zusammensetzung und den Inventarparametern. Für Destillationen sind solche Modelle aber nicht anwendbar, da weitere Faktoren wie Destillationstechnologie (Batch, kont. Destillation), Qualitätsanforderung an das Destillat (z.B. Reinheit) oder Prozessbedingungen (z.B. Druck) für jedes Gemisch spezifisch definiert werden. Daher wurde für die Destillation ein Inventarmodell erarbeitet, das auf empirischen Beziehungen basiert. Mittels einer statistischen Analyse von rund 150 industriellen Destillationen wurden für alle Inventarparameter generische Wertebereiche bestimmt, mit denen fehlende Messwerte abgeschätzt werden. Dies ist eine ausserordentlich umfangreiche Datenlage für Modelle im Rahmen der Lebenszyklusanalyse. Je nach verfügbarer Information wird jedem Inventarparameter den genauesten Wert bzw. Wertebereich zugeordnet. Wegen dieses hierarchischen Modellkonzepts wird eine maximale Flexibilität bezüglich Informationsbedarf erreicht und macht dieses Modell somit vielseitig einsetzbar.

Das *ecosolvent Tool* verknüpft das neu entwickelte Modell der Destillation mit bestehenden Modellen der Verbrennung (Seyler et al. [47,48]) und der Abwasserreinigungsanlage (Köhler et al. [38]). Eine wichtige Charakteristik des *ecosolvent Tools* ist hohe Flexibilität bezüglich verfügbarer Information, da fehlende Angaben durch statistisch robuste Wertebereiche abgeschätzt werden. Das ermöglicht einen vielfältigen Einsatz des *ecosolvent Tools*, sowohl für bestehende Prozesse als auch für Prozesse, die sich noch in der Planungsphase befinden oder zu Drittfirmen ausgelagert wurden und somit keine direkten Prozessinformationen verfügbar sind.

Die systematische Anwendung des *ecosolvent Tools* hat gezeigt, dass keine Behandlungstechnologie generell ökologisch besser ist als eine andere. Dieses Resultat stellt die allgemein in der chemischen Industrie verbreitete Meinung in Frage, dass eine stoffliche Behandlung der Abfall-Lösungsmittel umweltverträglicher als andere Technologien ist. Generelle Schlussfolgerungen können also nur für einzelne Lösungsmittel bzw. Lösungsmiteleigenschaften (Heteroatome, Brennwert, etc.) abgeleitet werden (vgl. Tabelle 3, Abbildung 15).

Basierend auf den Daumenregeln, der Übersichtstabelle und dem *ecosolvent Tool* wurde ein Verfahren entwickelt, das die Entscheidungsfindung im ALM-Management unterstützt, indem ökologische Kriterien während unterschiedlicher Stufen der Prozessentwicklung bereitgestellt werden (Abbildung 15). Das entwickelte Verfahren ist auch für Nicht-Umweltexperten einfach anwendbar. Zudem ist es sehr flexibel betreffend der benötigten Eingabeinformationen. Daher kann dieses Verfahren vielseitig eingesetzt werden. Zum einen kann es angewendet werden, um bestehende Prozesse ökologisch zu bewerten. Eine solche retrospektive Bewertung hat oft den Vorteil, dass genaue (Mess-) Daten zur Verfügung stehen und somit Resultate mit sehr kleinen Unsicherheiten behaftet sind. Andererseits können aber auch Umweltwirkungen von Prozessen abgeschätzt werden, die noch in der Planungsphase sind, weil fehlende Informationen mittels der generischen Wertebereiche und allgemeingültigen Daumenregeln näherungsweise bestimmt werden. Der Vorteil der Prozessbewertung während der frühen Planungsphasen ist, dass eine Änderung der ALM-

Behandlungstechnologie einfacher durchführbar ist, als bei bereits bestehenden Prozessen. Schliesslich kann dieses Verfahren wegen der hohen Flexibilität auch bei strategischen Investitionsentscheiden im Zusammenhang mit der Entwicklung neuer Produktionsprozesse oder mit einem vergrösserten Produktionsvolumen und damit benötigter neuer ALM-Behandlungskapazität angewendet werden.

6. Schlussfolgerungen

Das präsentierte Verfahren zur ökologischen Bewertung der Abfall-Lösungsmittelbehandlung kann für verschiedene Zwecke angewendet werden. Zunächst einmal können Chemiefirmen dieses Verfahren intern benutzen, um ihr Abfall-Lösungsmittelmanagement ökologisch zu optimieren gemäss internen Vorgaben (z.B. gemäss Firmenleitbilder wie [10,26]). Diese Art der Anwendung könnte man unter dem Begriff "Product Stewardship" zusammenfassen.

Da sich die meisten Schweizer Chemieunternehmen im Rahmen des "Responsible Care Programms [32]" dazu verpflichtet haben, ihre Umweltbilanz auszuweisen und jährlich zu verbessern, ist dies eine weitere Anwendung dieses Verfahrens. Die Verbesserungen im Rahmen des Responsible Care Programms beziehen sich sowohl auf bestehende Prozesse wie auch auf Prozesse in der Planungsphase. Durch die hohe Flexibilität des *ecosolvent Tools* können Verbesserungen auf beiden Ebenen quantifiziert und für das Responsible Care Programm ausgewiesen werden.

Schliesslich kann diese Methodik auch für die Kommunikation mit Behörden verwendet werden, insbesondere um Verbesserungen aufzuzeigen, die nicht lokal in einem Produktionsstandort erreicht wurden sondern in der vorliegenden Prozesskette (Supply Chain), beispielsweise durch die Wahl von Lösungsmitteln, die eine geringere Umweltbelastung in der petrochemischen Herstellung verursachen. Gerade die Europäische Union mit der neuen Gesetzgebung im Bereich der Emissionskontrolle und des Abfallmanagements bietet eine potentielle Anwendung dieser Methodik: Die Umsetzung der sogenannten "integrated pollution prevention and control (IPPC [17])" Richtlinien durch die EU Mitgliedstaaten verpflichtet die Hersteller von Chemikalien gegenüber den Behörden aufzuzeigen, dass die Produktionsprozesse auf bestmöglichen Technologien basieren (best available technology (BAT)). Im Rahmen dieser IPPC Richtlinien muss auch die gesamte Umweltwirkung der gewählten Prozesse aufgezeigt und mit alternativen Systemen verglichen werden. Deshalb bietet das Verfahren insgesamt und insbesondere das *ecosolvent Tool* eine wertvolle Möglichkeit, um die BAT zu eruieren und gegenüber den Behörden zu kommunizieren.

Abkürzungsverzeichnis

ALM	Abfall-Lösungsmittel	LM	Lösungsmittel
ALV	Abfall-Lösungsmittelverwertungsanlage	MEK	Methylethylketon
ARA	Abwasserreinigungsanlage	MIK	Methylisobutylketon
BAT	Best Available Technology	MTBE	Methyltertbutylester
CED	Cumulative Energy Demand	NMVOC	Non-Methane Organic Compounds
CO2	Carbon Dioxide	SAVA	Sonderabfallverbrennungsanlage
Ei-99 (H/A)	Eco-indicator 99 (Hierarchical Average perspective)	TAV	Thermische Abluftverwertungsanlage
Eq.	Equivalenten	THF	Tetrahydrofuran
GWP	Global Warming Potential	UBP	Umweltbelastungspunkte
IPPC	Integrated Pollution Prevention and Control	VOC	Volatile Organic Compounds
ISO	International Standard Organization	WSI	Waste-Solvent Incinerator (entspricht ALV)
LCA	Life-Cycle Assessment		

Referenzen

- [1] Baumbach, G: 1993. Luftreinhaltung. 3rd edition. Springer-Verlag. Berlin. 3-540-56823-9
- [2] Bieler, P: 2004. Analysis and Modelling of the Energy Consumption of Chemical Batch Plants, Dissertation ETH no. 15532. Safety & Environmental Technology Group, ETH Zurich. Zurich.
- [3] Bretz, R and Frankhauser, P: 1997. Life-Cycle Assessment of Chemical Production Processes: A Tool for Ecological Optimization. *Chimia*. 51. (5). 213-217.
- [4] Bruder, C: 2000. Abfalllösungsmittelmanagement in der chemisch-pharmazeutischen Industrie. Diplomarbeit. Gruppe Umwelt- und Sicherheitstechnologie. ETH Zürich.
- [5] BUWAL: 1998. Richtlinie zur Entsorgung von Abfällen in Zementwerken (Guidelines for the waste disposal in cement kilns). Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft (BUWAL). Bern.
- [6] Capello, C, Hellweg, S, Badertscher, B, Betschart, H, and Hungerbühler, K: 2006. Environmental Assessment of Waste-Solvent Treatment in the Pharmaceutical and Specialty Chemicals Industry. Part 1. The ECOSOLVENT Tool. Submitted for publication to the Journal of Industrial Ecology.
- [7] Capello, C, Hellweg, S, Badertscher, B, and Hungerbühler, K: 2005. Life-Cycle Inventory of Waste Solvent Distillation: Statistical Analysis of Empirical Data. *Environmental Science & Technology*. 39. (15). 5885-5892.
- [8] Capello, C, Hellweg, S, and Hungerbühler, K: 2006. The Ecosolvent Tool. <http://www.sust-chem.ethz.ch/tools/ecosolvent>. ETH Zurich, Safety & Environmental Technology Group. Zurich.
- [9] Capello, C, Hellweg, S, and Hungerbühler, K: 2006. Environmental Assessment of Waste-Solvent Treatment in the Pharmaceutical and Specialty Chemicals Industry. Part 2. General Rules of Thumb and Specific Recommendations. Submitted for publication to the Journal of Industrial Ecology.
- [10] Ciba Specialty Chemicals AG: 2004. Business Review.
- [11] Crocker, BB and Bailie, RC: 1978. Incinerators *in* Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. 3rd edn, Vol 13. Wiley Interscience. New York.
- [12] ecoinvent Centre: 2004. ecoinvent data v1.2, Final Reports ecoinvent 2000 No. 1-15, CD-ROM. Swiss Centre for Life Cycle Inventories. Dübendorf.
- [13] EN ISO 14040: 1997. Environmental management - Life cycle assessment - Principles and framework. Brussels, Belgium: European Comitee for Standardisation.
- [14] EN ISO 14041: 1998. Environmental management - Life cycle assessment - Goal and scope definition and life cycle inventory analysis. Brussels, Belgium: European Comitee for Standardisation.
- [15] EN ISO 14042: 1998. Environmental management - Life cycle assessment - Life cycle impact assessment. Brussels, Belgium: European Comitee for Standardisation.
- [16] EN ISO 14043: 1998. Environmental management - Life cycle assessment - Life cycle interpretation. Brussels, Belgium: European Comitee for Standardisation.
- [17] European Parliament and Council: 1996. The IPPC (Integrated Pollution Prevention and Control) Directive. Council Directive 96/61/EC. <http://europa.eu.int/comm/environment/ippc>.
- [18] Expert Panel: 2003-2005. of the project "Waste Solvent Management in Chemical Industry" consisting of Ciba Speciality Chemicals AG, Ems-Dottikon AG, Lonza Group Ltd., Novartis Pharma AG, Hoffmann-La Roche AG, Siegfried Ltd., and Valorec Services AG.
- [19] Finnveden, G and Lindfors, L-G: 1998. Data Quality of Life Cycle Inventory Data - Rules of Thumb. *International Journal of LCA*. 3. (2). 65-66.
- [20] Flick, E-W: 1998. Industrial Solvents Handbook. 5th. William Andrew Publishing/Noyes Data Corporation. Westwood, New Jersey. 0-8155-1413-1.

- [21] Flückiger, PH: 1999. The use of life-cycle assessment and product risk assessment within application development of chemicals, Dissertation ETH no. 13047. Safety & Environmental Technology Group, ETH Zurich. Zurich.
- [22] Geisler, G: 2003. Life Cycle Assessment in the Development of Plant Protection Products: Methodological Improvements and Case Study, Dissertation ETH no. 15235. Safety & Environmental Technology Group, ETH Zurich. Zurich.
- [23] Goedkoop, M and Spriensma, R: 2000. The Eco-Indicator 99: A Damage Orientated Method for Life-Cycle Impact Assessment. Methodology report 2000a. Pre Consultants.
- [24] Hischer, R: 2004. The Method of Ecological Scarcity (Umweltbelastungspunkte, UBP'97). LCIA Implementation. CD ROM. Final Report ecoinvent 2000 No. 3. EMPA Dübendorf, Swiss Centre for Life Cycle Inventories. Dübendorf, CH.
- [25] Hoffmann, VH, Hungerbühler, K, and McRae, GJ: 2001. Multiobjective Screening and Evaluating of Chemical Process Technologies. Industrial Engineering and Chemical Research. 40. 4513-4524.
- [26] Hoffmann-La Roche AG: 2002. Safety and Environmental Protection at Roche: Group Report.
- [27] Hofstetter, T, Capello, C, and Hungerbühler, K: 2003. Ein ökologischer Vergleich der Verbrennung und Rektifikation von Abfalllösungsmitteln. Chemie Ingenieur Technik. 75. (1-2). 154-160.
- [28] Hofstetter, T, Capello, C, and Hungerbühler, K: 2003. Environmental Preferable Treatment Options for Industrial Waste Solvent Management - A Case Study of a Toluene Containing Waste Solvent. TranslChemE. May 2003. 81. (B).
- [29] Hofstetter, TB, Capello, C, and Hungerbühler, K: 2003. Environmental Preferable Treatment Options for Industrial Waste Solvent Management - A Case Study of a Toluene Containing Waste Solvent. TranslChemE. May 2003. 81. (B). 189-202.
- [30] Huijbregts, MAJ: 2001. Uncertainty and Variability in Environmental Life Cycle Assessment. Dissertation University of Amsterdam. Amsterdam.
- [31] IFEU - Institute for Energy and Environmental Research Heidelberg: 2002. Bewertung der Umweltverträglichkeit von Entsorgungsoptionen - Methodenentwicklung und Durchführung einer vereinfachten Bewertung und deren beispielhafte Ueberprüfung an vier Abfallarten. Ministerium für Umwelt und Verkehr, Reihe Abfall 63.
- [32] International Council of Chemical Associations (ICCA): 1992. The Responsible Care Program. <http://www.responsiblecare.org>.
- [33] IPCC (2001): 2001. Climate Change 2001: The Scientific Basis. In: Third Assessment Report of the intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). Cambridge University Press. Cambridge.
- [34] Jankowitsch, O, Cavin, L, Fischer, U, and Hungerbühler, K: 2001. Environmental and Economic Assessment of Waste Treatment Alternatives under Uncertainty. TranslChemE. 79. (B). 304-314.
- [35] Jiménez-Gonzalez, C, Overcash, M, and Curzons, A: 2001. Waste Treatment Modules - a Partial Life Cycle Inventory. Journal of Chemical Technology and Biotechnology. 76. (7). 707-716.
- [36] Jungbluth, N and Frischknecht, R: 2004. Cumulative Energy Demand. LCIA Implementation. CD ROM. Final Report ecoinvent 2000 No. 3. EMPA Dübendorf, Swiss Centre for Life Cycle Inventories. Dübendorf, CH.
- [37] Köhler, A: 2005, to be published by the end of 2005. Environmental Assessment of Industrial Wastewater Treatment Processes and Waterborne Contaminant Emissions, Dissertation ETH. Safety & Environmental Technology Group, ETH Zurich. Zurich.
- [38] Köhler, A, Hellweg, S, Recan, E, and Hungerbühler, K: 2006. Input-Dependent Life-Cycle Inventory Model of Industrial Wastewater-Treatment Processes in the Chemical Sector. submitted for publication to ES&T.

- [39] Koller, G, Fischer, U, and Hungerbühler, K: 2000. Assessing Safety, Health, and Environmental Impact during Process Development. *Industrial Engineering and Chemical Research*. 39. (4). 960-972.
- [40] Kostka, S and Hassan, A: 1997. *Umweltmanagementsysteme in der chemischen Industrie: Wege zum produktintegrierten Umweltschutz*. Springer. Berlin. 3-540-62907-6
- [41] Meier, MA: 1997. *Eco-Efficiency Evaluation of Waste Gas Purification Systems in the Chemical Industry*, Dissertation ETH no. 15235. Safety & Environmental Technology Group, ETH Zurich. Zurich.
- [42] Pistikopoulos, EN, Stefanis, SK, and Livingston, AG: 1994. A Methodology for Minimum Environmental Impact Analysis. *American Institute of Chemical Engineers - Symposium Series*. 90. 139.
- [43] Saling, P, Kicherer, A, Dittrich-Krämer, B, Wittlinger, R, Zombik, W, Schmidt, I, Schrott, W, and Schmidt, S: 2002. Eco-efficiency Analysis by BASF: The Method. *International Journal of LCA*. 7. (4). 203-218.
- [44] Sarigiannis, DA: 1996. Computer-Aided Design for Environment in the Process Industries. *Computers & Chemical Engineering*. 20. (S2). S1407-S1412.
- [45] Schweizerischer Bundesrat: 1999. Bundesgesetz über die Reduktion der CO₂-Emissionen (CO₂-Gesetz, Swiss CO₂ Law), SR 641.71.
- [46] Seyler, C, Capello, C, Hellweg, S, Bruder, B, Bayne, D, Huwiler, A, and Hungerbühler, K: 2006. Waste-Solvent Management as an Element of Green Chemistry: A Comprehensive Study on the Swiss Chemical Industry. *Ind Eng Chem Res*. 45. (22). 7700-7709.
- [47] Seyler, C, Hellweg, S, Monteil, M, and Hungerbühler, K: 2004. Life Cycle Inventory for Use of Waste Solvent as Fuel Substitute in the Cement Industry: A Multi-Input Allocation Model. *International Journal of LCA*. 10. (2). 120-130.
- [48] Seyler, C, Hofstetter, TB, and Hungerbühler, K: 2005. Life Cycle Inventory for Thermal Treatment of Waste Solvent from Chemical Industry: A Multi-Input Allocation Model. *Journal of Cleaner Production*. 13. (13-14). 1211-1224.
- [49] Seyler-Jahn, C: 2003. Ein inputabhängiges Oekoinventar-Modell für die thermische Verwertung von Abfall-Lösungsmittel in der chemisch-pharmazeutischen Industrie. Dissertation ETH Nr. 15089. Gruppe für Umwelt- und Sicherheitstechnologie. ETH Zürich.
- [50] Simmler, W: 2002. Wastewater *in* Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. 7th electronic edition. Wiley-VCH. Weinheim.
- [51] Smallwood, I: 1993. *Solvent Recovery Handbook*. Arnold. London. 0-340-57467-4
- [52] Sun Developer Network: JAVA. <http://java.sun.com/>.
- [53] Swiss Society of Chemical Industries (SGCI): 2004. *Swiss Chemical and Pharmaceutical Industry*. Zurich.
- [54] Vose, D: 2000. *Risk Analysis: A Quantitative Guide*. 2nd. John Wiley & Sons. Chichester. 0-471-99765-X
- [55] Weidehaupt, A and Hungerbühler, K: 1997. Integrated Product Design in Chemical Industry. A Plea for Adequate Life-Cycle Screening Indicators. *Chimia*. 51. (5). 217-221.
- [56] Wypych, G: 2001. *Handbook of Solvents*. ChemTec Publishing. Toronto. 1-895198-24

Anhang

Tabelle 4: Liste der 50 organischen Lösungsmittel, welche bei den Projektpartnern in der chemischen Industrie in Mengen über 10 Tonne pro Jahr eingesetzt wurden (2002).

<i>Lösungsmittel</i>	<i>CAS-Nr.</i>	<i>Inventar- quelle</i>	<i>Lösungsmittel</i>	<i>CAS-Nr.</i>	<i>Inventar- quelle</i>
Aliphatische Kohlenwasserstoffe			Karbonsäuren		
Hexan (n-)	110-54-3	eigen	Ameisensäure	64-18-6	eigen
Hexan (Iso-)	96-14-0	eigen	Essigsäure	64-19-7	ecoinvent
Heptan	142-82-5	eigen	Ketone		
Pentan	109-66-0	ecoinvent	Aceton	67-64-1	ecoinvent
Cycloaliphatische Kohlenwasserstoffe			Cyclohexanon	108-94-1	eigen
Cyclohexan	110-82-7	eigen	Methylethylketon	78-93-3	ecoinvent
Methylcyclohexan	108-87-2	eigen	Methylisobutylketon	108-10-1	eigen
Aromatische Kohlenwasserstoffe			Ester		
Ethylbenzol	100-41-4	ecoinvent	Methylformat	592-84-7	eigen
Toluol	108-88-3	ecoinvent	Essigsäurebutylester	123-86-4	eigen
Xylol-Isomergemisch	1330-20-7	ecoinvent	Essigsäureethylester	141-78-6	eigen
Chlorierte Kohlenwasserstoffe			Isobutylester	110-19-0	eigen
Chlorbenzol	108-90-7	eigen	Isopropylester	108-21-4	eigen
Dichlormethan	75-09-2	ecoinvent	Isoamylester	628-63-7	eigen
Alkohole			Essigsäuremethylester	79-20-9	eigen
Benzylalkohol	100-51-6	eigen	Ether und Glykoether		
Butanol (1-)	71-36-3	ecoinvent	Diethylether	60-29-7	eigen
Butanol (2-)	78-92-2	eigen	Dioxan	629-14-1	eigen
Isobutanol	78-83-1	eigen	<i>Ethylenglykoldimethylether</i>	<i>110-71-4</i>	<i>eigen</i>
Butylenglykol	110-63-4	eigen	<i>Ethylenglykolmonoethylether</i>	<i>110-80-5</i>	<i>eigen</i>
Ethanol	64-17-5	eigen	<i>Ethylenglykoldiethylether</i>	<i>n.a.</i>	<i>eigen</i>
Methanol	67-56-1	ecoinvent	Methyltertbutylether	1634-04-4	ecoinvent
Pentanol	71-41-0	eigen	Tetrahydrofuran	109-99-9	eigen
Tert. Amylalkohol	75-85-4	eigen	Amide und andere Stickstoffverbindungen		
Propanol (1-)	71-23-8	eigen	Acetonitril	75-05-8	eigen
Propanol (Iso-)	67-63-0	ecoinvent	Dimethylformamid	68-12-2	eigen
Aldehyde			Weitere Lösungsmittel		
Benzaldehyd	100-52-7	eigen	<i>Dimethylsulfoxid</i>	<i>67-68-5</i>	<i>eigen</i>
Formaldehyd	50-00-0	ecoinvent	Essigsäureanhydrid	108-24-7	eigen**
Propionaldehyd	123-38-6	eigen	<i>N-Methyl-2-Pyrrolidon</i>	<i>872-50-4</i>	<i>eigen</i>

eigen: Das Inventar wurde für dieses Projekt eigens erhoben. Diese Inventare werden in der ecoinvent Datenbank V2.0 verfügbar sein. ecoinvent: Diese Inventare wurden der ecoinvent Datenbank V1.2 entnommen. ** Der ecoinvent-Datensatz „acetic anhydride, at plant, RER“ wurde mit Hilfe genauerer Daten verbessert. *Kursiv gedruckte Lösungsmittel sind nicht im ecosolvent Tool V1.0 enthalten.*

Tabelle 5: Inventarparameter der beiden Verbrennungsmodelle (ALV, Zementwerk) und der Destillation

Inventarmodelle (Abkürzung)	Modell Destillation (dest)	Modell ALV (ALV)	Modell Zementwerk (zement)
Inventarparameter (Abkürzung)	Dampfverbrauch (d)	Heizölverbrauch (öl)	ΔCO_2 Emissionen (ΔCO_2) ^(a)
	Stromverbrauch (st)	Hilfsstoffeinsatz (hsv)	ΔNO_x Emissionen (ΔNO_x) ^(a)
	Stickstoffverbrauch (N2)	Energiegutschriften (en)	ΔMetall Emissionen (Δmet) ^(a)
	Hilfsstoffeinsatz (hsd)	CO ₂ Emissionen (CO ₂)	Substitution fossiler Brennstoffe (fossil)
	Abluftbehandlung (al)	Andere Emissionen (em)	
	Thermische Rückstandsbehandlung (rs)		
	Abwasserbehandlung (aw)		
	Lösungsmittelrückgewinnung (lm)		

^(a) Im Inventarmodell des Zementwerkes werden die Umweltwirkungen der Emissionen immer als Differenz angegeben, die durch die Substitution der fossilen Brennstoffe mittels ALM hervorgerufen wird. Diese Differenzen werden bei den jeweiligen Inventarparametern als “ Δ ” angegeben.

Die totale Umweltwirkung (I: Impact) einer Technologie wird definiert als die Summe der Umweltwirkungen der einzelnen Inventarparameter:

$$\text{ALV:} \quad I_{\text{ALV}} = I_{\text{öl}} + I_{\text{hsv}} + I_{\text{CO}_2} + I_{\text{em}} + I_{\text{en}} \quad (1)$$

$$\text{Zementwerk:} \quad I_{\text{zement}} = I_{\Delta\text{CO}_2} + I_{\Delta\text{NO}_x} + I_{\Delta\text{met}} + I_{\text{fossil}} \quad (2)$$

$$\text{Destillation:} \quad I_{\text{dest}} = I_{\text{d}} + I_{\text{st}} + I_{\text{N}_2} + I_{\text{hsd}} + I_{\text{al}} + I_{\text{rs}} + I_{\text{aw}} + I_{\text{lm}} \quad (3)$$

Für die systematische Technologiebewertung wurde nun für jeden Inventarparameter (Gleichungen 1-3) ein Bestcase und Worstcase Szenario angenommen. Die Summe der Resultate in dem jeweiligen Szenario ergibt die minimal bzw. maximal mögliche Umweltwirkung (vgl. Abbildung 13). Tabelle 6 zeigt die Definitionen der gewählten Bestcase und Worstcase Szenarien für alle Inventarparameter. Eine detaillierte Begründung für diese Szenarien wird in Capello et al., 2006 [9] geliefert.

Tabelle 6: Definition der Bestcase und Worstcase Szenarien für die systematische Technologiebewertung (Abbildung 13).

Modell ALV		
<i>Inventarparameter (Szenario)</i>	<i>Beschreibung / Kommentar</i>	<i>Lösungsmittel</i>
$I_{öl}$ (Bestcase)	$Hu^{(a)} > 23.1$ MJ/kg (keine Stützfeuerung nötig)	e.g. Aceton
$I_{öl}$ (Worstcase)	Tiefer $Hu^{(a)}$	Ameisensäure
I_{hsv} (Bestcase)	Lösungsmittel ohne Heteroatome	e.g. Aceton
I_{hsv} (Worstcase)	Lösungsmittel mit hohem S-Gehalt (benötigt am meisten NaOH in der Rauchgasreinigung)	Dimethylsulfoxid
I_{CO_2} (Bestcase)	Tiefer C-Gehalt und einigermaßen hoher $Hu^{(a)}$ (bei tiefem Hu entsteht CO_2 aus der Stützfeuerung)	Methanol
I_{CO_2} (Worstcase)	Hoher C-Gehalt	Toluol, Xylen, Ethylbenzol
I_{em} (Bestcase)	Lösungsmittel ohne Heteroatome	e.g. Aceton
I_{em} (Worstcase)	Hoher N-Gehalt (NO_x -Bildung)	Acetonitril
I_{en} (Bestcase)	Hoher $Hu^{(a)}$	Pentan
I_{en} (Worstcase)	$Hu^{(a)} < 23.1$ MJ/kg (Stützfeuerung nötig)	e.g. Essigsäure
Modell Zementwerk		
$I_{\Delta CO_2}$ (Bestcase)	Hoher $Hu^{(a)}$	Pentan
$I_{\Delta CO_2}$ (Worstcase)	Tiefer $Hu^{(a)}$	Ameisensäure
$I_{\Delta NO_x}$ (Bestcase)	Kein Stickstoff und hoher $Hu^{(a)}$	Pentan
$I_{\Delta NO_x}$ (Worstcase)	Hoher N-Gehalt	Acetonitril
$I_{\Delta met}$ (Bestcase)	Keine Metalle, hoher $Hu^{(a)}$	Pentan
$I_{\Delta met}$ (Worstcase)	Höchst mögliche Metallverunreinigung und tiefer $Hu^{(a)}$	Ameisensäure mit maximal möglicher Metallverunreinigung gemäss Schweizer Grenzwerte [5]
I_{fossil} (Bestcase)	Hoher $Hu^{(a)}$	Pentan
I_{fossil} (Worstcase)	Tiefer $Hu^{(a)}$	Ameisensäure

Tabelle 6, Fortsetzung

Modell Destillation		
<i>Inventarparameter (Szenario)</i>	<i>Wertebereich Destillation</i>	<i>Produktion / Rückstandsbehandlung</i>
I_d (Bestcase)	Dampfverbrauch kont. Destillation	Dampfproduktion aus ALM
I_d (Worstcase)	Dampfverbrauch Batchdestillation	Durchschnittliche Dampfproduktion Kesselhaus
I_{st} (Bestcase)	Stromverbrauch Destillation	Schweizer Strommix / Strom aus ALM ^(b)
I_{st} (Worstcase)	Stromverbrauch Destillation	UCPTE-Mix
I_{N_2} (Bestcase)	Stickstoffverbrauch kont. Destillation	Durchschnittliche N2 Produktion
I_{N_2} (Worstcase)	Stickstoffverbrauch Batchdestillation	Durchschnittliche N2 Produktion
I_{al} (Bestcase)	Abluft Batchdestillation	Abluftverbrennung
I_{al} (Worstcase)	Abluft Batchdestillation	Abluft Emissionen (NMVOC)
I_{rs} , (ALV) (Bestcase)	Rückstand Batchdestillation	ALV Bestcase Szenario (Pentan)
I_{rs} , (ALV) (Worstcase)	Rückstand Batchdestillation	ALV Worstcase Szenario (Ameisensäure)
I_{rs} , (Zementwerk) (Bestcase)	Rückstand Batchdestillation	Zementwerk Bestcase Szenario (Pentan)
I_{rs} , (Zementwerk) (Worstcase)	Rückstand Batchdestillation	Zementwerk Worstcase Szenario (Acetonitril / Ameisensäure) ^(c)
I_{aw} (Bestcase)	Abwasser von apolaren Lösungsmitteln	Rückstandsbehandlung ARA mit >90% TOC-Elimination
I_{aw} (Worstcase)	Abwasser von polaren Lösungsmitteln	Rückstandsbehandlung ARA mit <20% TOC-Elimination
I_{hsd} (Bestcase)	pH Regulierung / Reinigung	Durchschnittliche Hilfsstoffherstellung
I_{hsd} (Worstcase)	Schleppmittel	Durchschnittliche Schleppmittelherstellung
I_{lm} (Bestcase)	Lösungsmittelrückgewinnung kont. Destillation	Lösungsmittel mit grösster Umweltwirkung in der petrochemischen Produktion
I_{lm} (Worstcase)	Lösungsmittelrückgewinnung Batchdestillation	Lösungsmittel mit kleinster Umweltwirkung in der petrochemischen Produktion

^(a)Hu: unterer Heizwert, ^(b)Stromherstellung aus ALM wurde für die Bewertungsmethoden UBP'97 und GWP benutzt, ^(c)Acetonitril wurde nur für die Bewertungsmethoden verwendet, die auch Bewertungsfaktoren für NOx haben.