



## Inputanalyse

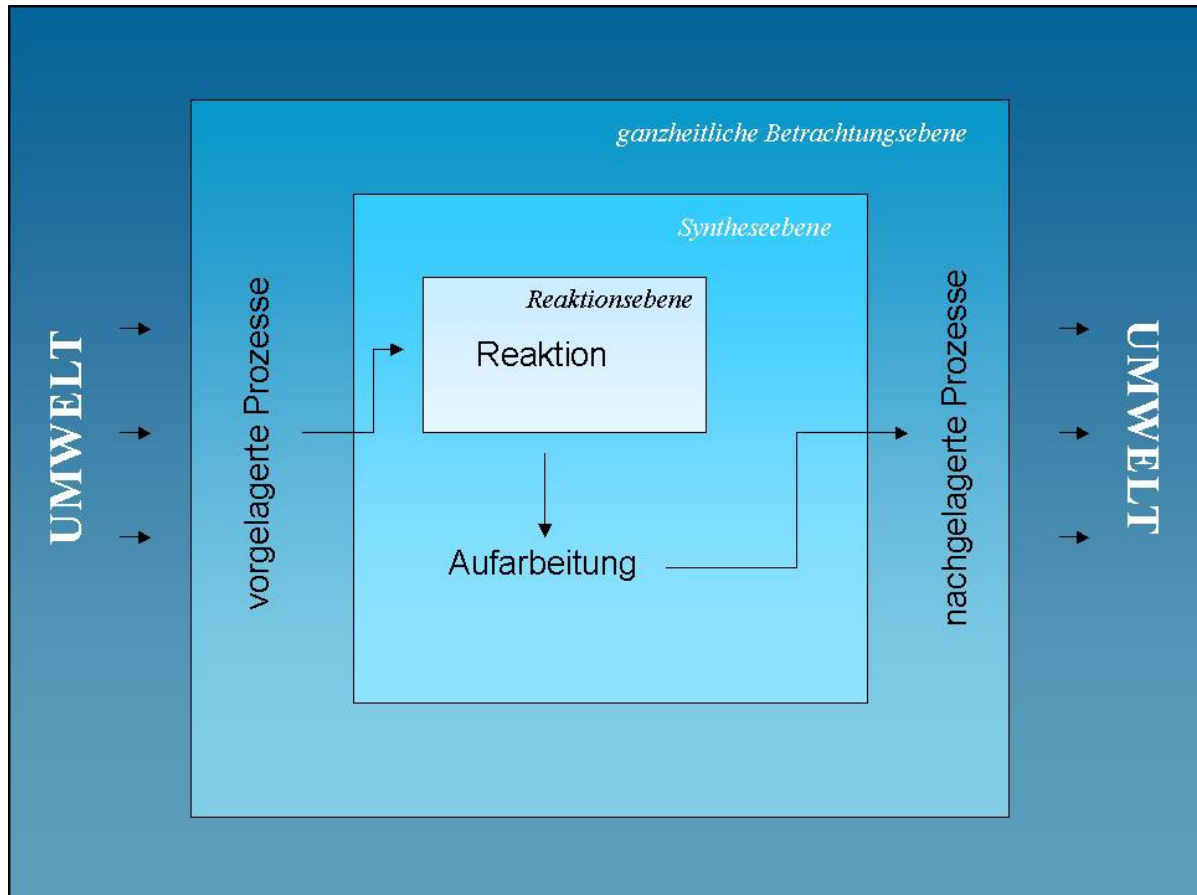
### Zusammenfassung

Die Inputanalyse ist eine Methode mit deren Hilfe erste Schwachstellen bei Produkten und Prozessen erkannt werden können. Sie lehnt sich an die Vorgaben der ISO 14040 Norm für die Durchführung von Ökobilanzen an. Im Gegensatz zu einer Ökobilanz wird bei der Inputanalyse jedoch keine Wirkungsauswertung erstellt, sondern die Auswertung nur anhand der Sachbilanzergebnisse durchgeführt.

Das nachfolgend vorgestellte Beispiel einer Inputanalyse soll das methodische Vorgehen bei der Analyse demonstrieren. Die im Beispiel erzielten Ergebnisse werden an anderer Stelle (siehe Text "Umweltaspekte der Energiezufuhr chemischer Reaktionen") diskutiert.

### Inputanalyse als Beispiel

Die Reaktion „Säurekatalysierte Acetalisierung von 3-Nitrobenzaldehyd mit Ethandiol zu 2-(3-Nitrophenyl)-1,3-dioxolan“ wurde mit Hilfe der Inputanalyse untersucht. Dabei wurde zum einen die klassische Reaktionsführung mit der alternativen Mikrowellenvariante verglichen, zum anderen in der klassischen Methode sowohl mit Ölbad als auch mit Heizpilz geheizt. Bei der Untersuchung wurden verschiedene Ebenen berücksichtigt. In einer ersten Ebene, der Reaktionsebene, wurden nur Stoff- und Energieströme untersucht, die direkt in Verbindung mit der Reaktion stehen. Die zweite Ebene, die Syntheseebene beinhaltet den Input von Reaktion und Aufarbeitung. Die dritte und letzte Stufe hat einen ganzheitlichen Ansatz. Hier sollen alle Inputströme, von der Exploration der Rohstoffe bis zum fertigen Produkt (unberücksichtigt bleibt die Entsorgung der Abfall- bzw. Reststoffe, da wir von gleicher Menge und Abfallbehandlung ausgehen) bilanziert werden. In Abb. 1 wird der zugrunde liegende Untersuchungsraum schematisch dargestellt.



**Abb. 1** Verschiedene Betrachtungsebenen bei der Untersuchung von Synthesen

Die durchgeführte Inputanalyse erfasst den Verbrauch an Stoffen und Energie nur hinsichtlich der Menge. Die Toxizitätspotenziale der jeweiligen Stoffe werden bei dieser Art von Analyse nicht berücksichtigt. Aufgrund der Vorgehensweise können mit Hilfe der Inputanalyse keine absoluten Aussagen bezüglich der durch die Prozesse hervorgerufenen Umweltlast gemacht werden. Das Verfahren ist allerdings in der Lage mit geringem Aufwand prozessbezogene Schwachstellen aufzudecken und zur Optimierung von Verfahren beizutragen.

### Bei der Reaktion erfasste Daten

Im folgenden Abschnitt sind die mittels Messungen erfassten Input- und Outputströme der verschiedenen Betrachtungsebenen dargestellt. Die Massen der eingesetzten Stoffe entstammen der Vorschrift. Die Energieverbrauchsdaten wurden mit Hilfe eines handelsüblichen Messgerätes erfasst. Der Kühlwasserverbrauch wurde gemessen.



### Stoff- und Energieströme der Reaktion – Input

		Ölbad	Heizpilz	Mikrowelle	
Stoffe und Hilfsstoffe	3-Nitrobenzaldehyd	7.55	7.55	7.55	g
	Ethylenglykol	3.42	3.42	3.42	g
	4-Toluolsulfonsäure-Monohydrat	0.40	0.40	0.40	g
	Cyclohexan	90.0	90.0	---	cm <sup>3</sup>
	Kühlwasser	12.1	12.1	---	dm <sup>3</sup>
Energie	Bereitstellung Energie thermisch	1444	1008	180	kJ
	Rühren	18	18	54	kJ
	Ölpumpe/Kryostat	43	43	43	kJ

Tab. 1 Stoff- und Energieströme der Reaktion – Input

### Stoff- und Energieströme der Synthese (Reaktion und Aufarbeitung)– Input

		Ölbad	Heizpilz	Mikrowelle	
Stoffe und Hilfsstoffe	3-Nitrobenzaldehyd	7.55	7.55	7.55	g
	Ethylenglykol	3.42	3.42	3.42	g
	4-Toluolsulfonsäure-Monohydrat	0.40	0.40	0.40	g
	Cyclohexan	90.0	90.0	---	cm <sup>3</sup>
	Kühlwasser	12.8	12.5	0.4	dm <sup>3</sup>
	Petrolether (40-60)	25.0	25.0	25.0	cm <sup>3</sup>
	Diethyl ether	25.0	25.0	25.0	cm <sup>3</sup>
Energie	Bereitstellung Energie thermisch	1627	1044	216	kJ
	Rühren	18	18	54	kJ
	Ölpumpe/Kryostat	86	86	86	kJ

Tab. 2 Stoff- und Energieströme der Reaktion – Input

### Stoff- und Energieströme der Synthese - Output

		Ölbad	Heizpilz	Mikrowelle	
	Abfälle	108.16	108.16	47.31	g
	1,3-Dioxolan	7.8	7.8	7.8	g
	Kühlwasser	12.8	12.5	0.4	dm <sup>3</sup>

Tab. 3 Stoff- und Energieströme der Reaktion – Output

Der In- und Output der Reaktions- und der Syntheseebene war aufgrund der beschränkten Zahl unterschiedlicher Ströme relativ leicht zu ermitteln. Deutlich schwerer ist es, die



Stoffströme bei einer ganzheitlichen Betrachtung zu erfassen. Hierzu müssen Daten unterschiedlichen Datenbanken entnommen und entsprechend verknüpft werden.

### **Stoff- und Energieströme - ganzheitliche Betrachtung**

Die Stoff- und Energieströme der ganzheitlichen Betrachtung sind sehr umfangreich. Aus diesem Grund wurden sie in den Anhang zu dieser Beschreibung gestellt. Im Anschluss an die Ermittlung der Stoff- und Energieströme unter Berücksichtigung der untersuchten Ebenen werden die Daten der unterschiedlichen Versuche miteinander verglichen und ausgewertet.

### **Die Auswertung**

Die Auswertung der Versuche erfolgt nach zwei Gesichtspunkten. Zum einen werden die Stoffströme zum anderen die die Energieströme ausgewertet.

### **Energieverbrauch**

Wie leicht zu ersehen ist, stellt die Mikrowellenvariante aus energetischer Sicht die günstigste Methode zur Durchführung der Reaktion dar. Hier spielt die kurze Reaktionszeit eine herausragende Rolle. Unter den klassischen Variationen ist der Energiezufuhr mit Heizpilz der Vorzug zu geben. Ursache hierfür ist die im Vergleich zum Ölbad bessere Isolation des Heizkorbes. Tab. 4 zeigt die für die jeweilige Prozessvariante benötigte elektrische Energie.

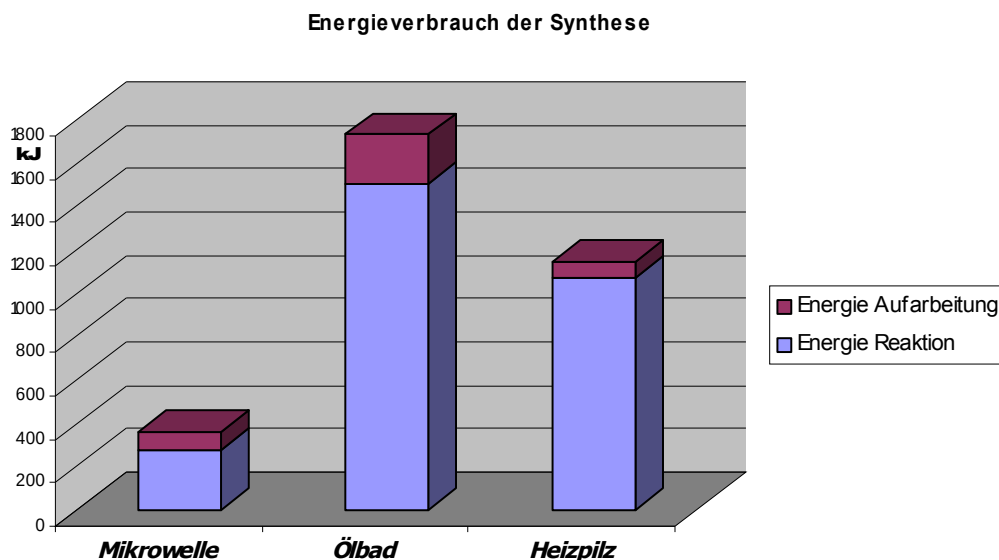
	Mikrowelle	Ölbad	Heizpilz	
Energie Reaktion	277	1505	1069	kJ
Energie Aufarbeitung	79	227	79	kJ
Gesamtenergie	356	1732	1148	kJ

**Tab. 4 Energieverbrauch der jeweiligen Prozessvariante**

Neben den Unterschieden der Reaktionsvariationen im Energieverbrauch, ist auch dessen Aufteilung innerhalb einer Synthese interessant. Es kann für die untersuchte Synthese gezeigt werden, dass der Anteil der Aufarbeitung am Energieverbrauch im Vergleich zur Reaktionsenergie klein ist und daher nur eine untergeordnete Rolle einnimmt. Mögliche



Optimierungen müssen daher an der Reaktion und nicht an der Methode der Aufarbeitung ansetzen. Den Anteil der Aufarbeitung in Relation zum Gesamtenergieverbrauch des Prozesses zeigt Abb. 2.



**Abb. 2 Energieverbrauch der Reaktion und der Aufarbeitung**

### Stoffverbrauch

Im Vergleich der untersuchten Varianten nach ihrem Stoffstrom schneidet die alternative Synthesevariante Mikrowelle ebenfalls besser ab als die mit klassischen Methoden des Energieeintrages durchgeführten Prozesse. Bei gleicher Edukt- und Katalysatormenge kann beim Einsatz der Mikrowelle auf Schleppmittel und auf Kühlwasser verzichtet werden. Unter Berücksichtigung vorgelagerter Prozesse wird der beschriebene Vorteil der Mikrowellen-Synthese noch deutlicher. Der Verzicht auf ein Schleppmittel Cyclohexan ermöglicht die Vermeidung von Umweltlasten die aus der Herstellung dieser Substanzen herrühren. Zusätzlich muss unter ganzheitlichen Gesichtspunkten erwähnt werden, dass aufgrund des geringeren Energieverbrauchs auch bei der Bereitstellung der Energie im Kraftwerk Umweltlasten vermindert und der Verbrauch der beschränkt vorhandenen Primärenergieträger Kohle, Erdöl und Gas reduziert werden kann.



## Anhang

Die in folgenden Tabellen angegebenen Daten stellen den Input bzw. Output des betrachteten Beispiels „Acetalisierung“ dar. Stoffe, die nicht direkt mit der Reaktion verbunden werden können, stammen aus der Reaktion vorgelagerten Prozessen.

*Beispiel:* Die als Input bei der Reaktion aufgeführte Braunkohle wird zur Bereitstellung der in der Reaktion verbrauchten elektrischen Energie benötigt.


**Tabelle: Stoff- und Energieströme ganzheitliche Betrachtung –Input**

	Heizpflanz		Mikrowelle		Ölbad	
Chemische Grundstoffe						
Chem. Grundstoffe, anorg.						
Natriumhydrogencarbonat	5.39	g	5.39	g	5.39	g
Sauerstoff	3.87	g	3.87	g	3.87	g
Chem. Grundstoffe. org.						
Diethylether	17.84	g	17.84	g	17.84	g
Petrolether	16.60	g	16.60	g	16.60	g
tert. Butylmethylether	79.81	g	79.81	g	79.81	g
Luft	1035.43	g	1035.43	g	1035.43	g
Feinchemikalien						
4-Toluolsulfonsäure-Monohydrat	400.00	mg	400.00	mg	400.00	mg
Kumulierter Energieaufwand (KEA)	20368.13	kJ	13351.52	kJ	22362.69	kJ
Mineralien						
Natriumsulfat	43142.86	mg	43142.86	mg	43142.86	mg
Rohstoffe in Lagerstätten (RiL)						
Energieträger (RiL)						
Braunkohle	472.88	g	386.99	g	536.03	g
Erdgas	98.38	g	42.36	g	101.62	g
Erdöl	59.52	g	14.46	g	60.36	g
Holz	3.70	mg	3.70	mg	3.70	mg
Steinkohle	137.11	g	105.83	g	158.70	g
Uran	7.07	mg	7.07	mg	7.07	mg
Nichtenergieträger (RiL)			0.05	kg	0.05	kg
Bauxit	32.89	mg	9.47	mg	32.89	mg
Bentonit	14.59	mg	2.23	mg	14.59	mg
Calciumsulfat	1.46	mg	0.22	mg	1.46	mg
Dolomit	0.61	mg	0.09	mg	0.61	mg
Eisen	55.86	mg	8.24	mg	55.86	mg
Kalkstein	15323.53	mg	14114.45	mg	16175.79	mg
Kies	0.15	mg	0.02	mg	0.15	mg
Mineralien (RiL)						
Flussspat	0.09	mg	0.09	mg	0.09	mg
Natriumchlorid	153.69	mg	95.43	mg	153.69	mg



Olivin	0.46	mg	0.07	mg	0.46	mg
--------	------	----	------	----	------	----

Fortsetzung	Heizpilz		Mikrowelle		Ölbad	
Sand	277.08	mg	269.87	mg	277.08	mg
Schiefer	4.03	mg	0.65	mg	4.03	mg
Schwefel	35263.64	mg	35255.11	mg	35263.64	mg
Ton	1.25	mg	0.14	mg	1.25	mg
Wasser	380.30	kg	305.82	kg	389.35	kg
kJ	20368.13	kJ	13351.52	kJ	22362.69	kJ
kg	382.32	kg	307.62	kg	391.46	kg

**Tabelle: Stoff- und Energieströme ganzheitliche Betrachtung –Output**

	Heizpilz		Ölbad		Mikrowelle	
Abfälle						
Abfälle zur Beseitigung (AzB)						
Abfälle zur Verbrennung	108.12	g	108.12	g	38.01	g
Abfälle. hausmüllähnlich	62.02	mg	62.02	mg	6.35	mg
Abfälle. sonstige (AzB)						
Klärschlamm	2.92	mg	3.57	mg	2.05	mg
Abfälle. unspezifiziert	213.75	mg	213.75	mg	153.60	mg
Abraum	3019.41	g	3019.41	g	3018.85	g
Aschen u. Schlacken	8696.78	mg	12917.99	mg	2843.89	mg
Metalle	0.48	mg	0.48	mg	0.09	mg
Radioaktive Abfälle (hochradioaktiv)						
Sonderabfall	2.89	mg	2.89	mg	2.89	mg
Sondermüll	42.42	mg	47.90	mg	3.67	mg
Abfälle zur Verwertung (AzV)						
Abfälle. sonstige (AzV)						
Aschen u. Schlacken	4907.43	mg	7312.27	mg	1641.61	mg
Filterstaub	2301.52	mg	2301.52	mg	2301.52	mg
Gips (REA)	7946.59	mg	7946.59	mg	7946.59	mg
Grobasche	344.03	mg	344.03	mg	344.03	mg
Natriumsulfat	75.49	mg	75.49	mg	75.49	mg
Schmelzkammergranulat	2884.42	mg	2884.42	mg	2884.42	mg
Wertstoffe. gemischt	10.41	mg	10.41	mg		
Wirbelschichtasche	230.15	mg	230.15	mg	230.15	mg





Fortsetzung	Heizpilz		Ölbad		Mikrowelle	
Abfälle. unspezifiziert	30.92	mg	41.83	mg	16.10	mg
verd. Nitriersäure mit Nitratspuren	1075.51	g	1075.51	g	1075.51	g
Chemische Grundstoffe						
Chem. Grundstoffe. anorg.						
Natriumhydrogencarbonat	5.39	g	5.39	g	5.39	g
Chem. Grundstoffe. org.	0.08	kg	0.08	kg	0.08	kg
Benzoessäure	2272.18	mg	2272.18	mg	2272.18	mg
Maleinsäure	2272.18	mg	2272.18	mg	2272.18	mg
tert. Butylmethylether	79.81	g	79.81	g	79.81	g
Emissionen (Boden)						
Metalle (W)						
Aluminium	1.63	mg	1.63	mg	0.59	mg
Blei	0.30	mg	0.30	mg	0.30	mg
Mangan	0.58	mg	0.58	mg	0.58	mg
Metalle. unspez.	21.92	mg	21.92	mg	5.35	mg
Molybdän	0.07	mg	0.07	mg	0.07	mg
Metalle. unspez.	21.92	mg	21.92	mg	5.35	mg
Molybdän	0.07	mg	0.07	mg	0.07	mg
Natrium	14.84	mg	14.84	mg	3.12	mg
Uran	0.10	mg	0.10	mg	0.10	mg
Vanadium	0.06	mg	0.06	mg	0.06	mg
Emissionen (Luft)						
Partikel	0.14	mg	0.14	mg	0.14	mg
Staub	218.43	mg	291.38	mg	61.94	mg
Staub (>PM10)	9.36	mg	9.36	mg	9.36	mg
Staub (PM10)	21.87	mg	21.87	mg	21.87	mg
Verbindungen. anorg. (L)						
Ammoniak	22.17	mg	22.83	mg	18.73	mg
Chlorwasserstoff	61.60	mg	81.24	mg	33.74	mg
Distickstoffmonoxid	482.77	mg	483.55	mg	481.71	mg
Fluorwasserstoff	8.39	mg	11.10	mg	4.71	mg
Kohlendioxid (L)	1.03	kg	1.15	kg	0.77	kg
Kohlendioxid. fossil	1031.75	g	1154.70	g	768.98	g
Kohlenmonoxid	301.32	mg	315.80	mg	180.62	mg
Metalle (L)						
Metalle. unspez.	0.16	mg	0.16	mg	0.02	mg
Nickel	0.09	mg	0.10	mg	0.08	mg



Fortsetzung	Heizpilz		Ölbad		Mikrowelle	
Selen	0.09	mg	0.09	mg	0.09	mg
Metalle. unspez.	21.92	mg	21.92	mg	5.35	mg
NOx	1997.64	mg	2144.39	mg	1368.71	mg
Radionuklide (L)	431.85	kBq	431.85	kBq	431.85	kBq
Radionuklide. gesamt	431852	Bq	431852.39	Bq	431852.39	Bq
Schwefeldioxid	2729.63	mg	3253.10	mg	1706.05	mg
Schwefelwasserstoff	0.18	mg	0.18	mg	0.18	mg
Wasserstoff	1.56	mg	1.56	mg	0.65	mg
Metalle. unspez.	21.92	mg	21.92	mg		
VOC (L)						
Methan	2420.85	mg	2748.18	mg	1533.88	mg
NMVOC (L)						
Benzol	0.13	mg	0.17	mg	0.08	mg
NMVOC. arom. unspez.	4.39	mg	4.39	mg	0.75	mg
Hexan	0.12	mg	0.12	mg	0.12	mg
NMVOC. sauerstoffh. (L)	0.00	kg	0.00	kg	0.00	kg
Formaldehyd	0.08	mg	0.08	mg	0.08	mg
NMVOC. unspez.	175.02	mg	178.75	mg	169.95	mg
VOC (Kohlenwasserstoffe)	108.74	mg	108.74	mg		
Emissionen (Wasser)						
Emissionen (W)						
Carbonat	13.72	mg	13.72	mg	2.01	mg
Chlorid	120.24	mg	120.24	mg	67.86	mg
Feststoffe. gelöst	10.78	mg	10.78	mg	3.57	mg
Feststoffe. suspendiert	15.98	mg	15.98	mg	3.21	mg
Fluorid	0.13	mg	0.13	mg	0.13	mg
Säuren als H(+)	4.05	mg	4.05	mg	0.62	mg
Ammoniak	0.29	mg	0.29	mg	0.29	mg
Ammonium	1.42	mg	1.42	mg	1.16	mg
Nitrat	0.42	mg	0.42	mg	0.16	mg
Stickstoffverb.. unspez.	0.49	mg	0.49	mg	0.17	mg
Sulfat	628.11	mg	628.11	mg	609.93	mg
Verbindungen. anorganisch (W)						
Chlor	0.87	mg	0.87	mg	0.87	mg
Detergenzien. Öl	4.01	mg	4.01	mg	0.43	mg
Kohlenwasserstoffe (W)						
Kohlenwasserstoffe. unspez.	3.03	mg	3.03	mg	0.42	mg



Fortsetzung	Heizpilz		Ölbad		Mikrowelle	
KW. unspez.	0.65	mg	0.65	mg	0.65	mg
Phenole	0.07	mg	0.07	mg	0.00	mg
Verbindungen. org.. gelöst	1.17	mg	1.17	mg		
Verbindungen. org.. unspez.	0.13	mg	0.13	mg		
Indikatorparameter						
BSB-5	2.55	mg	2.55	mg	0.71	mg
CSB	15.76	mg	15.76	mg	4.03	mg
TOC	1.37	mg	1.37	mg	1.37	mg
Feinchemikalien						
1,3-Dioxolan	7800.00	mg	7800.00	mg	7800.00	mg
Mineralien						
Gips (REA)	3125.44	mg	4666.75	mg	1032.30	mg
Natriumsulfat	43142.9	mg	43142.86	mg	43142.86	mg
Wasser	379.28	kg	388.15	kg	305.05	kg
kJ	20368.1	kJ	22362.69	kJ	13351.52	kJ
kg	382.32	kg	391.46	kg	307.62	kg