



# Nachhaltigkeitsbewertung chemischer Synthesen in Entwicklungsphasen

**Jan Hedemann & Tobias Brinkmann**

ifu Hamburg GmbH

**Prof. Lohmüller, Prof. Steinigeweg & Dr. Eissen**

FH Oldenburg/ Ostfriesland/ Wilhelmshaven (OW)

## Gliederung

- Hintergrund
- Vorarbeiten für dieses Projekt (Sabento & EATOS)
- Ziele des Projektes: „Nachhaltigkeitsbewertung chemischer Synthesen in Entwicklungsphasen“

## Möglichkeiten in der Prozessentwicklung

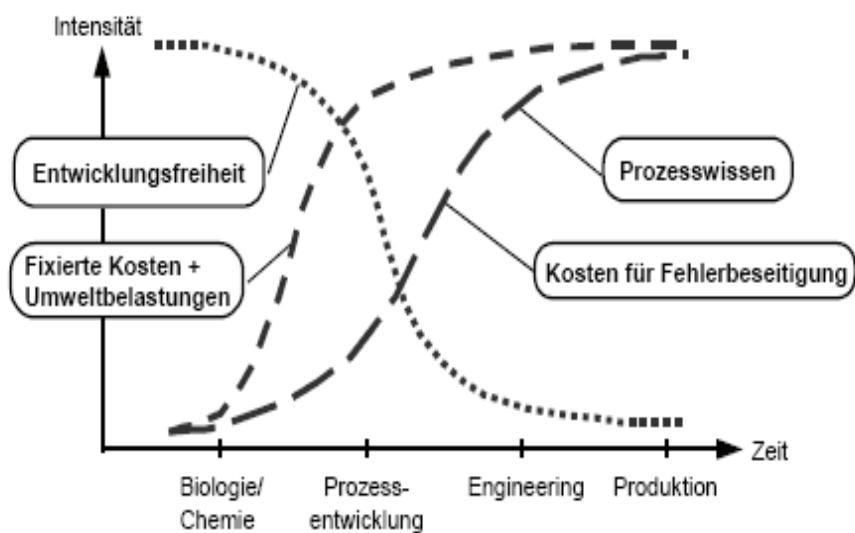


Abbildung 1: Entwicklungsfreiheit, Prozesswissen, fixierte Umweltwirkungen und Kosten im Entwicklungsprozess nach Heinze und Hungerbühler, 1997

### Probleme:

- geringe Datendichte  
→ erhöhter Aufwand
- mehr Kosten
- Methodenpluralismus



Einfluss auf Prozessentwicklung in frühen Phasen sinnvoll

AZ 25070

# Nachhaltigkeitsbewertung chemischer Synthesen in Entwicklungsphasen

Laufzeit: 01.08.2008 bis 31.07.2011

# AZ 25070: Projektpartner



---

## Externe Projektpartner



Eidgenössische Technische Hochschule Zürich  
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

→ Gesucht: Pilotpartner mit  
Praxisbeispielen

---

gefördert durch



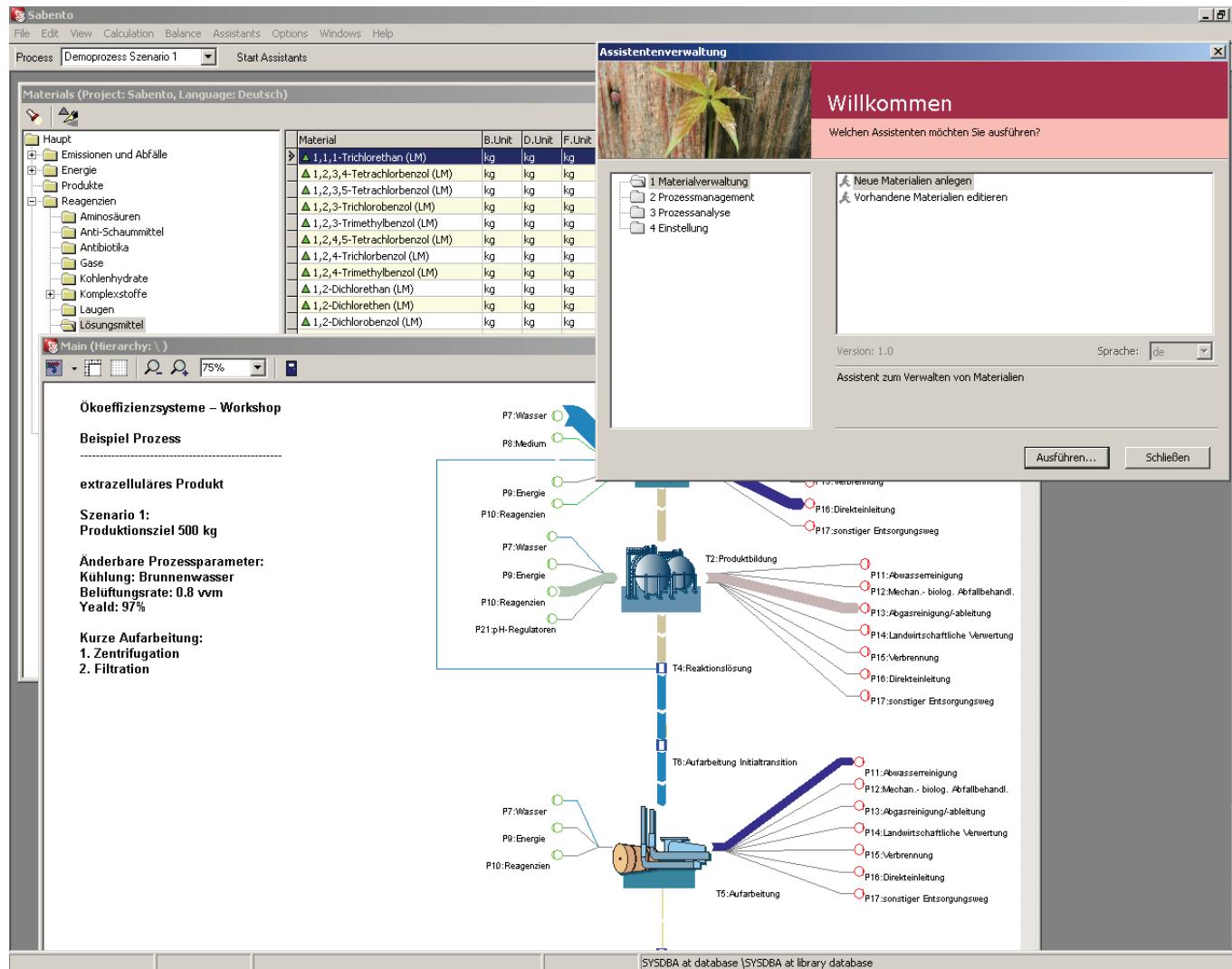
Deutsche Bundesstiftung Umwelt

[www.dbu.de](http://www.dbu.de)

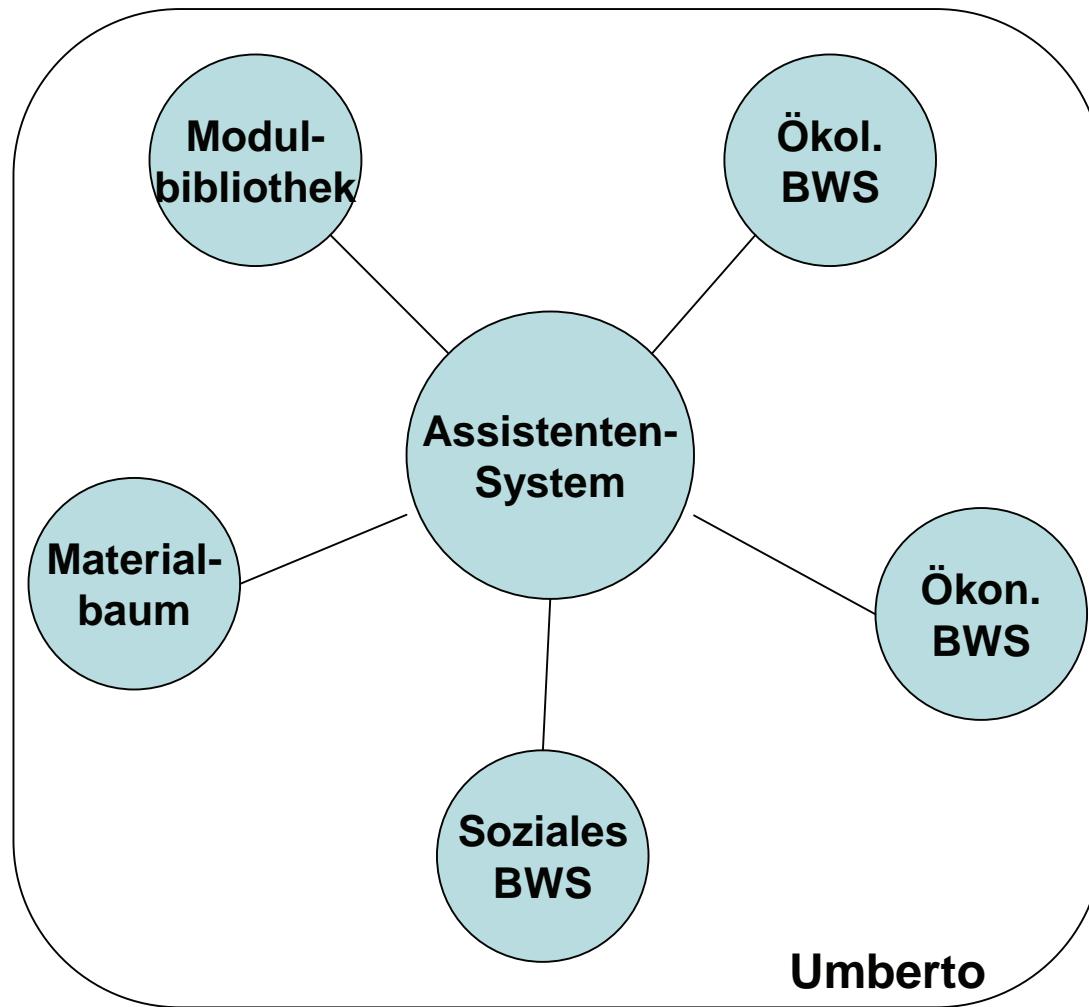
## Ziele des Forschungsclusters „Novel Process Windows“

- Prozesstechnische Entwicklungen im Bereich der Mikroverfahrenstechnik im Sinne einer nachhaltigen Entwicklung
- Stärkung der Innovationsfähigkeit der chemischen Industrie in Deutschland
- Dies zeichnet sich aus u.a. aus durch:
  - Hohe Energieeffizienz
  - Minimierung des Abfallaufkommens
  - Sichere und emissionsfreie oder –arme Synthesen

# Sabento – sustainability in biotech

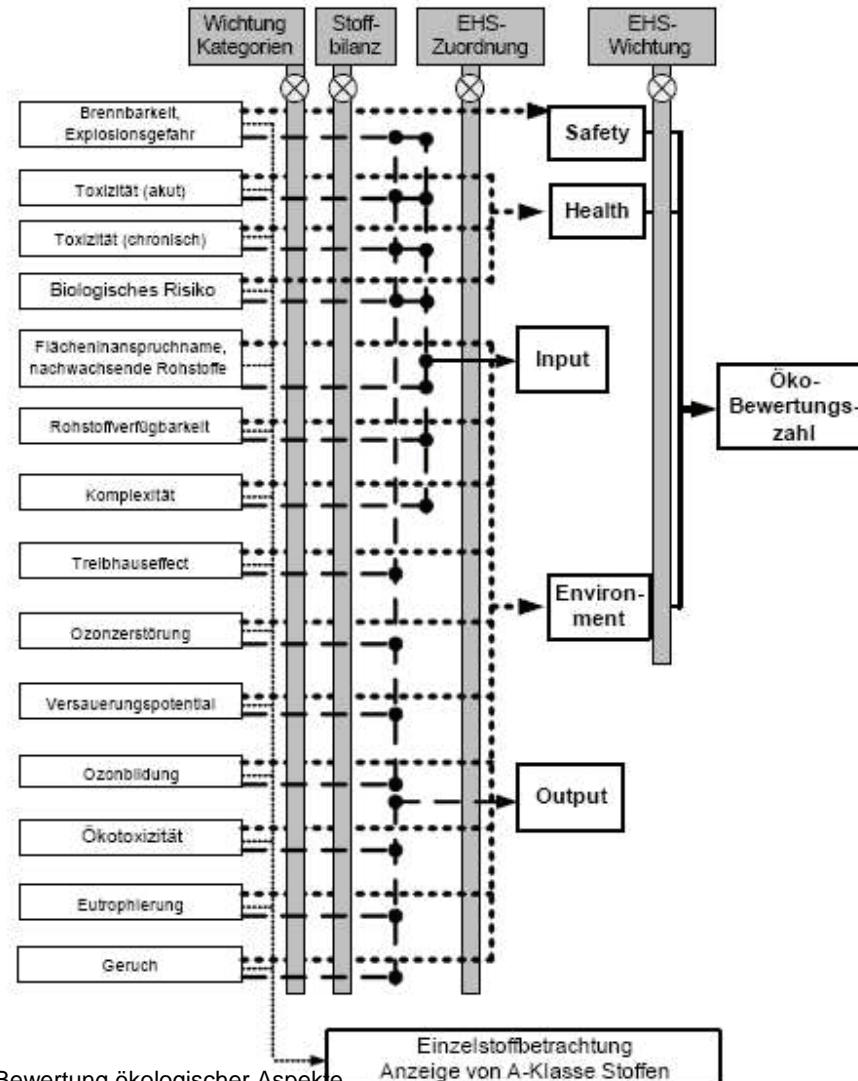


## Sabento: Aufbau der Software

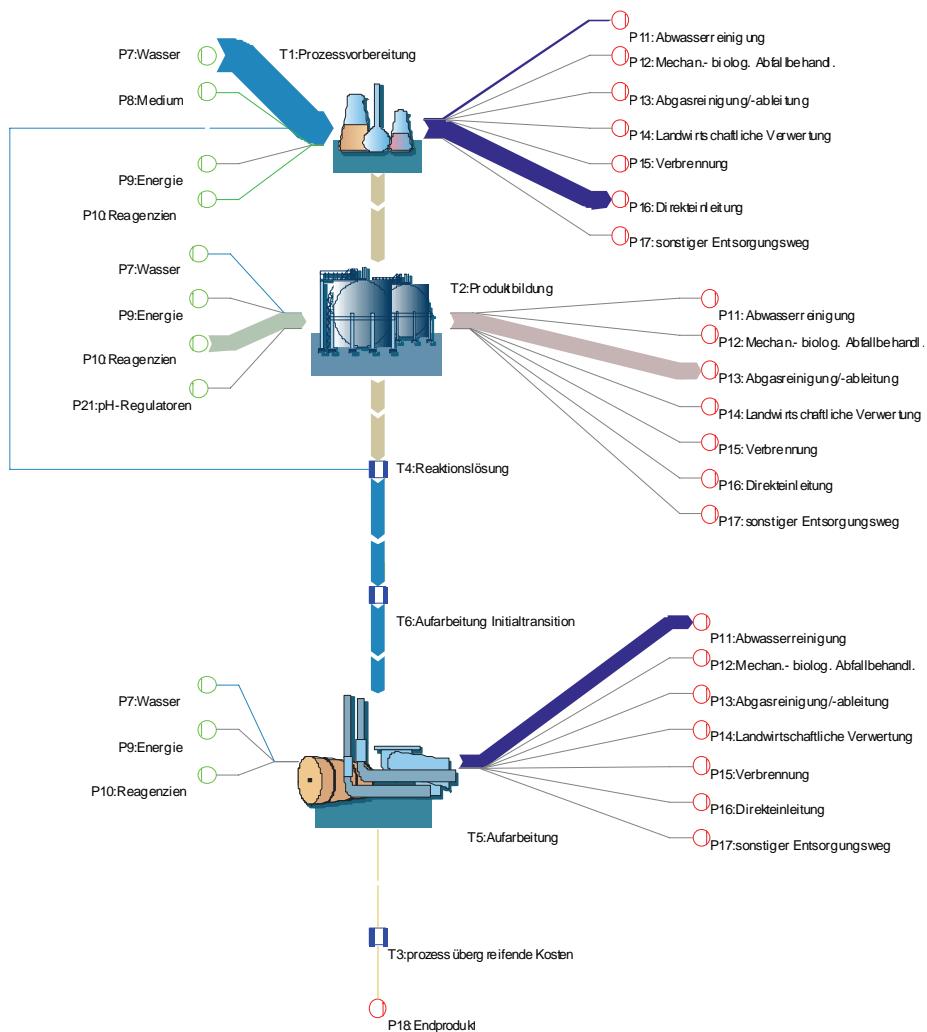


## Ökologisches Bewertungssystem

- ABC- Klassifizierung
- Massenbilanz
- mehrstufige Gewichtung
- Aggregation zur Umweltbewertungszahl (UBZ)
- Einzelstoffbetrachtung
- Darstellung allgemeiner Kennzahlen, wie Massen- und Energieindex.



Quelle: Lehrstuhl für Technische Biochemie (2003): Bewertung ökologischer Aspekte der Nachhaltigkeit biotechnischer Prozesse. Universität Saarbrücken. Unveröffentlichter Bericht Kontakt: Prof. Dr. Elmar Heinze



Wasser (Wasser)
Komplexe Stoffe, Salze
Produkte (Produkt)
Biomasse, Reagenzien (anorganisch), Reagenzien (organisch)
Laugen, Säuren
Zwischenprodukte
Gase
Wasser (Abwasser)
Biomasse (Abfall), Produkte (Abfall), Reagenzien (anorganisch) (Abfall), Reagenzien (organisch) (Abfall)
Gase (Abfall)

## Beispiel

### Vergleich von 3 Szenarien eines BT-Prozesses

## Vergleich von drei biotechnologischen Prozessen

	Szenario 1	Szenario 2	Szenario 3
<b>Produktionsziel</b>	500 kg	500 kg	500 kg
<b>Verkaufspreis</b>	3500 €/kg	3500 €/kg	3500 €/kg
<b>Belüftungsrate</b>	0.8 vvm	0.8 vvm	0.1 vvm
<b>Kühlwasserart</b>	Brunnenwasser	Brunnenwasser	Leitungswasser
<b>Ausbeute</b>	97%	85%	85%

## Ökologische Bewertung - Allgemeine Kennzahlen

Die Parametervariationen:

- Belüftungsrate
- Produktausbeute

wirken sich auf die Massen- und Energieströme aus

### Allgemeine Kennzahlen

Produktstrom	=	500	kg / Jahr
Inputstrom	=	123825	kg / Jahr
Abfallstrom	=	123325	kg / Jahr
Energiestrom	=	12376930	kJ / Jahr
Inputindex	=	248	kg / kg
Abfallindex	=	247	kg / kg
Energieindex	=	24754	kJ / kg

Szenario 1

### Allgemeine Kennzahlen

Produktstrom	=	500	kg / Jahr
Inputstrom	=	137342	kg / Jahr
Abfallstrom	=	136842	kg / Jahr
Energiestrom	=	13687999	kJ / Jahr
Inputindex	=	275	kg / kg
Abfallindex	=	274	kg / kg
Energieindex	=	27376	kJ / kg

Szenario 2

### Allgemeine Kennzahlen

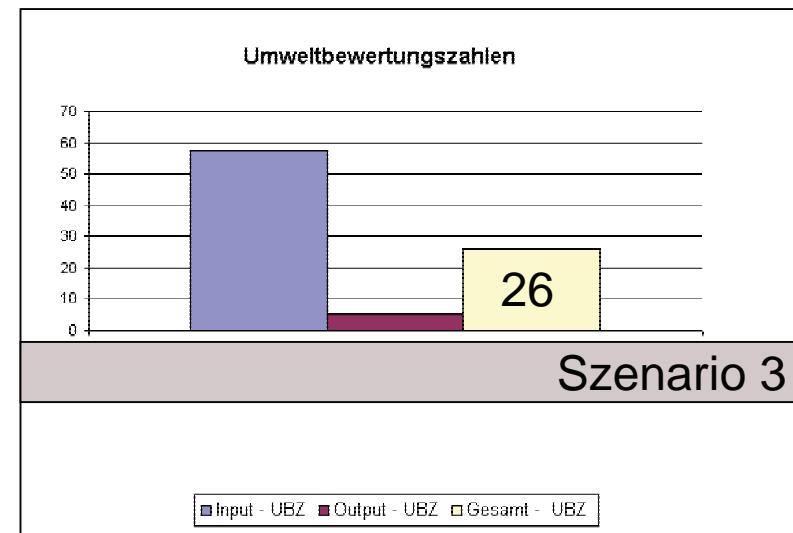
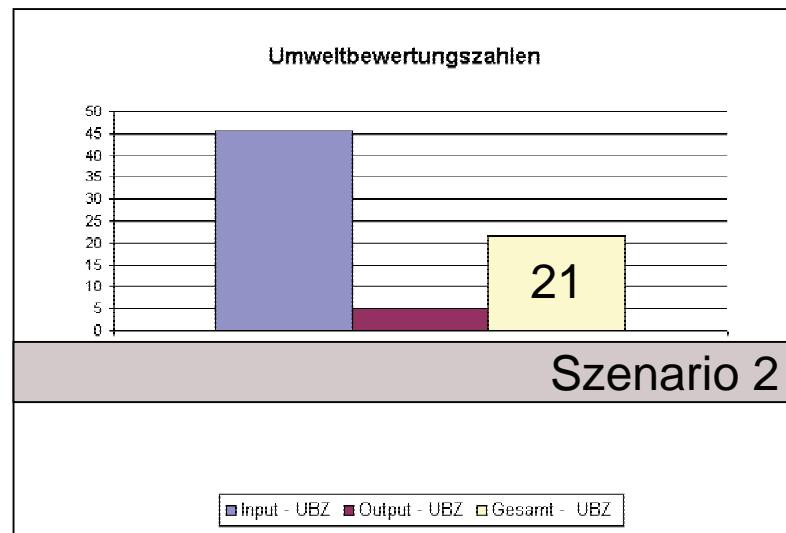
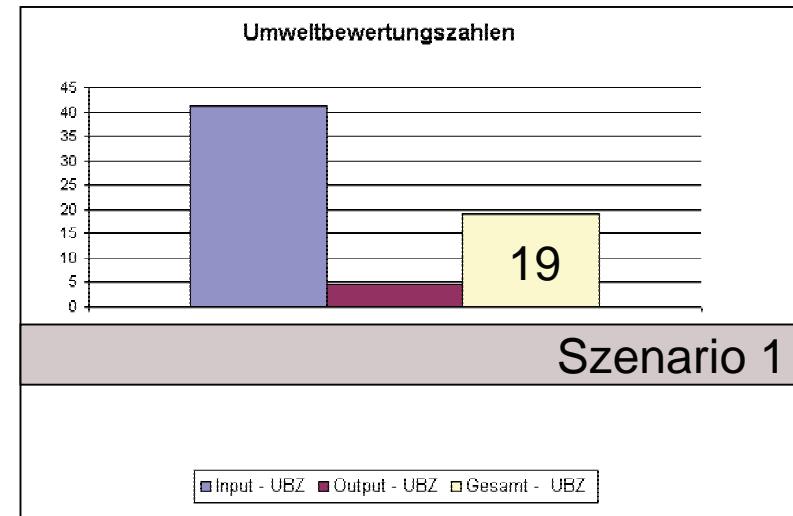
Produktstrom	=	500	kg / Jahr
Inputstrom	=	148406	kg / Jahr
Abfallstrom	=	147906	kg / Jahr
Energiestrom	=	15028975	kJ / Jahr
Inputindex	=	297	kg / kg
Abfallindex	=	296	kg / kg
Energieindex	=	30058	kJ / kg

Szenario 3

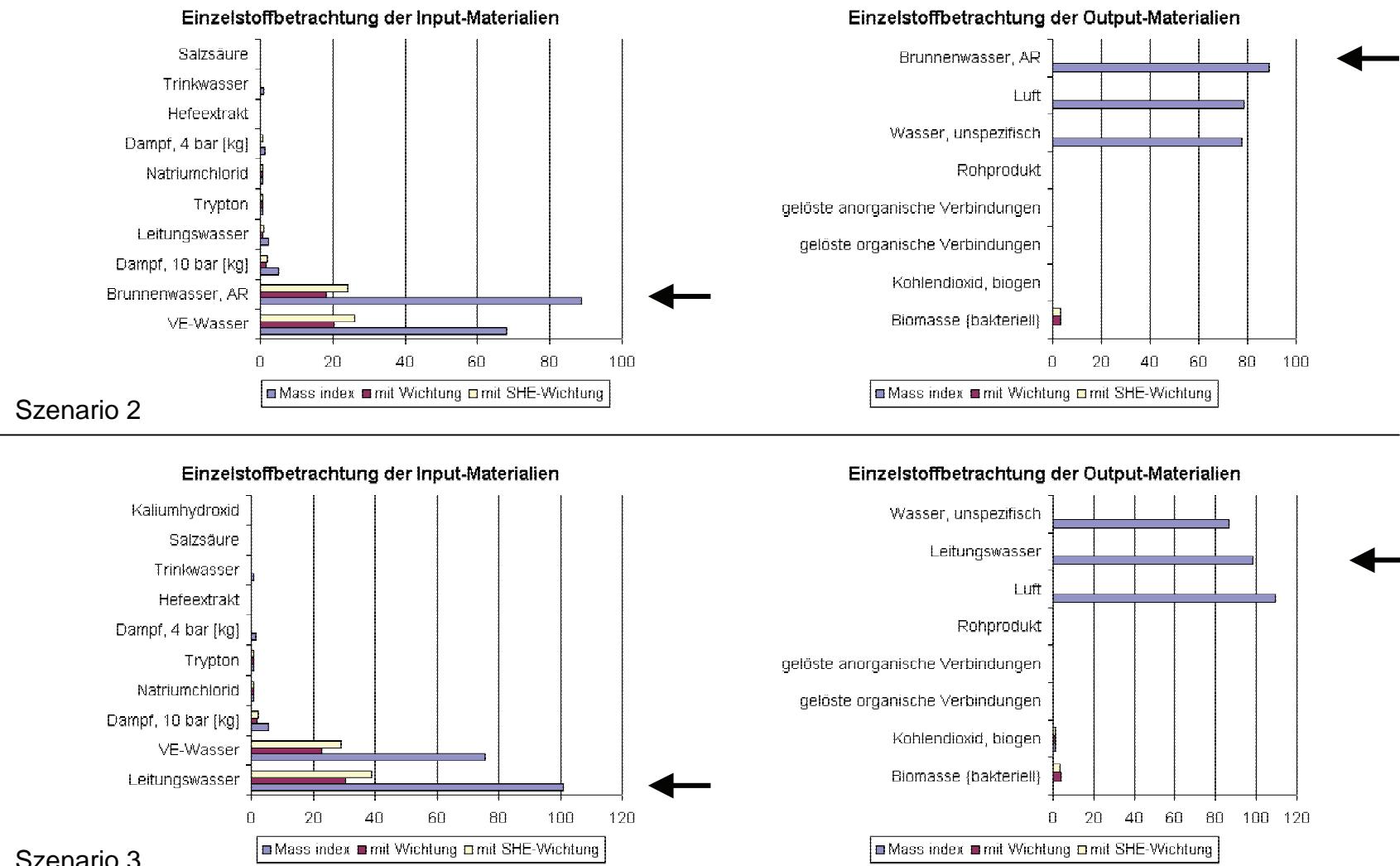
## Umweltbewertungszahlen (UBZ) in der Übersicht

Je kleiner die Umweltbewertungszahl ist, desto geringer sind die potentiellen Umweltwirkungen.

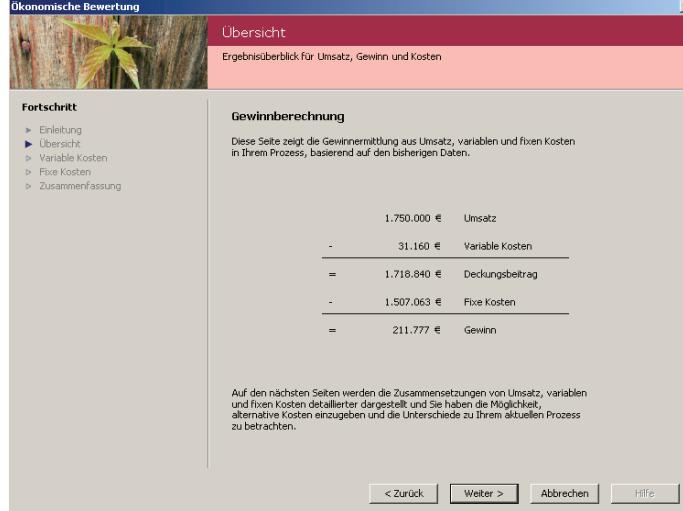
Szenario 1 ist in diesem Vergleich die umweltfreundlichere Alternative.



## Auswirkung der Kühlwasser –Art auf die Ergebnisse



# Kennzahlen der ökonomischen Bewertung – Szenario 1

	Berechnete Werte	
Deckungsbeitrag:	1718840 €	
Gewinn:	211777 €	
Return on Investment:	4.9 %	
Amortisationzeit:	20.4 Jahre	
Umsatzrendite:	12.1 %	

# EATOS - Environmental Assessment Tool for Organic Syntheses

## Main metrics

$$\text{Mass index } S^* = \frac{\sum \text{Raw material [kg]}}{\text{Product [kg]}}$$

Substrates [kg]  
 Product [kg]  
 Solvents (total) [kg]  
 Product [kg]  
 Solvents (recycling) [kg]  
 Product [kg]  
 Water [kg]  
 Product [kg]  
 ....

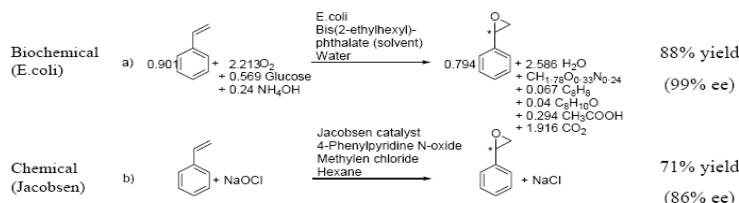
$$\text{Environmental factor } E = \frac{\sum \text{Waste [kg]}}{\text{Product [kg]}}$$

$$\text{Cost index } CI = \frac{\sum \text{Raw material [EURO]}}{\text{Product [kg]}}$$

4

## An example

### Enantioselective Epoxidation



a) S. Panke, M. Held, M. G. Wubbolts, B. Witholt, A. Schmid, *Biotechnology and Bioengineering* 2002, **80**, 33-41  
 b) According to J. F. Larwo, E. Roberts, T. R. Verhoeven, K. M. Ryan, C. H. Senanayake, P. J. Reider, E. N. Jacobsen, *Organic Syntheses*, **76**, 46.



5

## Metrics easily obtained.

How can calculations be performed.

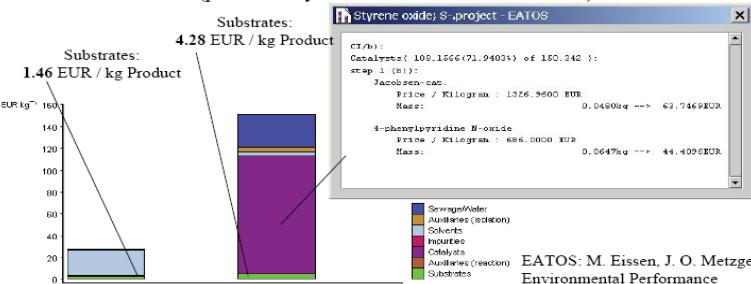
Enter stoichiometry



9

## An example

Cost index CI (presented by means of the software EATOS)



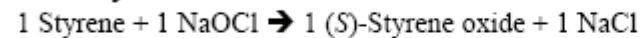
EATOS: M. Eissen, J. O. Metzger, Environmental Performance Metrics for Daily Use in Synthetic Chemistry, *Chem. Eur. J.* 2002, **8**, 3580-3585.  
 Market prices, except Jacobsen catalyst and 4-phenylpyridine N-oxide → Aldrich price / 10 was applied

6

# Metrics easily obtained.

How can calculations be performed.

Enter stoichiometry



b) - EATOS

Key substrate	Name	Coef.	Formula	Molecular weight
Import	Styrene	1	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub>	= 104.1512
Import	Sodium hypochlorite	1	NaOCl	= 74.44217

More   Fewer   Ok   Cancel

b) - EATOS

Name	Coef.	Formula	Molecular weight
Styrene oxide, (S)-	1	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O	= 120.1506

More   Fewer   Ok   Cancel

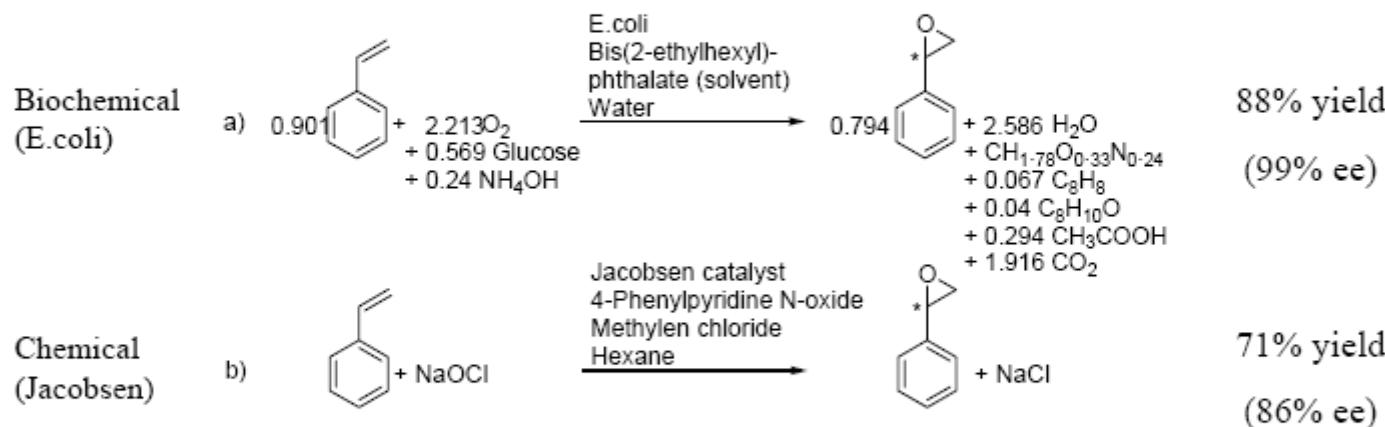
b) - EATOS

Name	Coef.	Formula	Molecular weight
Sodium chloride	1	NaCl	= 58.44277

More   Fewer   Ok   Cancel

# An example

## Enantioselective Epoxidation



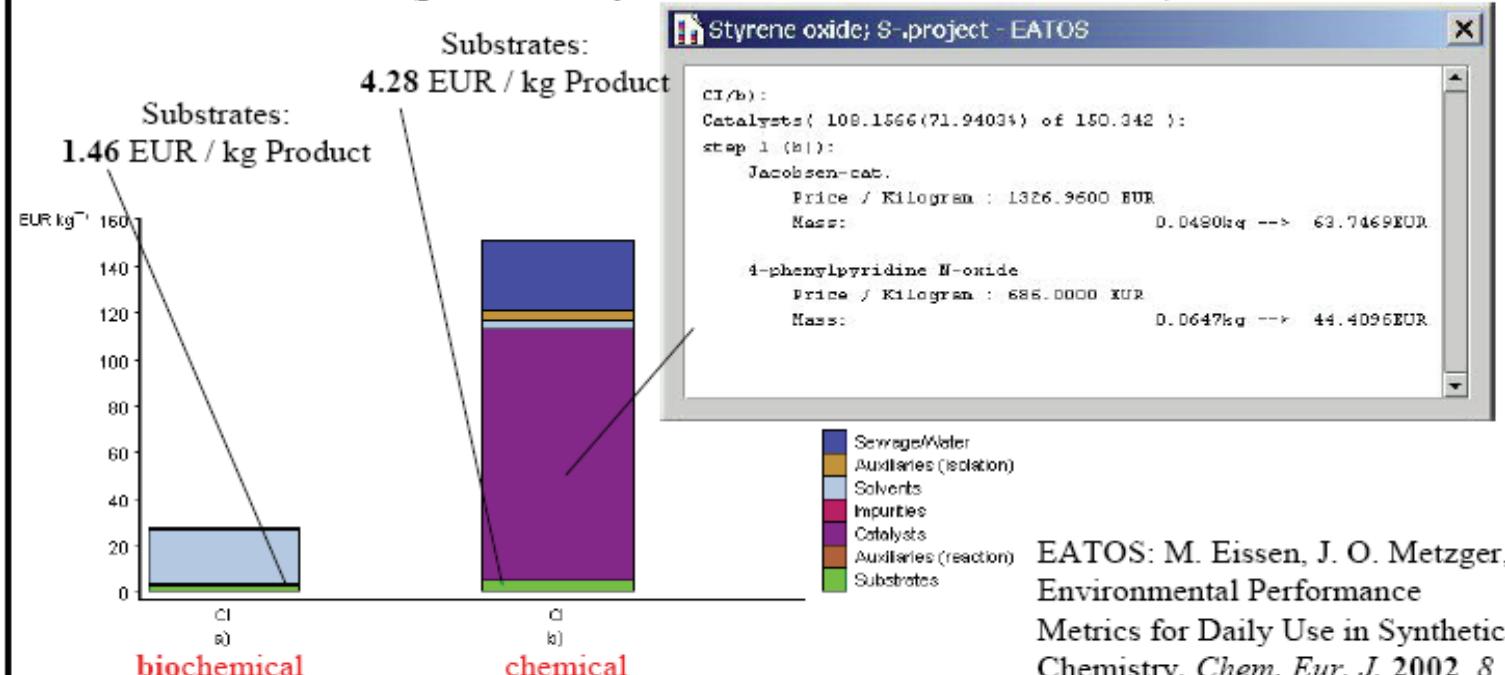
a) S. Panke, M. Held, M. G. Wubbolts, B. Witholt, A. Schmid, *Biotechnology and Bioengineering* 2002, 80, 33-41

b) According to J. F. Larrow, E. Roberts, T. R. Verhoeven, K. M. Ryan, C. H. Senanayake, P. J. Reider, E. N. Jacobsen, *Organic Syntheses*, 76, 46.



# An example

Cost index **CI** (presented by means of the software EATOS)



Market prices, except Jacobsen catalyst  
and 4-phenylpyridine N-oxide → Aldrich price / 10 was applied

## Nachhaltigkeitsbewertung chemischer Synthesen in Entwicklungsphasen

Ziele:

- Entwicklung eines Softwareprototypen, damit Synthesechemiker die optimale Synthese zielgerichtet und ohne kostenintensive Umwege finden.
- Assistentensystem vereinfacht die Bedienung der Software, u.a. soll damit die zeitaufwendige Datenaquise von Substratdaten ersetzt und der Nutzer der Software befähigt werden, die benötigten Daten automatisiert aus verschiedenen Datenbanken auszulesen.
- Informationen aus elektronischen Laborjournalen, sollen - wenn möglich – genutzt werden.
- Möglichkeit der Nutzung von etablierten LCA- Bewertungstools und LCA- Datenbanken zur weiterführenden Ökobilanzierung ist zu prüfen
- Bestreben der Schaffung von vielen Schnittstellen zu vorhandenen Softwaretools, die bereits in der chemischen Industrie eingesetzt werden



Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!