



# Nachhaltigkeitsbewertung chemischer Synthesen in Entwicklungsphasen

**Jan Hedemann & Tobias Brinkmann**

ifu Hamburg GmbH

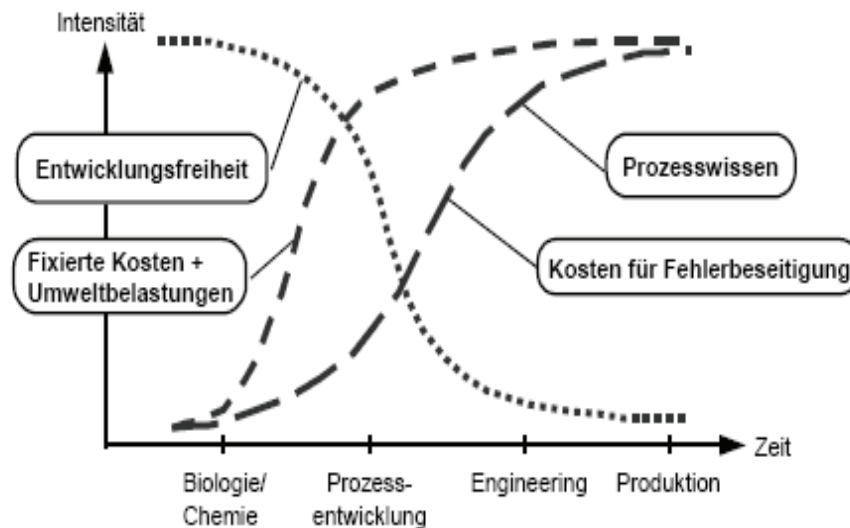
**Prof. Lohmüller, Prof. Steinigeweg & Dr. Eissen**

FH Oldenburg/ Ostfriesland/ Wilhelmshaven (OOW)

## Gliederung

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

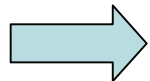
## Möglichkeiten in der Prozessentwicklung



Probleme:

- geringe Datendichte  
→ erhöhter Aufwand  
→ mehr Kosten
- Methodenpluralismus

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



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



Eidgenössische Technische Hochschule Zürich  
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

---

Externe Projektpartner

→ **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**  
File Edit View Calculation Balance Assistants Options Windows Help

Process: Demoprozess Szenario 1 Start Assistants

Materials (Project: Sabento, Language: Deutsch)

Material	B.Unit	D.Unit	F.Unit
1,1,1-Trichlorethan (LM)	kg	kg	kg
1,2,3,4-Tetrachlorbenzol (LM)	kg	kg	kg
1,2,3,5-Tetrachlorbenzol (LM)	kg	kg	kg
1,2,3-Trichlorbenzol (LM)	kg	kg	kg
1,2,3-Trimethylbenzol (LM)	kg	kg	kg
1,2,4,5-Tetrachlorbenzol (LM)	kg	kg	kg
1,2,4-Trichlorbenzol (LM)	kg	kg	kg
1,2,4-Trimethylbenzol (LM)	kg	kg	kg
1,2-Dichlorethan (LM)	kg	kg	kg
1,2-Dichloroethen (LM)	kg	kg	kg
1,2-Dichlorobenzol (LM)	kg	kg	kg

Main (Hierarchy: \ )

Okoeffizienzsyste – Workshop

Beispiel Prozess

extrazelluläres Produkt

Szenario 1:  
Produktionsziel 500 kg

Änderbare Prozessparameter:  
Kühlung: Brunnenwasser  
Belüftungsrate: 0.8 vvm  
Yield: 97%

Kurze Aufarbeitung:  
1. Zentrifugation  
2. Filtration

Assistentenverwaltung

Willkommen  
Welchen Assistenten möchten Sie ausführen?

- 1 Materialverwaltung
- 2 Prozessmanagement
- 3 Prozessanalyse
- 4 Einstellung

Neue Materialien anlegen  
Vorhandene Materialien editieren

Version: 1.0 Sprache: de

Assistent zum Verwalten von Materialien

Ausführen... Schließen

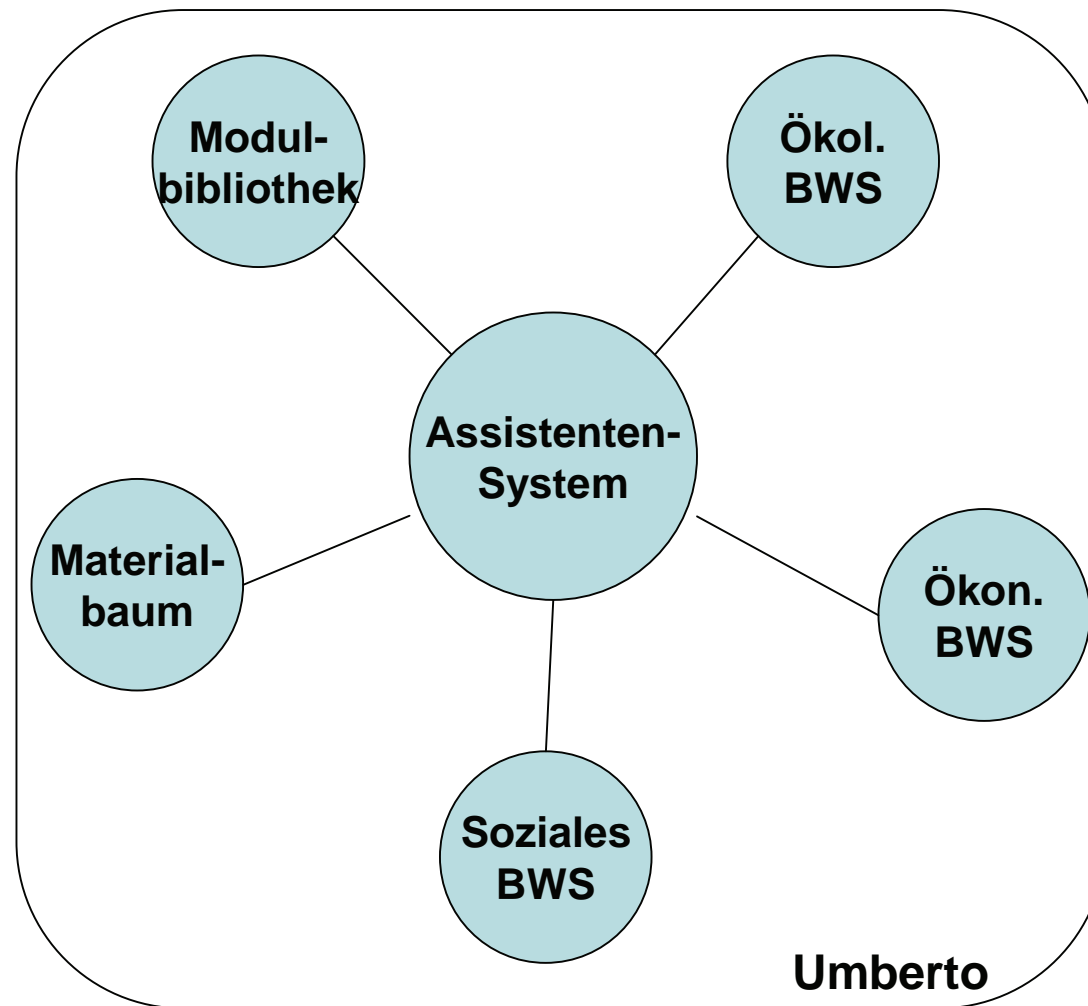
Diagramm des Prozesses:

Prozessflussdiagramm mit den folgenden Komponenten:

- Inputs:** P7: Wasser, P8: Medium, P9: Energie, P10: Reagenzien, P21: pH-Regulatoren.
- Process:** T2: Produktbildung, T4: Reaktionslösung, T5: Aufarbeitung, T6: Aufarbeitung Initialtransition.
- Outputs:** P11: Abwasserreinigung, P12: Mechan.-biolog. Abfallbehandl., P13: Abgasreinigung/ableitung, P14: Landwirtschaftliche Verwertung, P15: Verbrennung, P16: Direkteinleitung, P17: sonstiger Entsorgungsweg.

SYSDBA at database \SYSDBA at library database

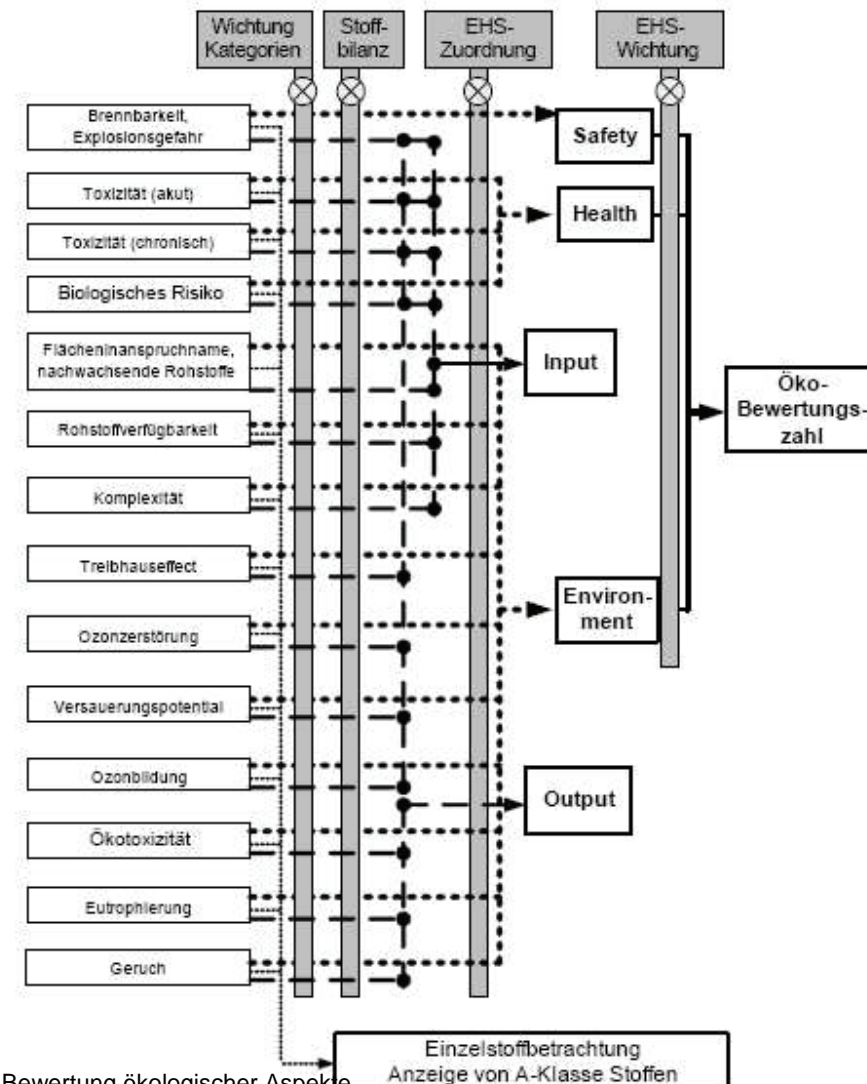
## Sabento: Aufbau der Software



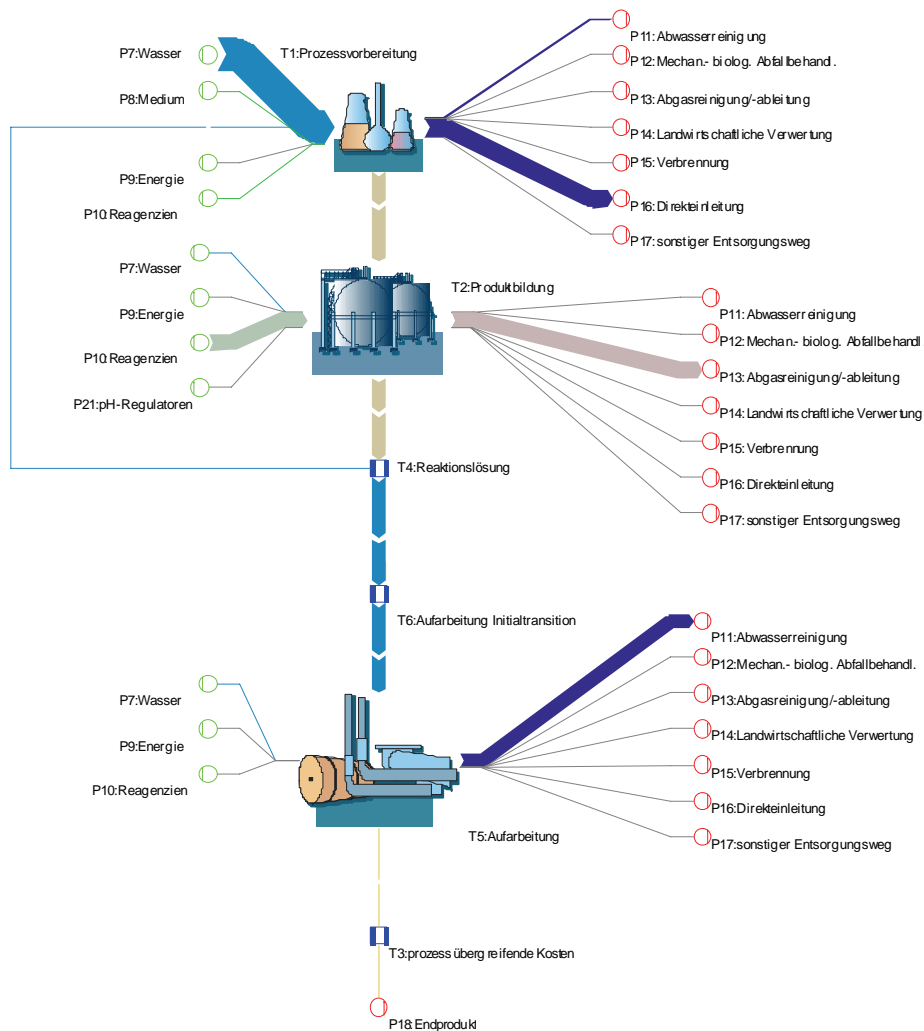


## Ökologisches Bewertungssystem

- 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 Heinzle



Wasser (Wasser)
Komplekstoffe, 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

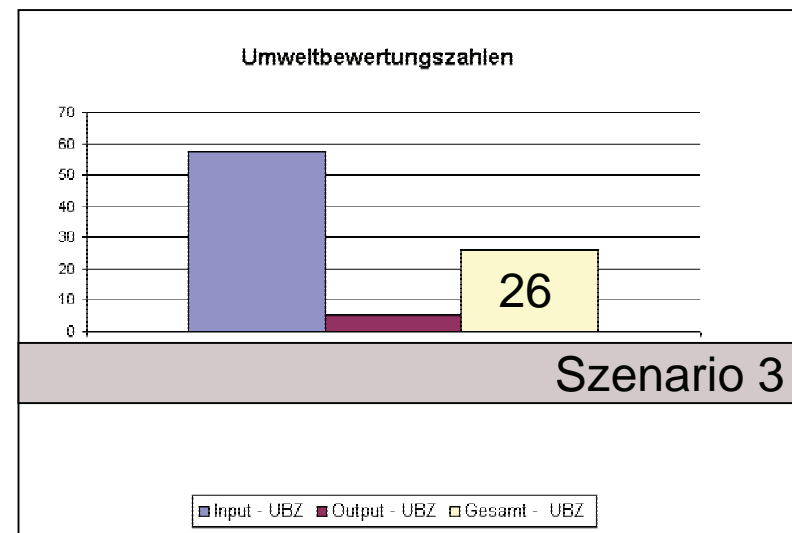
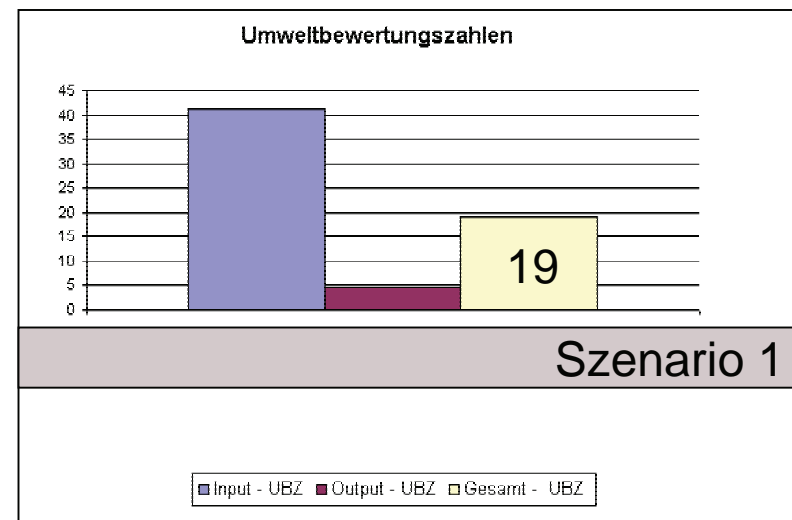
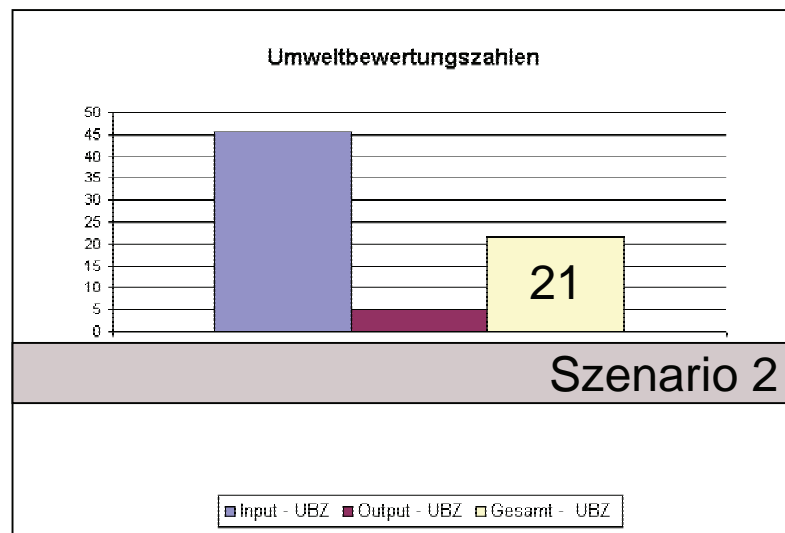
Produktstrom	=	500	kg / Jahr
Inputstrom	=	148406	kg / Jahr
Abfallstrom	=	147906	kg / Jahr
Energiestrom	=	15028975	kJ / Jahr
Inputindex	=	297	kg / kg
Abfallindex	=	296	kg / kg
Energieindex	=	30058	kJ / kg

Szenario 3

## Umweltbewertungszahlen (UBZ) in der Übersicht

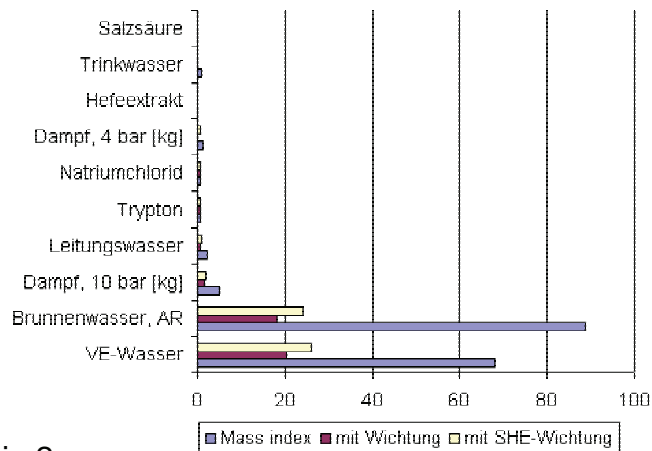
Je kleiner die Umweltbewertungszahl ist, desto geringer sind die potentiellen Umweltwirkungen.

Szenario 1 ist in diesem Vergleich die umweltfreundlichere Alternative.

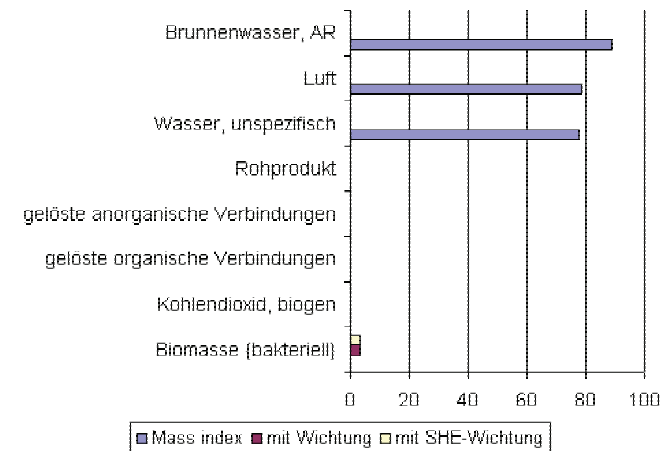


## Auswirkung der Kühlwasser –Art auf die Ergebnisse

Einzelstoffbetrachtung der Input-Materialien

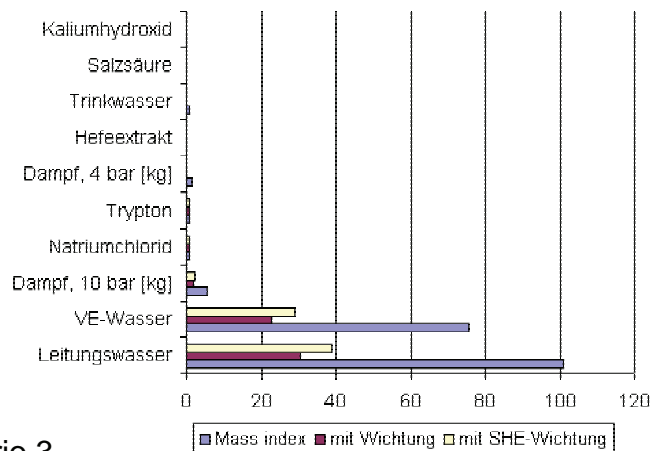


Einzelstoffbetrachtung der Output-Materialien

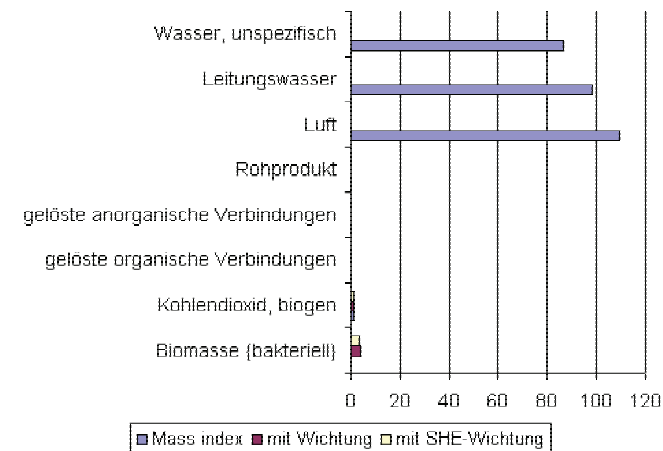


Szenario 2

Einzelstoffbetrachtung der Input-Materialien



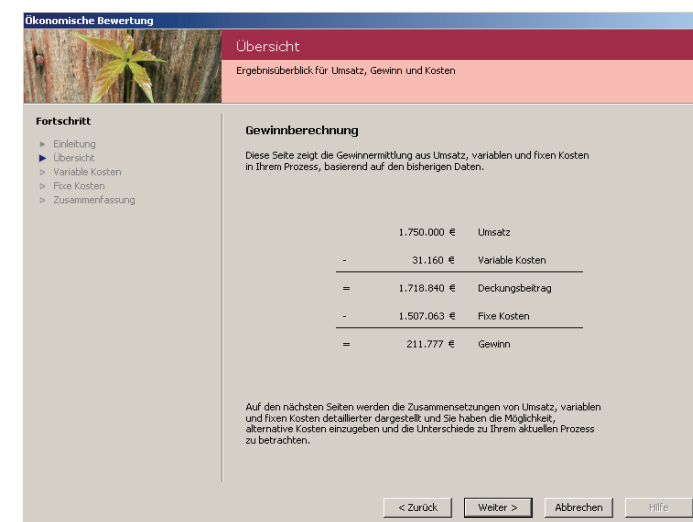
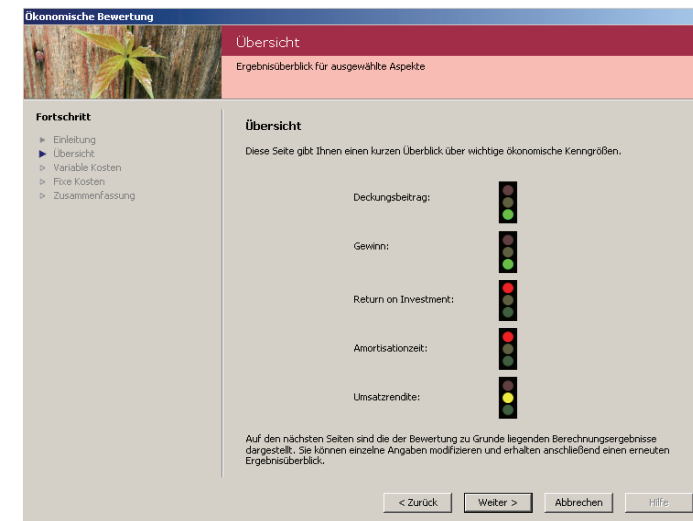
Einzelstoffbetrachtung der Output-Materialien



Szenario 3

## 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

$$\text{Mass index } S^{-1} = \frac{\sum \text{Raw material [kg]}}{\text{Product [kg]}}$$

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

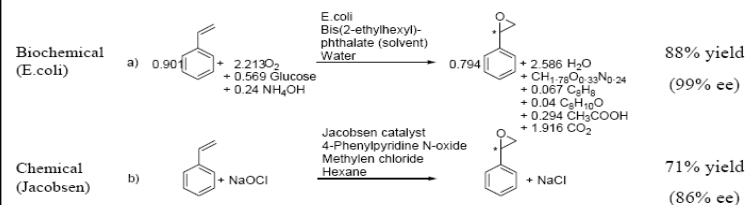
$$\text{Cost index } CI = \frac{\sum \text{Raw material [EURO]}}{\text{Product [kg]}}$$

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

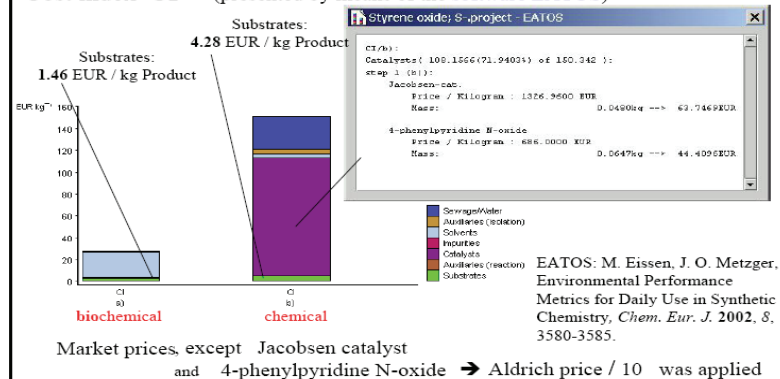
1 Styrene + 1 NaOCl → 1 (S)-Styrene oxide + 1 NaCl



9

## An example

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



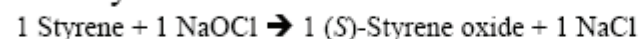
6



# Metrics easily obtained.

How can calculations be performed.

Enter stoichiometry



**b) - EATOS**

Substrates Product Coupled products

Key substrate	Name	Coef.	Formula	Molecular weight
<input type="radio"/> import	Styrene	1	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub>	= 104.1512
<input type="radio"/> import	Sodium hypochlorite	1	NaOCl	= 74.44217

More Fewer Ok Cancel

**b) - EATOS**

Substrates Product Coupled products

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

More Fewer Ok Cancel

**b) - EATOS**

Substrates Product Coupled products

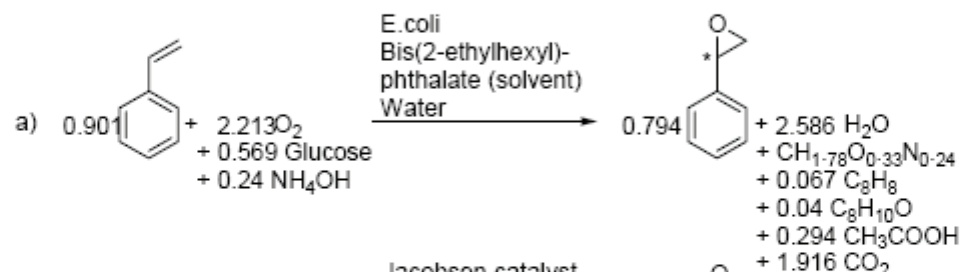
Name	Coef.	Formula	Molecular weight
import Sodium chloride	1	NaCl	= 58.44277

More Fewer Ok Cancel

# An example

## Enantioselective Epoxidation

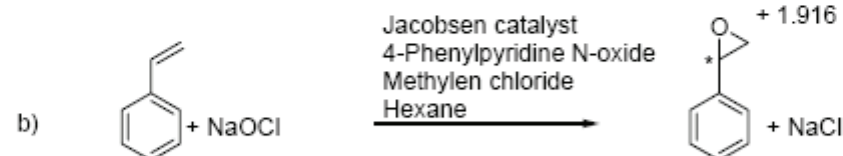
Biochemical  
(E.coli)



88% yield

(99% ee)

Chemical  
(Jacobsen)



71% yield

(86% ee)

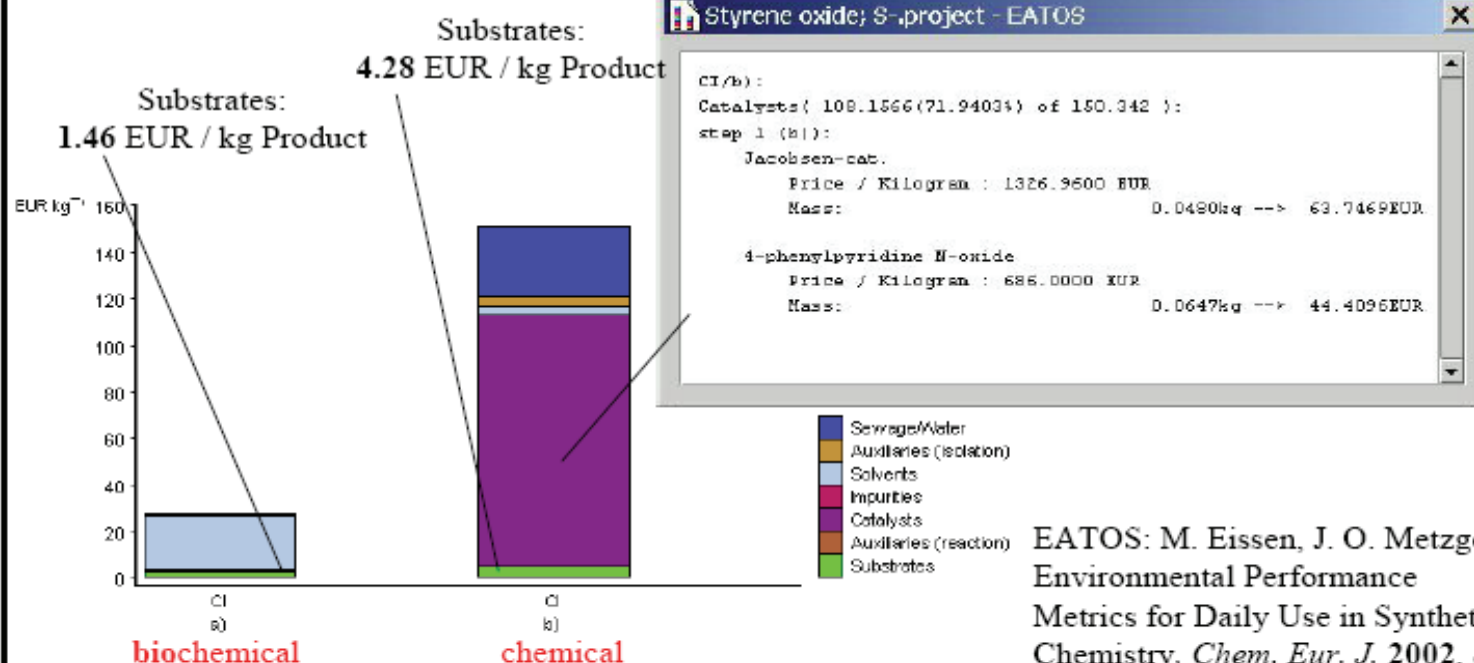
a) S. Panke, M. Held, M. G. Wubbolts, B. Witholt, A. Schmid, *Biotechnology and Bioengineering* 2002, 80, 33-41

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)



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

## 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!