



Schweizer Zentrum für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative  
des ETH-Bereichs  
und Schweizerischer  
Bundesämter

**ETH**

**EPFL**

**FSE**

**EMPA**

**EAWAG**

**FAL**

20. Diskussionsforum Ökobilanzen, 19. September 2003  
ETH Zürich / Session „Chemikalien & Kunststoffe“

# Chemikalien

Stefanie Hellweg

Eidgenössische Technische Hochschule Zürich (ETHZ)  
Institut für Chemie- und Bioingenieurwesen, Zürich

hellweg@tech.chem.ethz.ch



Schweizer Zentrum  
für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative  
des ETH-Bereichs  
und Schweizerischer  
Bundesämter

**ETH**

**EPFL**

**FSE**

**EMPA**

**EAWAG**

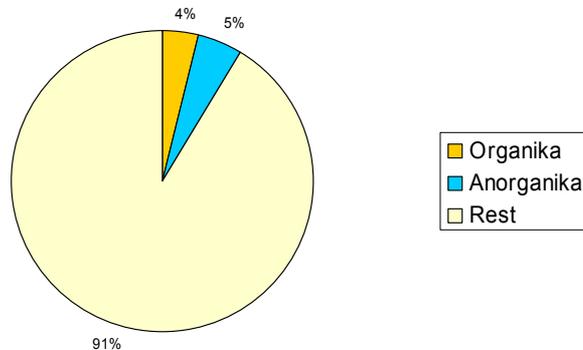
**FAL**

# Statistik: Chemikalien in ecoinvent



Schweizer Zentrum  
für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative  
des ETH-Bereichs  
und Schweizerischer  
Bundesämter



Weitere Chemikalien sind in anderen Rubriken enthalten:  
Waschmittel, Kunststoffe, etc.

Folie 3

Präsentation Roland Hischier



# Chemikalien in ecoinvent



Schweizer Zentrum  
für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative  
des ETH-Bereichs  
und Schweizerischer  
Bundesämter



- **Lösungsmittel (Aceton, Methanol)**
- Anorganische Basen (Ammoniak)
- Anorganische Säuren (Schwefelsäure, Salpetersäure, Fluorwasserstoff, HCl, Borsäure, Chromsäureanhydrid)
- Organische Säuren (Essigsäure, Maleinsäure)
- Organische Basen (Triethanolamine)
- Anorganische Gase (Cl, Ar, Krypton, Xe, O<sub>2</sub>)
- Anorganische Reaktivchemikalien (Alylchlorid, Natriumchlorat, Wasserstoffperoxid)
- Organische Reaktivchemikalien (Phosphortrichlorid, Epichlorhydrin, Ethylenoxid, Phosgen)
- Salze (NaCl, Natriumsulfat)
- Organische Naturstoffe (Soyaöl, Palmöl)
- Etc.

Folie 4

Präsentation Roland Hischier



# Beispiel Lösungsmittel

- Aceton
- Essigsäure
- Formaldehyd
- Isopropanol
- **Methanol**
- Methylenchlorid
- Toluol
- Xylol
- Anilin
- Benzol
- Cumene
- Methylenchlorid
- Methylethylketon
- Methyl tert-butyl ether
- Nitrobenzol
- Tetrachlorethylen



Schweizer Zentrum  
für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative  
des ETH-Bereichs  
und Schweizerischer  
Bundesämter



# Methanol: Beschreibung

- Chemische Formel:  $\text{CH}_3\text{OH}$
- Weltweiter jährlicher Verbrauch: 28.2 Mio t
- Verwendung vor allem in chemischen Synthesen (Formaldehyde, MTBE, Essigsäure) sowie als Lösungs- und Reinigungsmittel
- Methanol wird auf der ganzen Welt hergestellt; zunehmend an Orten mit Erdgasressourcen
- Mehr als 90% des Methanols wird weltweit aus Erdgas produziert (nur diese Herstellungsweise in ecoinvent bilanziert)



Schweizer Zentrum  
für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative  
des ETH-Bereichs  
und Schweizerischer  
Bundesämter



# Methanol: Abbildung in ecoinvent



Drei Module:

1. Methanolfabrik, GLO  
Infrastruktur (pro Anlage)
2. Methanol, ab Werk, GLO  
Durchschnittliche Produktion von 1 kg reinem Methanol
3. Methanol, ab Regionallager, CH  
Herstellung und Transport von 1 kg Methanol in die Schweiz

Schweizer Zentrum  
für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative  
des ETH-Bereichs  
und Schweizerischer  
Bundesämter



Folie 7

Präsentation Roland Hischier

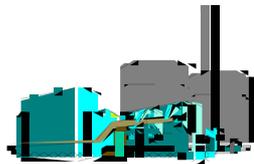


# Methanolfabrik (GLO)



Schweizer Zentrum  
für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative  
des ETH-Bereichs  
und Schweizerischer  
Bundesämter



Referenz: 1 Sibirische Anlage  
2700 t/Tag  
91% Auslastung  
30 Jahre Lebensdauer

}  $37.2 \cdot 10^{-12}$  Einheiten pro  
kg Methanol

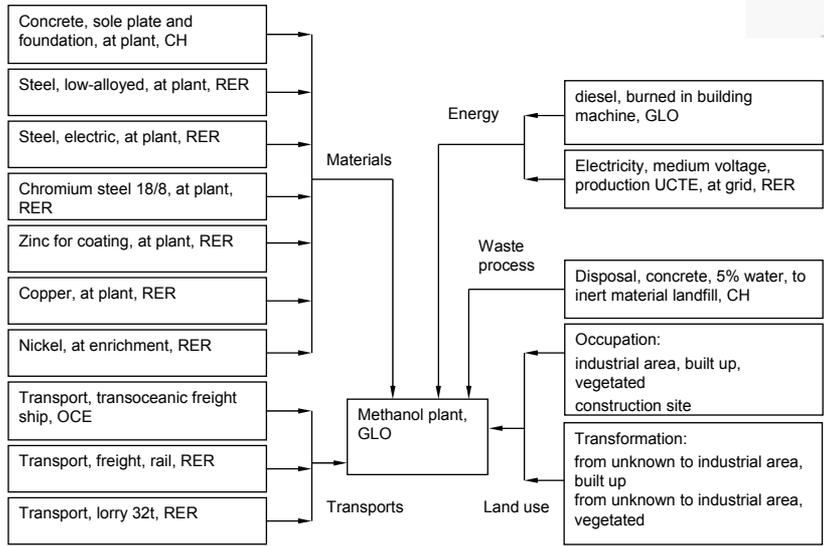


Folie 8

Präsentation Roland Hischier



# Methanolfabrik (GLO)



Schweizer Zentrum für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative des ETH-Bereichs und Schweizerischer Bundesämter



# Methanolfabrik (GLO): Rohdaten



Schweizer Zentrum für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative des ETH-Bereichs und Schweizerischer Bundesämter



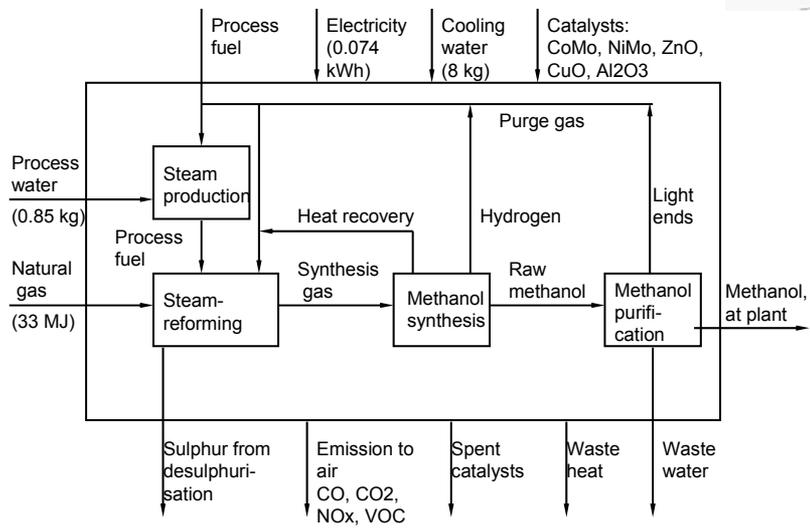
Technosphere	electricity, medium voltage, production UCTE, at grid, UCTE	5.66E+6	kWh
	diesel, burned in building machine, GLO	4.75E+7	MJ
	zinc for coating, at regional storage, RER	1.02E+6	kg
	nickel, 99.5%, at plant, GLO	3.77E+4	kg
	steel, electric, un- and low-alloyed, at plant, RER	4.68E+6	kg
	steel, low-alloyed, at plant, RER	1.99E+6	kg
	chromium steel 18/8, at plant, RER	1.72E+6	kg
	copper, at regional storage, RER	4.30E+5	kg
	concrete, sole plate and foundation, at plant, CH	4.89E+2	m3
	disposal, concrete, 5% water, to inert material landfill, CH	1.13E+6	kg
Resources	transport, lorry 32t, RER	7.38E+6	tkm
	transport, transoceanic freight ship, OCE	5.41E+6	tkm
	transport, freight, rail, RER	1.44E+6	tkm
	Occupation, construction site	4.30E+6	m2a
Emissionen	Occupation, industrial area, built up	9.69E+6	m2a
	Occupation, industrial area, vegetation	3.21E+6	m2a
	Transformation, from unknown	4.30E+5	m2
	Transformation, to industrial area, built up	3.23E+5	m2
	Transformation, to industrial area, vegetation	1.07E+5	m2
Heat, waste, air, low population density	1.54E+7	MJ	



# Methanolproduktion



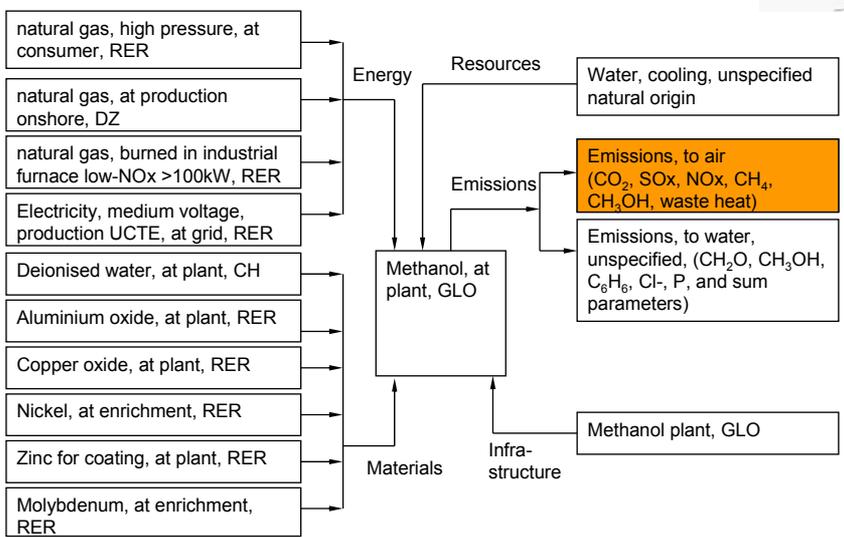
Schweizer Zentrum für Ökoinventare  
Eine gemeinsame Initiative des ETH-Bereichs und Schweizerischer Bundesämter



# Methanol, ab Werk, GLO



Schweizer Zentrum für Ökoinventare  
Eine gemeinsame Initiative des ETH-Bereichs und Schweizerischer Bundesämter



# Methanol: Beispiel Luftemissionen



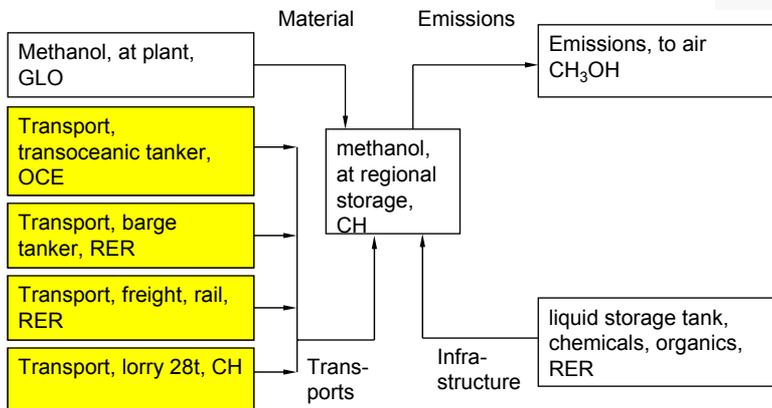
Sub-stance	Methanol plant process			Values for this inventory	
	Steam reforming	Combined reforming	Autothermal reforming	Included in furnace process	Additional emissions
	kg	kg	kg	kg	kg
CO <sub>2</sub>	0.47 -	0.31	0.33	0.431	-
NO <sub>x</sub>	0.69 *10 <sup>-3</sup> -	0.18 *10 <sup>-3</sup> , 0.2 *10 <sup>-3</sup>	0.05 *10 <sup>-3</sup> , 0.1 *10 <sup>-3</sup>	0.18 *10 <sup>-3</sup>	0.15 *10 <sup>-3</sup>
SO <sub>x</sub>	-	-	-	4.2 *10 <sup>-6</sup>	13.8 *10 <sup>-6</sup>
CH <sub>4</sub>	0.98 *10 <sup>-3</sup>			-	0.98 *10 <sup>-3</sup>
CH <sub>3</sub> OH	0.53 *10 <sup>-3</sup>	-	-	-	0.53 *10 <sup>-3</sup>

Schweizer Zentrum für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative des ETH-Bereichs und Schweizerischer Bundesämter



# Methanol, ab Regionallager (CH)

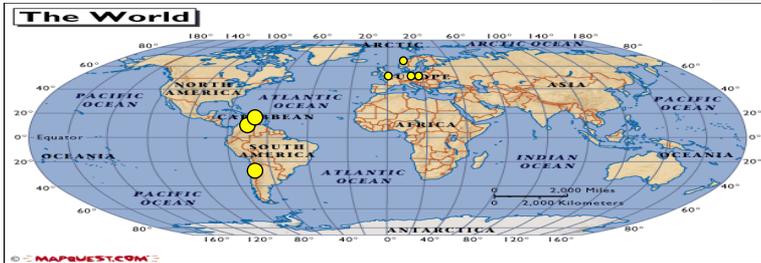


Schweizer Zentrum für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative des ETH-Bereichs und Schweizerischer Bundesämter



# Methanol, ab Regionallager (CH)



Schweizer Zentrum für Ökoinventare  
Eine gemeinsame Initiative des ETH-Bereichs und Schweizerischer Bundesämter



Location of Plant / Vehicle	Share for CH	Overseas ship	Inland ship	Rail	Lorry
	%	tkm	tkm	tkm	tkm
Continental European production	40	0	0	0.6	0.05
Norwegian production	13	1.5	0.56	0	0.05
Overseas production	47	7.5	0.56	0	0.05
<b>Average distance</b>	<b>100</b>	<b>3.7</b>	<b>0.34</b>	<b>0.24</b>	<b>0.05</b>

Folie 15

Präsentation Roland Hischier



20. Diskussionsforum Ökobilanzen, 19. September 2003  
ETH Zürich / Session „Kunststoffe / Chemikalien“



Schweizer Zentrum für Ökoinventare  
Eine gemeinsame Initiative des ETH-Bereichs und Schweizerischer Bundesämter

# Chemikalien

## Beispiel 2 - Propylenglycol

Roland Hischier

Eidgenössische Materialprüfungs- und -forschungsanstalt (EMPA)  
Abteilung „Nachhaltige Informationstechnologie“, St. Gallen

roland.hischier@empa.ch



Folie 16

Präsentation: Roland Hischier



## Beispiel 2 - Propylenglykol (RER)

- $\text{HOCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{OH}$ , CAS-No. 57-55-6
- Klare, farblose Flüssigkeit bei Raumtemperatur
- Vorstufe für ungesättigte Polyesterharze - Einsatz in Automobilbau, Fiberglas-Boote, Baubereich
- Produktion durch direkte Hydrolyse von Propylenoxid mit Wasser mit anschließender Destillation
- Datenquelle: Ullmann's Enzyklopädie, Well's Handbuch, Umwelterklärung Chemiepark (D)



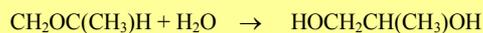
Schweizer Zentrum für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative des ETH-Bereichs und Schweizerischer Bundesämter



## Erstellen Eingabedaten

### 1. Reaktionsgleichung gem. Ullmann's Enzyklopädie:



### 2. Annahmen für Input / Output - Daten:

- Energie- & Wasserverbrauch: Angaben Chemiepark (D)
- Rohstoffe: Stöchiometrie & Ausbeute = 95%
- Emissionen: Annahme (Luft) resp. Massenbilanz (Wasser)
- Abwasserreinigung: Effizienz & Verteilung gem. ESU'96
- Infrastruktur / Transport: Standard-Vorgehen gem. QR
- Abfälle: vernachlässigt



Schweizer Zentrum für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative des ETH-Bereichs und Schweizerischer Bundesämter



# Eingabedaten



[per kg propylene glycol]			Remark
<b>INPUTS</b>			
propylene oxide	kg	0.803	stoichiometric calc., 95% yield
Water, unspecified	m3	2.49E-04	stoichiometric calc., 95% yield
Electricity, medium voltage	kWh	0.333	estimation
Natural gas, burned in industrial furnace >100kW	MJ	2	estimation
Water, cooling, unspecified	m3	2.40E-02	estimation
Transport, by train	tkm	4.82E-01	standard distances & means
Transport, by lorry	tkm	8.03E-02	standard distances & means
chemical plant, organics	unit	4.00E-10	approximation for infrastructure
<b>OUTPUTS</b>			
waste heat, to air	MJ	1.20E+00	calculated from electricity input
propylene oxide, to air	kg	1.60E-03	estimated as 0.2% of input
carbon dioxide, fossil, to air	kg	7.88E-02	from waste water treatment
propylene oxide, to water	kg	3.85E-03	calculated from mass balance
COD, BOD	kg	5.91E-02	calculated from water emissions
TOC, DOC	kg	1.85E-02	calculated from water emissions

Schweizer Zentrum für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative des ETH-Bereichs und Schweizerischer Bundesämter



# Kumulierte Daten (Inventar)



Name		propylene glycol, liquid, at plant	propylene oxide, liquid, at plant
Location	Unit	RER kg	RER kg
Unit	Infrastructure	0	0
<b>LCIA results</b>			
cumulative energy demand	non-renewable energy resources, fossil	MJ-Eq	7.6E+1
cumulative energy demand	non-renewable energy resources, nuclear	MJ-Eq	2.3E+1
cumulative energy demand	renewable energy resources, water	MJ-Eq	3.5E+0
cumulative energy demand	renewable energy resources, wind, solar, geothermal	MJ-Eq	5.8E-1
cumulative energy demand	renewable energy resources, biomass	MJ-Eq	4.5E-1
<b>LCI results</b>			
resource	Land occupation	total	m2a
air	Carbon dioxide, fossil	total	kg
air	NMVOG	total	kg
air	Nitrogen oxides	total	kg
air	Sulphur dioxide	total	kg
air	Particulates, < 2.5 um	total	kg
water	BOD	total	kg
soil	Cadmium	total	kg

Schweizer Zentrum für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative des ETH-Bereichs und Schweizerischer Bundesämter



## Fazit (bezogen auf 2. Beispiel !)

- Chemikalien sind als **Einheitsprozess** abgebildet
- **Grösste Genauigkeit** bei **Rohstoff-Verknüpfungen**, da auf den Reaktionsgleichungen aufbauend
- Grosse **Vorbehalte** nötig betreffend den Angaben im Bereich **Energie, Emissionen** (Luft / Wasser), **Abfall**
- Daten können nur verwendet werden, wenn **Datensatz nicht zentrales Element** der Untersuchung darstellt



Schweizer Zentrum  
für Ökoinventare

Eine gemeinsame Initiative  
des ETH-Bereichs  
und Schweizerischer  
Bundesämter

