Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Fakultät für Chemie und Geowissenschaften

Ökobilanzielle Betrachtung von „Carbon Capture and Utilization“-Verfahren für die Produktion von Basischemikalien in der chemischen Industrie

Masterarbeit zur Erlangung des akademischen Grades

Master of Science

Marian Rosental

Im Fach Chemie

Betreuer: Prof. Dr. Peter Comba

01.07.2019 bis 08.01.2020

Angefertigt am Institut für Energie- und Umweltforschung

Betreut durch Axel Liebich und Dr. Thomas Fröhlich

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt habe. Es wurden nur die in der Arbeit ausdrücklich genannten Quellen und Hilfsmittel verwendet. Wörtlich oder sinngemäß übernommenes Gedankengut wurde als solches kenntlich gemacht. Die Arbeit enthält kein Material, das ich bereits zu einem früheren Zeitpunkt als Prüfungsleistung eingereicht habe.

Heidelberg, den 08. Januar 2020

Marian Rosental

Geboren am 16.10.1992
In Wiesbaden

Matrikelnummer: 3164499
Kontakt: marian.rosental@ifeu.de

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung ..... **IV**

Abstract ..... **V**

1 Einleitung **1**

1.1 Klimawandel und Treibhauseffekt *1*

1.2 Kohlenstoffkreislauf und CO_2-Flüsse *3*

1.3 Carbon Capture and Utilization (CCU) *6*

1.4 Erneuerbare Energien *8*

1.5 Produktion von Basischemikalien *10*

2 Motivation und Zielsetzung **12**

3 Life Cycle Assessment (LCA) **13**

3.1 LCA-Methode *13*

3.2 Ziel und Untersuchungsrahmen *14*

3.3 Sachbilanz *16*

3.4 Wirkungsabschätzung (LCIA) *17*

3.5 Auswertung – Interpretation und Evaluation *19*

4 Chemische Prozesse und Modelle **20**

4.1 Carbon Capture Methoden *20*

4.1.1 Carboanhydrase 21

4.1.2 Direct Air Capture (DAC) 22

4.1.3 Aminwäsche mit Monoethanolamin (MEA) 23

4.2 Wasserstoffherstellung *24*

4.2.1 Alkalische Elektrolyse (AE) 25

4.2.2 Polyelektrolytmembran (PEM) Elektrolyse 26

4.2.3 Hochtemperaturelektrolyse (HTE) 26

4.2.4 Überblick der AE, PEM und HTE 27

4.3 Chemische Verfahren *28*

4.3.1 Methanol aus CO_2 28

4.3.2 Sabatier-Methanisierung 30

4.3.3 Reverse Water Gas Shift (RWGS) 31
4.3.4 Methanol-to-Olefins (MTO) 33
4.3.5 Methanol-to-Aromatics (MTA) 34
4.3.6 Fischer-Tropsch-(FT)-Synthese 35

4.4 Sonstige Verfahren 36
4.4.1 Methan zu Methanol 36
4.4.2 Methan zu Ethylen und Benzol 37
4.4.3 Synthesegas zu Olefinen 38
4.4.4 Homogene Katalyse 38

5 LCA von CCU für die Produktion von Basischemikalien 40

5.1 Ziel und Untersuchungsrahmen 40
5.1.1 Produktsystem, Systemgrenze, Funktionelle Einheit 40
5.1.2 Wirkungskategorien, LCIA Methode 41
5.1.3 Allokationsregeln 42
5.1.4 Daten und grundlegende Annahmen 44
5.1.5 Limitierungen 46

5.2 Sachbilanz 47
5.2.1 Umberto-Modell 47
5.2.2 Szenarien 49
5.2.3 Prozessparameter 50

5.3 Ergebnisse der Wirkungsabschätzung (LCIA) 52
5.3.1 Referenzsysteme 52
5.3.2 Basisszenarien Methanol (S1–S10) 53
5.3.3 Treibhauspotenzial (GWP_{100}) 57
5.3.4 Versauerungspotenzial (AP) 60
5.3.5 Eutrophierungspotenzial (EP) 61
5.3.6 Kumulierter Energieaufwand (KEA) 62
5.3.7 Stratosphärisches Ozonabbaupotenzial (ODP) 63
5.3.8 Feinstaubbelastung ($PM_{2.5}$) 64
5.3.9 Landnutzung (LU) 65
5.3.10 Wassernutzung (WU) 67

5.4 Interpretation und Evaluation 68
5.4.1 Signifikante Parameter 68
5.4.2 Sensitivitätsprüfung 69
5.4.3 Normierung 73

5.4.4 Vollständigkeit der LCA ... 78
5.4.5 End-of-Life-Emissionen ... 79
5.4.6 Allokationsmethode ... 80
5.4.7 Literaturvergleich ... 82
5.4.8 Schlussfolgerungen ... 85
5.4.9 Ausblick ... 88

6 Zusammenfassung ... 89

Literatur ... 91

Anhang ... VI

Abkürzungsverzeichnis ... VI

Abbildungsverzeichnis ... IX

Schemenverzeichnis ... XI

Tabellenverzeichnis ... XII

Technisches Verzeichnis ... XIV

Technologische Metrik der CCU-Prozesse ... XIV
Liste der verwendeten ecoinvent 3.4 Module ... XV

Normierung ... XVIII

LCIA Ergebnistabellen ... XX

Kurzfassung

Der hohe Verbrauch fossiler Rohstoffe führt zu immer weiter steigenden CO_2-Emissionen und einer sich stärker beschleunigenden Erderwärmung durch den anthropogenen Treibhauseffekt. Um Treibhausgasemissionen zu reduzieren und alternative Kohlenstoffquellen in der chemischen Industrie zugänglich zu machen, werden neue Lösungsansätze im Bereich der CO_2-Abscheidung und CO_2-Nutzung – auf Englisch als Carbon Capture and Utilization (CCU) bezeichnet – diskutiert.

In dieser Arbeit wird die Anwendung von CCU-Verfahren für die Produktion von Basischemikalien in der chemischen Industrie einer ökobilanziellen Betrachtung (engl.: Life Cycle Assessment, LCA) unterworfen.

Die LCA-Methode wird vorgestellt und wichtige methodische Herangehensweisen diskutiert. Chemische Prozesse zur Abscheidung von CO_2 aus der Umgebungsluft und aus Punktquellen, Elektrolysetechnologien zur Produktion von Wasserstoff sowie die Syntheseprozesse der Basischemikalien Methanol, Methan, Ethylen, Propylen und Benzol aus CO_2 und H_2 werden beschrieben.

Die Prozesse der (regenerativen) Stromerzeugung, CO_2-Abscheidung und Elektrolyse sowie die Synthese von CCU-Produkten werden in einem Modell zusammengeführt und die Produktion der fünf Basischemikalien über verschiedene Bereitstellungspfade modelliert. Mit Hilfe einer Ökobilanzierungs-Software werden die spezifischen Umweltwirkungen der einzelnen Produkte und die Beiträge der jeweiligen Prozesse zu den Umweltwirkungen in acht ausgewählten Wirkungskategorien errechnet.

Es erfolgt ein Vergleich der CCU-Produkte mit Produkten aus petrochemischen Verfahren und eine abschließende Auswertung der ermittelten Ergebnisse, aus der Schlussfolgerung für die Anwendung von CCU-Technologien gezogen werden. Damit wird eine ganzheitliche ökologische Bewertung von CCU-Verfahren und deren potenziellen Umweltwirkungen vorgenommen.

Abstract

The high consumption of fossil resources leads to growing CO_2 emissions and a fast global warming, caused by the anthropogenic greenhouse effect. To reduce greenhouse gas emissions and to access alternative carbon sources in the chemical industry, new approaches in the field of carbon capture and utilization (CCU) are discussed.

In this thesis, the application of CCU processes, to produce basic chemicals in the chemical industry, is subjected to the method of Life Cycle Assessment (LCA).

The LCA method is presented and important methodological approaches will be discussed. Chemical processes for capturing CO_2 from the air and concentrated point sources, water electrolysis for the production of hydrogen, as well as the synthesis of methanol, methane, ethylene, propylene, and benzene from CO_2 and H_2, will be described.

The processes for (renewable) electricity production, CO_2 capture, water electrolysis, and synthesis of CCU products, will be combined in a model and the production of five basic chemicals will be modelled via different pathways. Using a LCA-Software, the specific environmental impacts of the respective products will be calculated and the contribution of the single processes to the eight impact categories is determined.

Environmental impacts from CCU products will be compared to fossil-based reference products and an evaluation of the results will be used to generate conclusions and recommendations for the application of CCU technologies. Hence, a holistic ecological assessment of CCU processes, and their potential environmental impacts will be achieved.

1 Einleitung

1.1 Klimawandel und Treibhauseffekt

Spätestens als 2018 der Sonderbericht des IPCC zur globalen Erderwärmung um 1,5 °C gegenüber dem vorindustriellen Niveau und den daraus resultierenden Folgen veröffentlicht wurde, ist die Dringlichkeit des menschengemachten Klimawandels, seiner Konsequenzen und die damit einhergehende Notwendigkeit angemessen zu handeln in das Bewusstsein der Öffentlichkeit gerückt.[1] Umweltprotestbewegungen wie „Fridays For Future“ und „Extinction Rebellion“, aber auch Klimaforscherinnen und Ökonomen weltweit fordern Politik und Industrie zu entschlossenerem Vorgehen auf, um die Treibhausgasemissionen zu reduzieren und das vom IPCC geforderte 1,5°C-Ziel zu erreichen. Seit dem Beginn der Industrialisierung ist die Menge an CO_2 in der Atmosphäre kontinuierlich gestiegen, was hauptsächlich auf die Verbrennung fossiler Energieträger, aber z. B. auch auf die Herstellung von Zement aus carbonathaltigen Mineralien zurückzuführen ist. Die Konzentration an atmosphärischem CO_2 stieg seit 1850 von etwa 280 ppm auf über 410 ppm an und erreichte im Juni 2019 erstmals einen Spitzenwert von 415 ppm.[2] Aus den bereits erfolgten CO_2-Emissionen resultierte ein mittlerer globaler Temperaturanstieg von bereits 1,1 °C gegenüber dem vorindustriellen Niveau. Die geschätzte Menge an CO_2, die noch in die Atmosphäre gelangen darf, um das 1,5°C-Ziel mit einer Wahrscheinlichkeit von 50 % einzuhalten, wird auf ca. 400 Gt geschätzt, was bei einer globalen Emissionsrate von 40 Gt CO_2 pro Jahr einem CO_2-Budget von zehn Jahren gleichkommt. Die durch CO_2-Abscheidung erreichbare Reduktion von Treibhausgasen (THG) in der Atmosphäre wird dabei als mögliche Maßnahme zur Reduktion des anthropogenen Treibhauseffekts diskutiert, welcher maßgeblich die Erwärmung des globalen Klimas vorantreibt.

Der Treibhauseffekt kann vereinfacht wie folgt beschrieben werden (Abbildung 1): Der Hauptanteil der auf der Erde vorhandenen Energie wird durch die Sonne in Form von Lichteinstrahlung bereitgestellt. Die Atmosphäre absorbiert durch stratosphärisches Ozon einen Großteil zellschädigender UV-Strahlung, lässt jedoch sichtbares Licht im Wellenlängenbereich von 400–800 nm und

einen großen Teil der Infrarotstrahlung hindurch. Die Strahlung, welche die Erdoberfläche erreicht, wird anteilig reflektiert, absorbiert und reemittiert, wobei die Emission aufgrund der Oberflächentemperatur der Erde rotverschoben erfolgt und daher verstärkt im Infrarotbereich von 10 µm Wellenlänge liegt (*Wiensches* Verschiebungsgesetz). Die Infrarot- bzw. Wärmestrahlung wird auf ihrem Weg durch die Atmosphäre von CO_2 und anderen THG-Molekülen absorbiert, welche zur intramolekularen Schwingung angeregt werden. Da die durch Schwingungsrelaxation folgende Emission der Infrarotstrahlung ungerichtet erfolgt, wird ein Teil der zuvor absorbierten Strahlung zurück in Richtung Erdoberfläche abgestrahlt (Gegenstrahlung) und die Wärme so für längere Zeit in der Atmosphäre gehalten.

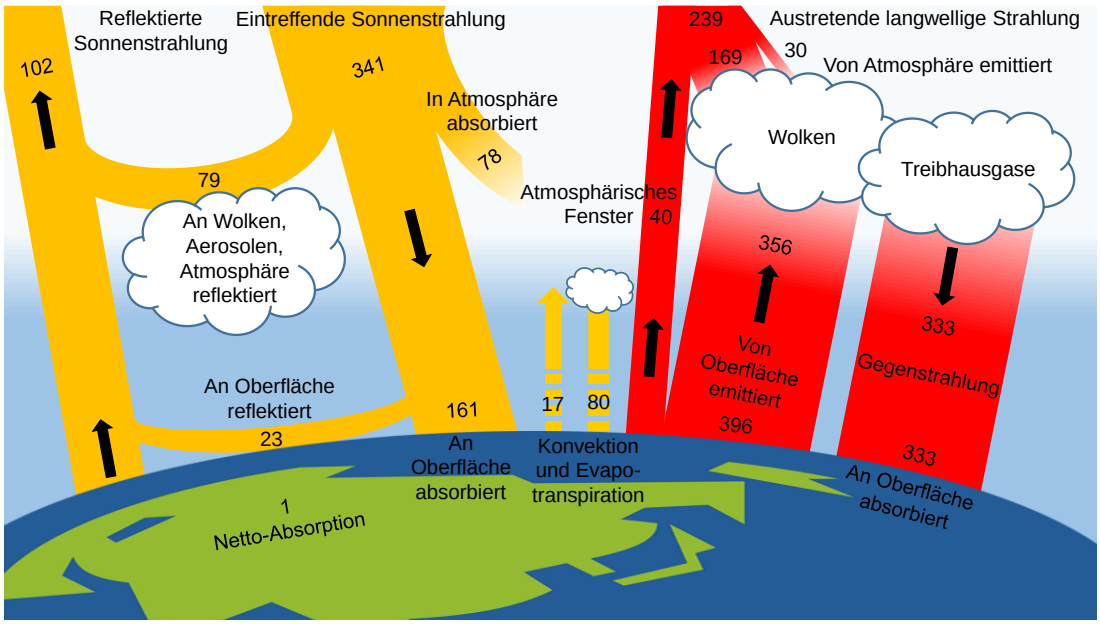


Abbildung 1: Strahlungsleistung in W m^{-2} auf der Erde und ihre Energieflüsse in den Jahren 2000–2004. Kurzwellige Strahlung (gelb) fällt ein und wird zum Teil reflektiert und absorbiert, langwellige Strahlung (rot) wird emittiert und ein Teil zurückgestrahlt. Die Strahlungsbilanz ist ausgeglichen.[3]

Mit einer höheren Konzentration treibhausaktiver Gase erhöht sich demnach auch die Intensität der in Richtung Erde emittierten Infrarotstrahlung, was zu einer Erwärmung der bodennahen Atmosphäre (Troposphäre) führt, während die Stratosphäre durch die abnehmende Strahlungsleistung abkühlt. Wird nun die Zufuhr der Treibhausgase oder sogar die Konzentration des atmosphärischen CO_2 reduziert, so könnte eine weitere Erwärmung der Atmosphäre und ein Anstieg der Temperaturen gemindert, vermieden oder gar rückgängig gemacht werden.

1.2 Kohlenstoffkreislauf und CO_2-Flüsse

Um die Auswirkungen der menschlichen Eingriffe in das Klimasystem zu verstehen, ist die Kenntnis der globalen Kohlenstoffvorkommen und der entsprechenden Flüsse von Bedeutung. Wird die Erde als geschlossenes System betrachtet, so ist die Kohlenstoffmenge mit etwa 75 Millionen Gt konstant. Die Erde kann wiederum in fünf Sphären unterteilt werden: Atmosphäre (Luft), Hydrosphäre (Wasser), Lithosphäre (festes Gestein), Biosphäre (Lebewesen) und Pedosphäre (Böden). Die Sphären speichern Kohlenstoff und zwischen ihnen finden natürliche und anthropogene Austauschprozesse statt (Abbildung 2). Ist der Zufluss zu einem Speicher größer als der Abfluss, so wird von einer Kohlenstoffsenke gesprochen, ist der Abfluss größer, so handelt es sich um eine Quelle. Da in der Atmosphäre mit 860 Gt Kohlenstoff (GtC) nur etwa 0,001 % des globalen Kohlenstoffs enthalten sind, reagiert dieses System besonders empfindlich auf Änderungen der Flüsse, weist allerdings auch die höchsten Flussraten durch Austausch mit der Biosphäre durch Photosynthese auf. Im globalen Kreislauf hat sich im Laufe der Zeit ein feines Gleichgewicht aus kurz- und langfristigen Kohlenstoffströmen eingestellt, wodurch die Menge an atmosphärischem CO_2 im letzten Jahrtausend bei etwa 280 ppm konstant blieb.[4] Seit dem Beginn der Industrialisierung und der damit verbundenen Verbrennung von fossilen Energieträgern ist der CO_2-Gehalt in der Atmosphäre jedoch stark gestiegen.

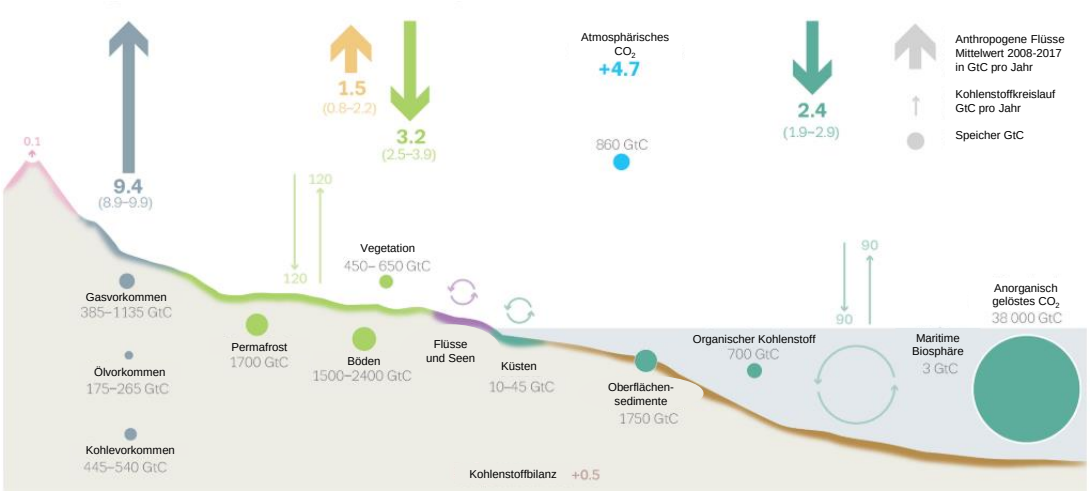


Abbildung 2: Globale Kohlenstoffvorkommen und -flüsse durch anthropogene Eingriffe in GtC pro Jahr. Emissionen duch fossile Brennstoffe (grau) und durch Landnutzungsänderung (orange), Aufnahme an Land (grün) und im Wasser (türkis). 1 GtC entspricht 3,664 Gt CO_2. Durchschnittswerte für die Jahre 2008–2017, Abbildung nach Le Quéré et al.[5]

Die Verbrennung fossiler Materialien entspricht einem Fluss von der Lithosphäre in die Atmosphäre und ist deshalb so bedeutend, weil die Lagerstätten von fossilen Brennstoffen durch Aufnahme von Kohlenstoff aus der Biosphäre über viele hundert Jahrmillionen hinweg entstanden sind und diese natürlicherweise dort verbleiben würden. Im Gegensatz zu diesen sehr langen, natürlichen Kreisläufen steht die Verbrennung fossiler Energieträger seit knapp 200 Jahren. Seit dem Beginn der Industrialisierung wurden ca. 635 GtC (das entspricht 2.327 Gt CO_2) aus fossilen Brennstoffen in die Atmosphäre freigesetzt, wovon etwa die Hälfte von Land- und Wassersystemen aufgenommen wurde.[6] Jährlich gelangen aktuell 9,4 GtC (34,4 Gt CO_2) aus fossilen Quellen in die Atmosphäre, die dort verbleibende Menge an Kohlenstoff beträgt 4,7 GtC (17,2 Gt CO_2) im Jahr. Daraus resultierte der Anstieg der atmosphärischen CO_2-Konzentration von 280 ppm auf 410 ppm innerhalb der letzten 150–200 Jahre. Die Aufnahme von CO_2 durch die Meere bewirkt außerdem einen sinkenden pH-Wert von oberflächennahem Ozeanwasser durch Bildung von Kohlensäure, was unter anderem zu schwerwiegenden Schäden für maritime Ökosysteme führt.[7]

Die Hauptkomponenten fossiler Brennstoffe und organischer Verbindungen sind die Elemente Kohlenstoff, Wasserstoff und Sauerstoff. Aus diesen drei Elementen sind wiederum unzählige Verbindungen möglich. Für eine technische Deutung relevanter Flüsse ist eine Beschränkung auf wesentliche Bestandteile sinnvoll. Da es sich bei den Kohlenstoffflüssen hauptsächlich um das klimarelevante Treibhausgas CO_2 handelt, welches aus Kohlenwasserstoffen durch Verbrennung mit Sauerstoff hervorgeht, lässt sich ein Schaubild mit den drei genannten Elementen und relevanten Verbindungen erstellen (Abbildung 3). Dieses CHO-Mischungsdreieck gibt die Elemente in ihrer Reinform an den Ecken wieder und zeigt weitere Komponenten entsprechend der molaren Zusammensetzung entlang verschiedener Achsen auf. Entlang der Achse H–O liegt Wasser, entlang der Achse C–O liegt CO_2, entlang der Achse C–H liegt C_nH_{2n+2} (z. B. Benzin und Wachs) stellvertretend für gesättigte Kohlenwasserstoffverbindungen. Werden beispielsweise H_2O und CO_2 kombiniert, so entstehen Punkte innerhalb des Dreiecks, welche die Verbrennungsprodukte der Kohlenwasserstoffe markieren. Die Verbindung zwischen zwei

Punkten kann als natürlicher oder technischer Prozess verstanden werden; der Weg von H_2O und CO_2 zu $C_n(H_2O)_n$ (Kohlenhydrate, bzw. Biomasse) entspricht z. B. der Photosynthese (grün). Der Weg der Biomasse zu Kohle entspricht der Verkohlung (schwarz), der Weg von Biomasse zurück zu H_2O und CO_2 ist die Verbrennung (rot) usw. Die natürlichen Prozesse, hauptsächlich die Photosynthese, laufen im Schaubild von rechts nach links ab, weg von Sauerstoff. Die Verbrennung dagegen von links nach rechts in Richtung Sauerstoff. Um den Prozessen eine technologische Dimension hinzuzufügen, können Doppelpfeile eingefügt werden (blau), die einen reversiblen Prozess beschreiben. Damit ist vor allem die Nutzung von CO_2 durch technische Prozesse, wie z. B. die Harnstoffsynthese gemeint, aber auch die Elektrolyse von Wasser zu Wasserstoff.

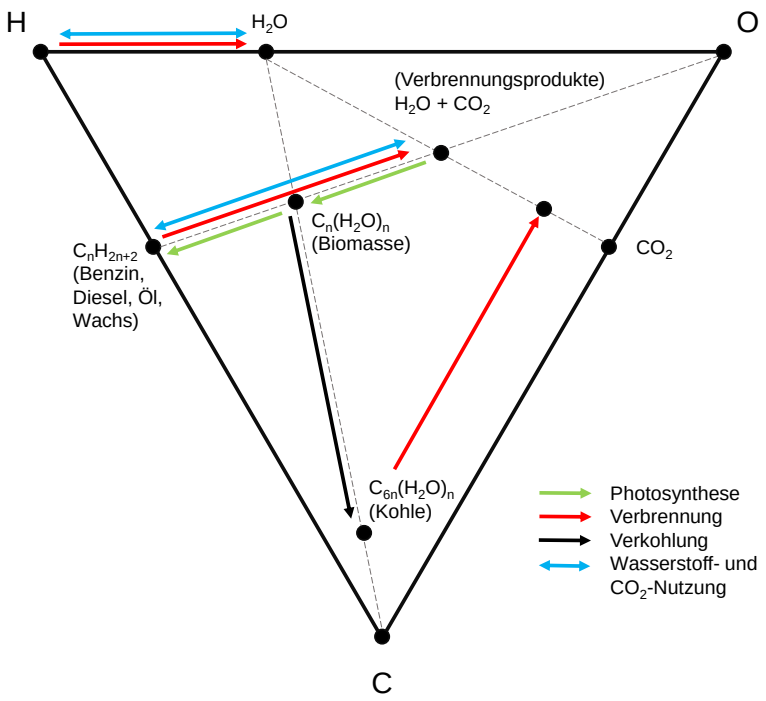


Abbildung 3: CHO-Mischungsdreieck mit verschiedenen, punktuellen Stoffzusammensetzungen. Verbrennungsprozesse (rote Pfeile) bewegen sich im Diagramm immer von der linken zur rechten Seite, natürliche Reduktionsprozesse wie die Photosynthese (grüne Pfeile) laufen von rechts nach links ab. Technologien, die Wasserstoff und CO_2 nutzen, bewegen sich in beide Richtungen (blaue Pfeile).[8]

Im Kontext des Kohlenstoffkreislaufs und des Flusses von Kohlenstoff aus fossilen Lagerstätten in die Atmosphäre bedeutet eine technische Nutzbarmachung von CO_2 einen zusätzlichen Abfluss von Kohlenstoff aus der Atmosphäre in das System der Technosphäre. Wohin der Kohlenstoff aus der Tech-

nosphäre wandert, ist maßgeblich durch die Technologie bestimmt, die angewendet wird. Beispielsweise kann der Kohlenstoff in Lagerstätten innerhalb der Lithosphäre gespeichert oder zu einem Produkt, welches in der Technosphäre verbleibt, umgewandelt werden.

1.3 Carbon Capture and Utilization (CCU)

Maßnahmen zur Entfernung von CO_2 aus der Atmosphäre werden im Allgemeinen als Carbon Dioxide Removal (CDR) bezeichnet. Die einfachste Form, wie sie in der Natur zu finden ist, ist die Photosynthese, welche CO_2 und Wasser zu Kohlenhydraten umwandelt und damit einen großen Teil des aus der Atmosphäre entnommenen CO_2 in Biomasse speichert. Bei der Betrachtung technischer Prozesse wird entweder von Carbon Capture and Storage (CCS), bei dem das CO_2 z. B. durch Sedimentation gespeichert wird oder von Carbon Capture and Utilization (CCU), bei dem das CO_2 als Rohstoff weiterverwendet werden soll, gesprochen. CCS dient dabei als die Technologie, welche CO_2 dauerhaft aus der Atmosphäre entfernen soll, um die im Pariser Klimaabkommen genannten Klimaziele einhalten zu können. CCU hingegen hat das Potenzial, die Rohstoffbasis weg von fossilen Energieträgern und hin zu alternativen Rohstoffen wie atmosphärischem CO_2 zu verschieben. Dadurch kann letztendlich der Kreislauf des verwendeten Kohlenstoffs geschlossen, jedoch keine Reduktion des Kohlenstoffgehalts in der Atmosphäre herbeigeführt werden. Da in der Literatur viele unterschiedlich und unklar genutzte Begriffe für die Verwendung von CO_2 vorkommen, wird CCU als technologischer Prozess hier wie folgt definiert:

CCU besteht aus zwei Schritten, wobei im ersten Schritt CO_2 durch ein *technisches Verfahren* in konzentrierter Form gewonnen und im zweiten Schritt zu einem *funktionellen Produkt* umgewandelt wird.[9,10]

Das CO_2 lässt sich dabei je nach Ursprung einer von drei Kategorien zuordnen: Fossiles CO_2 stammt aus der Verbrennung von Erdöl, Erdgas und Kohle, mineralisches CO_2 aus carbonathaltigen Mineralien wie Kalkstein, wobei beide Quellen über geologisch lange Zeiträume mit Kohlenstoff angereichert

wurden. Biogenes CO_2 ist solches, das sich natürlicherweise in der Erdatmosphäre befindet, sich durch Zersetzungs- und Verbrennungsprozesse aus Biomasse bildet, bzw. in kurzen Zeiträumen in Biomasse gebunden und aus dieser freigesetzt wird. Die Unterscheidung wird vor allem dann wichtig, wenn es um die CO_2-Bilanz eines technischen Prozesses oder Produkts geht, denn eine Netto-CO_2-Reduktion kann nur dann vorliegen, wenn atmosphärisches CO_2 durch CCS dauerhaft aus der Atmosphäre entfernt wird. Alle anderen Prozesse müssen eine bilanzielle Emission aufweisen, da CO_2 im Zweifel nur in einem Produkt zwischengespeichert und nicht dauerhaft aus der Atmosphäre entfernt wird. Allerdings kann auch temporär gespeichertes CO_2 eine mindernde Wirkung auf den Treibhauseffekt haben und sollte daher, je nach Zeithorizont, nicht unberücksichtigt bleiben.

CO_2 kann aus konzentrierten Punktquellen wie Müllverbrennungsanlagen (MVA) mit und ohne Oxyfuel Verfahren (ca. 89 % und 15 % CO_2 im Abgas), Zementwerken (14–33 % CO_2 im Abgas), (Heiz)kraftwerken (12–15 % CO_2 im Abgas) oder Biogasanlagen (25–55 % CO_2 im Rohbiogas) gewonnen werden, aber auch aus der atmosphärischen Umgebungsluft, was als Direct Air Capture (DAC) bezeichnet wird.[11] Im Allgemeinen ist der Energieaufwand für DAC deutlich höher als bei der Gewinnung aus Punktquellen, da CO_2 mit einer Konzentration von 410 ppm (0,041 Vol.-%) in der Luft nur sehr verdünnt vorliegt und mehr Energie aufgewendet werden muss, um CO_2 in konzentrierter Form zu gewinnen.

Mit dem Ziel, die globalen THG Emissionen bis 2050 auf Netto-Null zu senken, ist damit zu rechnen, dass viele der genannten Punktquellen in Zukunft nicht mehr zur Verfügung stehen werden. Im Zuge einer zu defossilisierenden Industrie ist die Entwicklung von DAC somit eine notwendige Voraussetzung, um auch weiterhin CO_2 als alternativen Rohstoff beziehen zu können. Für einige Industrien werden allerdings auch unvermeidbare CO_2-Emissionen angenommen, so z. B. in der Zementindustrie aus dem Brennen von Kalkstein, da in Zukunft höchstwahrscheinlich noch Zement und Beton als Baustoffe benötigt werden. Für diese punktuell CO_2-emittierenden Prozesse müssten zukünftig CCS-Technologien bereitstehen, um THG neutral zu wirtschaften.

Die Frage welche CCU-Technologie in welcher Form zur Anwendung gelangen wird, lässt sich nicht einfach beantworten. Maßgebliche Faktoren werden vor allem die Verfügbarkeit von billigem, erneuerbarem Strom sein, die Bereitstellung von CO_2 in großem Maßstab, die Kombination verschiedener Technologien und Standorte, politische und wirtschaftliche Rahmenbedingungen und nicht zuletzt die Umweltverträglichkeit und gesellschaftliche Akzeptanz der CCU-Technik. Dies erfordert einen enormen koordinativen Aufwand und kann letztendlich nur durch Kooperation einzelner Akteure und Nutzung von Synergien effektiv realisiert werden.

Die Notwendigkeit von CDR im Allgemeinen wird auch vom IPCC betont, da in jedem der im IPCC-Bericht genannten Szenarien CDR- bzw. CCS-/CCU-Maßnahmen angenommen werden, um die Netto-Null-Emission zu erreichen. Es wurde hingegen bereits gezeigt, dass das CO_2-Minderungspotenzial durch massive Aufforstung deutlich höher und wesentlich günstiger ausfallen kann als bei allen bisher bekannten Abscheidungstechnologien.[12] Der Einsatz von CCS/CCU hängt im Wesentlichen davon ab, wie die weiteren THG-Minderungsstrategien aussehen und sollte als die zuletzt in Betracht kommende Option verstanden werden, anstatt weitere Strategien zu ersetzen. Bei mangelnder Umsetzung hätten diese Technologien eine große Zahl an Zielkonflikten zur Folge und sollten unter Beachtung weiterer Ziele nachhaltiger Entwicklung, wie Bedürfnisse der Bevölkerung, Biodiversität und anderer Kategorien durchgeführt werden.[1]

1.4 Erneuerbare Energien

CCS- und CCU-Technologien sind in der Regel mit einem hohen Energieaufwand verbunden, weshalb die Bereitstellung von Energie eine der grundlegenden Voraussetzungen für die Anwendung dieser Technologien darstellt. Der weltweite Primärenergiebedarf hat sich innerhalb der letzten 45 Jahre mehr als verdoppelt.[13] 1973 betrug die weltweite Gesamtenergieversorgung 6.115 Mt Rohöl-Äquivalente (RÖE; 256 EJ, 1 EJ = 10^{18} J), im Jahr 2016 waren es bereits 13.761 Mt RÖE (571 EJ). Davon leisteten erneuerbare Energien mit 13,9 % jedoch nur einen sehr geringen Beitrag, der größte Teil kam weiterhin

aus den fossilen Quellen Öl, Kohle und Gas mit insgesamt 81,1 % (Abbildung 4). Erneuerbare Energien spielen in der Zukunft eine entscheidende Rolle für eine nachhaltige Energieversorgung, besonders im Sinne der Umweltverträglichkeit, jedoch auch im Hinblick auf gesundheitliche Aspekte und Risikokriterien.[14] Bezogen auf die Umweltverträglichkeit bedeutet dies, dass die erneuerbare Energiegewinnung keine direkten Emissionen verursacht, im Gegensatz z. B. zur Verbrennung von Kohle, und deshalb als klimaneutral gilt. Verbleibende Umweltwirkungen erneuerbarer Energiesysteme entstehen hauptsächlich durch Herstellung, Transport und Errichtung der Energieerzeugungsanlagen, die in der Regel bisher nicht auf erneuerbaren Prozessen beruhen.

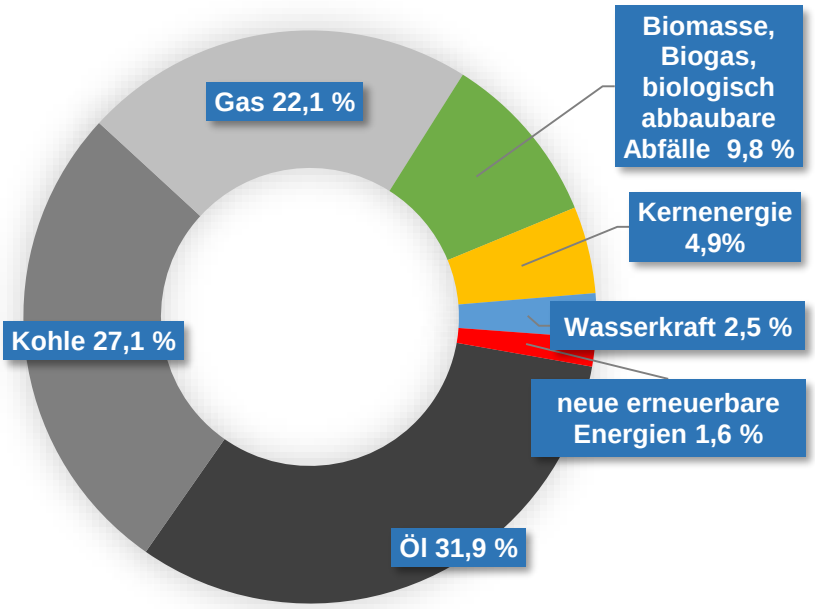


Abbildung 4: Globale Primärenergieversorgung nach Energieträgern im Jahr 2016. Zu den neuen erneuerbare Energien zählen Geothermie, Solarenergie, Windenergie und Meeresenergie.[15]

Auf die Lebensdauer der Energiesysteme gerechnet ergeben sich so Emissionswerte in CO_2-Äquivalenten pro kWh erzeugtem Strom von etwa 9 g für Windenergie, 12 g für Wasserkraftwerke, 29 g bei Photovoltaikanlagen, 34 g bei Geothermiekraftwerken, wohingegen Gaskraftwerke Emissionen von 350–400 g und Steinkohlekraftwerke 750–1050 g CO_2-Äquivalente pro kWh aufweisen.[16] Ein Kohlekraftwerk hat also ein bis zu 100-mal höheres Treibhauspotenzial als ein Windrad, das die gleiche Energiemenge erzeugt. Eine zentrale Bedeutung erlangen erneuerbaren Energiesysteme, wenn fossil basierte

Prozesse durch emissionsarme Prozesse ersetzt werden sollen, wie bei den energieaufwändigen CCS- und CCU-Prozessen. Im deutschen Strommix lag der Anteil erneuerbarer Energien im Jahr 2017 bei 33 %, der Emissionsfaktor betrug 474 g CO_2 kWh^{-1}.[17] Je höher der Anteil an erneuerbaren Energien, desto geringer fällt der Emissionsfaktor aus. Ein CCU-/CCS-Prozess, welcher erneuerbare Energie nutzt und CO_2 aus der Atmosphäre aufnimmt, kann daher in der Gesamtbilanz möglicherweise negative Emissionen, also eine Netto-CO_2-Aufnahme aufweisen. Für eine großflächige klimafreundliche Anwendung solcher Technologien ist der Ausbau erneuerbarer Energien daher von zentraler Bedeutung.

1.5 Produktion von Basischemikalien

Chemische Produkte aus CCU, hergestellt mit Strom aus erneuerbaren Quellen, könnten als Ersatz für Produkte aus fossilen Lagerstätten dienen. Die Basischemie ist Ausgangspunkt vieler chemischen Erzeugnisse und ermöglicht die Produktion einer Vielzahl an Kunststoffen, Materialien und Chemikalien aus relativ wenigen Grundstoffen. Nicht nur die Energieerzeugung, sondern auch die organische Basischemie beruht auf dem Einsatz fossiler Grundstoffe, hauptsächlich Erdöl. Der Anteil des für die Industrie genutzten Erdöls ist mit 10 % am Gesamtverbrauch relativ gering, weltweit werden daraus jedoch über 125 Mt Ethylen, 80 Mt Propylen, 55 Mt Ethanol, 40 Mt Benzol und viele weitere Grundchemikalien hergestellt (Stand 2010).[18] Einen Überblick über die Produktionsmengen einiger weiterer organischer und anorganischer Chemikalien gibt Tabelle 1. Viele Stoffe tragen durch ihre chemischen Eigenschaften bereits gesundheitliche und umwelttechnische Risiken mit sich. Die enorme Menge an fossilem Kohlenstoff, die durch die Erzeugung und Nutzung von organischen Chemikalien in die Umwelt gelangt, stellt daher neben der fossilen Energiegewinnung ein weiteres Problem dar. Spätestens jedoch, wenn Kunststoffe am Ende ihres Lebenszyklus in Müllverbrennungsanlagen thermisch verwertet werden, gelangt der gespeicherte Kohlenstoff als CO_2 in die Atmosphäre. Im Sinne einer Kreislaufwirtschaft, auch „Cradle-to-Cradle“ (C2C) genannt, ist die Nutzung von CO_2 als Rohstoff eine der grundlegenden

Herausforderungen der chemischen Industrie. In diesem Sinne wird ein vollständiges Recycling von chemischen Produkten angestrebt, um unabhängig von fossilen Rohstoffen und Energieträgern zu sein, aber auch um die CO_2-Emissionen des Sektors zu mindern. Die Nutzung von CO_2 durch CCU erfordert eine große Kenntnis der notwendigen Prozesse und Reaktionen. Die Bereitstellung sauberer, emissionsfreier Energien sowie die Konzipierung geeigneter Reaktoren und die Kombination bereits vorhandener Technologien zur Schaffung von Synergieeffekten stellen dabei die grundlegenden Herausforderungen an die chemische Industrie.

Tabelle 1: Produktionsmengen einiger ausgewählter organischer und anorganischer Basischemikalien in der Bundesrepublik Deutschland im Jahr 2017.[19]

Organische Grundstoffe	**Masse (Mt)**	**Anorganische Grundstoffe**	**Masse (Mt)**
Ethylen	5,200	Chlor	4,052
Propylen	4,150	Wasserstoff	0,407
Buten/Butadien	2,282	Sauerstoff	9,660
Methanol	1,047	Salzsäure	1,879
Benzol	1,799	Schwefelsäure	3,564
Toluol	0,597	Natriumhydroxid	3,406

2 Motivation und Zielsetzung

In Anbetracht des immer weiter steigenden CO_2-Gehalts in der Atmosphäre, des voranschreitenden Klimawandels und des enorm wachsenden Energiebedarfs der Weltbevölkerung steht auch die chemische Industrie vor großen Herausforderungen. Die Produktion von Chemikalien auf Basis fossiler Rohstoffe muss durch ökologischere Alternativen abgelöst werden, wenn das selbsterklärte Ziel der chemischen Industrie, Treibhausgasneutralität zu erreichen, bis 2050 verwirklicht werden soll.[20] Ein wichtiger Schritt dazu wäre die Nutzung von CO_2 als Grundstoff für die Produktion von Basischemikalien.

Aktuell werden viele Ansätze im Bereich von CCS und CCU diskutiert; allerdings ist es möglich und zu erwarten, dass mit dem Einsatz neuer Technologien weitere Umweltrisiken und ökologische Zielkonflikte entstehen werden. Die Fokussierung der Debatte um den Umweltschutz auf CO_2 und den Treibhauseffekt lässt diese Umweltwirkungen meist außer Acht. Eine aussagekräftige ökologische Bewertung berücksichtigt viele verschiedene Indikatoren, die nur zusammen ein umfassendes Bild liefern. Damit sinkt das Risiko, dass einseitige und wenig umsichtige Entscheidungen in der Entwicklung neuer Technologien im Bereich CCU getroffen werden.

Ziel dieser Arbeit ist es, durch eine ökobilanzielle Betrachtung (Life Cycle Assessment) potenzielle Umweltwirkungen der aktuell diskutierten CCU-Technologien im Bereich der chemischen Basisindustrie zu identifizieren und kritisch zu evaluieren. Die Methode des Life Cycle Assessments wird vorgestellt (Kapitel 3) und die für CCU zugrundeliegenden chemischen Prozesse und Verfahren diskutiert (Kapitel 4). Untersucht wird die Produktion von fünf Basischemikalien (Methanol, Methan, Ethylen, Propylen und Benzol) aus erneuerbaren Rohstoffquellen. Dazu wird die Gewinnung von CO_2 aus der Luft und aus Punktquellen (Kapitel 4.1) sowie die Produktion von Wasserstoff durch Elektrolyse betrachtet (Kapitel 4.2). Die Synthese der erneuerbaren Basischemikalien wird auf Grundlage etablierter Verfahren und Prozessdaten modelliert (Kapitel 5) und die Ergebnisse des Life Cycle Impact Assessments in acht Umweltwirkungskategorien ausgewertet (Kapitel 5.3 und 5.4).

3 Life Cycle Assessment (LCA)

Das „Life Cycle Assessment“ (LCA), zu Deutsch „Lebenszyklusanalyse“ bzw. im deutschen Sprachgebrauch als Ökobilanz oder Produkt-Ökobilanz bezeichnet, ist eine Methode zur Abschätzung der Umweltwirkungen von Produkten. Dabei geht es um die potenziellen produktbezogenen Umweltwirkungen, die im Verlauf des Lebenswegs eines Produkts entstehen können, welcher von der Rohstoffgewinnung, über die Produktion, Verteilung und Anwendung bis hin zur Entsorgung reicht.[21] Betrachtet werden dabei alle relevanten Stoff- und Energieströme, die während des gesamten Lebenswegs des Produkts auftreten und mit spezifischen Wirkungen verbunden sind. Sinn und Zweck der LCA ist die Identifikation von Umweltwirkungen zur Quantifizierung schädlicher Emissionen, die Verbesserung einzelner Verfahrensschritte aus umwelttechnischer Sicht, das Informieren von z. B. politischen Entscheidungsträgern für die Erarbeitung neuer Richtlinien oder auch die Verwendung für Werbezwecke umweltfreundlicher Produkte. Die Methode der LCA, auf welche im Folgenden genauer eingegangen wird, ist durch die ISO EN Normen 14040 und 14044 geregelt und durch weitere Richtlinien und Handreichungen spezifiziert.[21-24]

3.1 LCA-Methode

Eine LCA im Sinne der ISO EN 14044 muss einigen generellen Anforderungen gerecht werden und wird in insgesamt vier Arbeitsschritte unterteilt (Abbildung 5). Im ersten Schritt wird das Ziel und der Untersuchungsrahmen der LCA festgelegt, im zweiten Schritt die Sachbilanz erstellt, im dritten Schritt aus der Sachbilanz eine Wirkungsabschätzung vorgenommen und zuletzt alle drei Schritte ausgewertet, interpretiert und kritisch evaluiert. Die einzelnen Schritte sind wechselseitig miteinander verbunden und können im Laufe der LCA wiederholt und verfeinert werden – falls beispielweise auffällt, dass die Fragestellung nicht genau genug ausgearbeitet wurde oder Probleme in der Datenerhebung auftreten. Das Verfahren ist demnach iterativ und ermöglicht eine flexible Herangehensweise an eine statische Problemstellung.

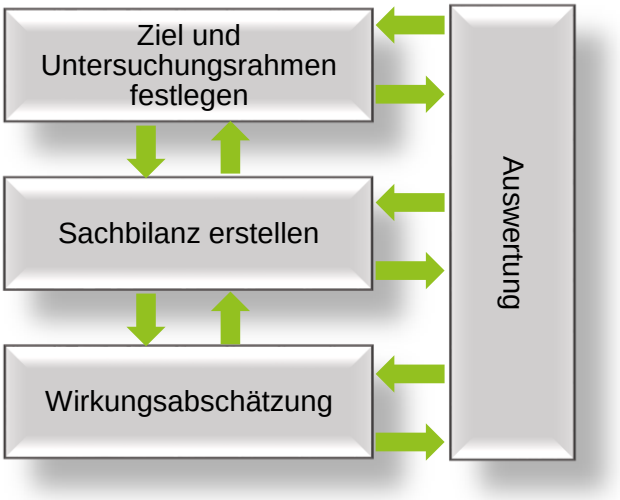


Abbildung 5: Struktur einer Ökobilanz nach ISO EN 14044.[25]

Zwischen einzelnen LCAs kann es wiederum zu großen Unterschieden in den angewendeten Methoden kommen, sodass es vor allem wichtig ist, eine klare Fragestellung zu definieren. Die Wahl der Methoden steht dabei genauso im Fokus wie auch die Frage nach den Systemgrenzen und der funktionellen Einheit. Die einzelnen Schritte der LCA und wichtige Begriffe werden im Folgenden beschrieben.

3.2 Ziel und Untersuchungsrahmen

Zunächst muss ein Ziel definiert und ein Untersuchungsrahmen festgelegt werden. Zentrale Fragestellungen umfassen das Untersuchungsobjekt und den Anwendungsbereich (z. B. die Produktion einer Chemikalie für einen Kunststoff), den Grund der Untersuchung, die Zielgruppe, an welche sich die LCA richtet und ob diese veröffentlicht werden soll. Ist das Ziel festgelegt, werden das Produktsystem, die Systemgrenze und die funktionelle Einheit (FE) definiert. Das Produktsystem enthält alle Prozesse, die zur Herstellung des Produkts benötigt werden. Die Prozesse werden in der LCA auch als Module bezeichnet und sind in sich geschlossene Einheiten mit definierten In- und Outputs. Innerhalb der Systemgrenze befinden sich alle Module sowie die Energie- und Stoffströme der Technosphäre. Das System erhält Inputs aus der Ökosphäre, welche genutzt und verarbeitet werden und erzeugt Outputs in Form von Emissionen und nutzbaren Produkten (Abbildung 6). Die funktionelle Einheit ist eine quantifizierte Größe des Produkts, die als Referenzeinheit

in der LCA genutzt wird. Wie der Name bereits impliziert, muss die FE mit der Funktion des Produkts verknüpft sein, beziehungsweise eine sinnvolle Maßeinheit zugeordnet bekommen. Beispielsweise ist eine sinnvolle funktionelle Einheit für Wasserstoff in Brennstoffzellen der Heizwert (z. B. 100 MJ) und für die Ammoniaksynthese die Masse (100 kg). Die Größe der FE kann frei gewählt werden, sollte jedoch einen realistischen Bezug aufweisen, z. B. eine Produktionsmenge darstellen. Alle quantitativen Ergebnisse der LCA werden auf die FE bezogen.

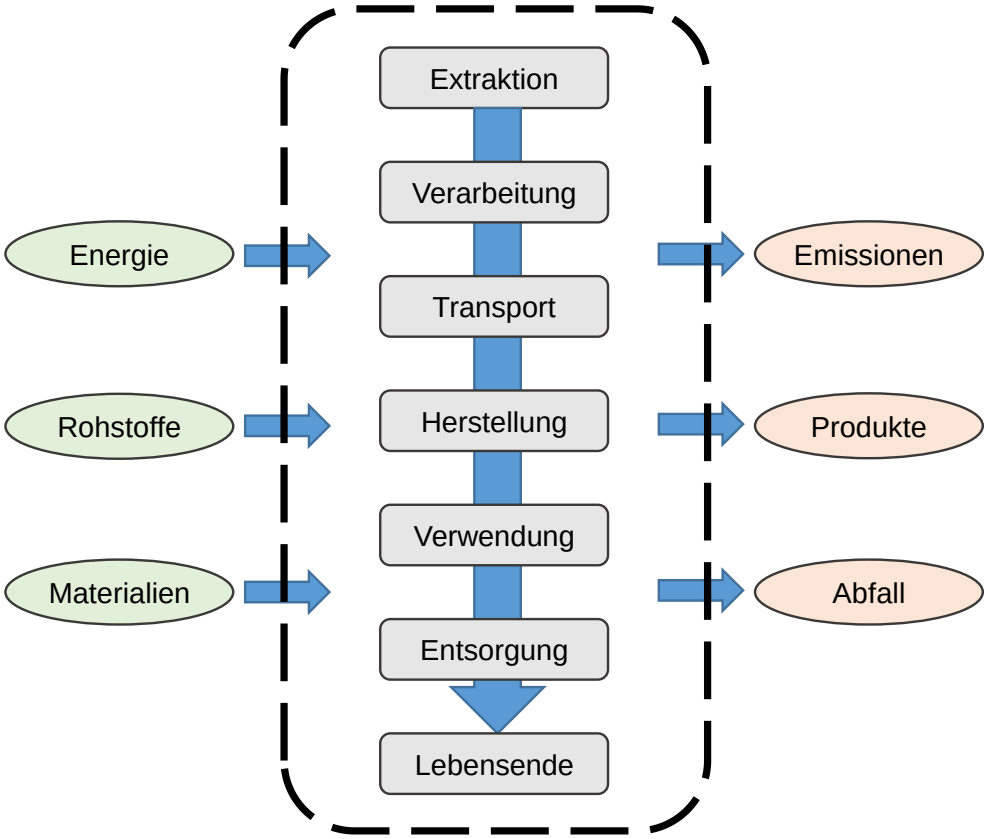


Abbildung 6: Allgemeiner Lebensweg eines Produkts von der Rohstoffgewinnung bis zum Lebensende (Cradle-to-Grave). Das Produktsystem besteht aus einzelnen Modulen innerhalb der Systemgrenze. Energie- und Stoffströme betreten und verlassen das System für jedes einzelne Modul.[25]

Ist das System definiert, so werden im Anschluss methodische Entscheidungen getroffen. Wirkungskategorien werden ausgewählt, benötigte Daten ermittelt, die Art der Datenerhebung festgelegt und die Güte der Daten erwogen. Dies beeinflusst die Interpretation der Ergebnisse und den Umfang der Wirkungsabschätzung im letzten Schritt der LCA. Je nach Qualität der vorhandenen Daten müssen diese Punkte neu definiert, weitere Daten erhoben oder

Ergebnisse kritisch begutachtet werden. Gleichzeitig wird auch festgelegt, wie Material- und Energieaufwendungen sowie Emissionen den einzelnen Produkten zugeordnet werden, sollte es mehrere geben. Allgemein wird dieser Vorgang als Allokation bezeichnet. Entsteht beispielsweise bei der Produktion von Wasserstoff durch Elektrolyse noch Sauerstoff als Produkt, so können die Umweltlasten der LCA auf verschiedene Weisen den beiden Produkten zugeordnet werden. Um Allokationen zu vermeiden, können Systemraumerweiterungen vollzogen werden, bei der die FE um das Produkt Sauerstoff erweitert und eine Gesamtlast berechnet wird. Bei beiden Vorgehensweisen müssen gewisse Abwägungen vorangestellt werden, da die Methode auch hier das Ergebnis maßgeblich beeinflusst. Schließlich werden noch Aussagen zur Limitierung der LCA und eventuellen Annahmen getroffen sowie ggf. ein Referenzsystem definiert, mit dem das Produkt verglichen werden kann; beispielsweise die Erzeugung von Wasserstoff aus Dampfreformierung gegenüber der Wasserelektrolyse. Diese Ergebnisse können miteinander verglichen und somit Aussagen über die spezifischen Umweltwirkungen getroffen werden.

3.3 Sachbilanz

Der zweite Schritt der LCA sieht die Bilanzierung aller Stoff- und Energieströme des gewählten Produktsystems vor. Für jedes Modul werden die Inputs und Outputs ermittelt und quantifiziert (vgl. Abbildung 6). Dabei gelten die Grundgesetze von Massenerhalt und Energieerhalt, bzw. Masse/Energie-Äquivalenz, Stöchiometrie und Entropieerhöhung. Im Model werden alle Prozessmodule und prozessrelevanten Größen miteinander verknüpft und erlauben so die Berechnung aller Stoff- und Energieflüsse. Die Verknüpfung erfolgt meist linear, kann jedoch auch Schleifen in Form von Recycling oder Wärmeintegrationen enthalten. Berechnet werden die Sachbilanzen durch geeignete Bilanzierungs-Software, z. B. mit Umberto® oder openLCA. Da in der Sachbilanz innerhalb eines Prozesses mehrere Produkte entstehen können, stellt sich die generelle Frage nach der Aufteilung von Umweltlasten, also der Allokation. Die Aufteilung kann nach verschiedenen Kriterien erfolgen, beispielsweise nach physikalischen Größen (Masse, Volumen, Energiegehalt) o-

der nach ökonomischem Wert. Wie die Aufteilung erfolgt, beeinflusst maßgeblich die Bewertung des Produktes in der LCA und sollte daher kritisch diskutiert werden. Die ISO-Norm empfiehlt, Allokationen zu vermeiden und Systemraumerweiterungen vorzuziehen, was letztendlich im Kontext der LCA entschieden werden muss. Wie die Sachbilanz ausfällt, hängt stark von den verfügbaren Daten und ihrer Qualität ab. Grundsätzlich besteht die Möglichkeit Primärdaten zu erheben und in der Bilanzierung zu verwenden, allerdings ist dies arbeits- und zeitaufwendig. Die Nutzung von Literaturdaten stellt die LCA potenziell vor Konsistenzprobleme, da Daten aus unterschiedlichen Quellen unter verschiedenen Annahmen erhoben werden können. Meist werden Moduldatensätze aus Datenbanken wie der GaBi-Database[26] oder ecoinvent[27] genutzt, die eine große Anzahl aktueller und konsistenter Datensätze bereitstellen, welche speziell für LCAs angelegt wurden. Sind alle Daten vorhanden und eine Sachbilanz erstellt worden, so können die Ergebnisse ausgewertet werden.

3.4 Wirkungsabschätzung (LCIA)

Die zusammenfassende Auswertung der Sachbilanzergebnisse wird im Kontext der LCA auch Wirkungsabschätzung oder Life Cycle Impact Assessment (LCIA) genannt. Aus ihr werden die potenziellen Umweltwirkungen abgeleitet und quantifiziert. Die Wirkungsabschätzung ordnet den in der Sachbilanz entstandenen Emissionen und Rohstoffentnahmen aus der Umwelt entsprechende Wirkungskategorien zu. Die Zuordnung ist wiederum auf stoffimmanente Eigenschaften gegründet, z. B. die Fähigkeit von CO_2-Molekülen IR-Strahlung zu absorbieren, was der Wirkungskategorie Treibhauspotenzial zugeordnet wird. Es findet somit eine Auswertung der Sachbilanz basierend auf naturwissenschaftlichen Zusammenhängen und Kategorisierungen statt. Das generelle Vorgehen beinhaltet zuerst die Auswahl von Wirkungskategorien und Charakterisierungsmodellen, anschließend erfolgt die Klassifizierung der Sachbilanzergebnisse und zuletzt die Charakterisierung, also die Berechnung der Wirkungsindikatorwerte. Diese können optional normiert, geordnet und gewichtet werden.

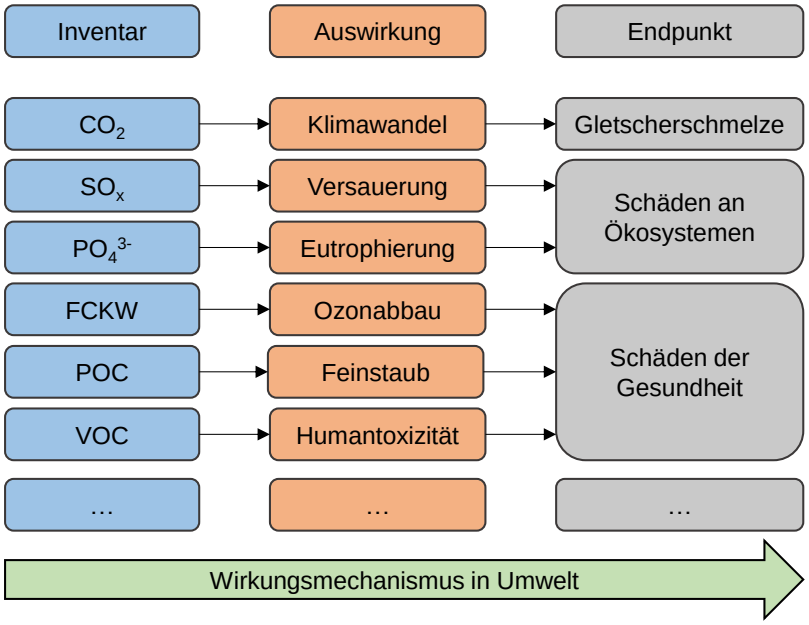


Abbildung 7: LCIA beginnend aus den Emissionen der Sachbilanz (Inventar), einfache Zuordnung zu einer Wirkungskategorie (Auswirkung) und mögliche Bedeutung für Mensch und Umwelt (Endpunkt). FCKW = Fluor-Chlor-Kohlenwasserstoffe, POC = Particulate Organic Compound, VOC = Volatile Organic Compound.[25]

Die Klassifizierung von Emissionen durch Zuordnung zu einer Wirkungskategorie ist beispielhaft in Abbildung 7 gezeigt. Natürlich tragen meist viele verschiedene Stoffe zu einer Wirkungskategorie bei, sodass diese oft zusammengefasst und mit Charakterisierungsfaktoren gewichtet werden (z. B. ist Methan 28-mal wirksamer als CO_2 beim Treibhauseffekt innerhalb eines Zeithorizonts von 100 Jahren).[28] Auch hier gibt es eine Auswahl an Methoden, um die betrachteten Wirkungskategorien zu analysieren und auszuwerten. Diese werden dann als Endergebnisse dargestellt und diskutiert; die Darstellung kann in Diagrammen erfolgen und liefert Zahlenwerte in der Form XY kg CO_2-Äquivalente (CO_2-eq.). pro FE. Die Ergebnisse der LCIA werden schließlich mit Referenz- oder Literaturwerten verglichen, um entsprechende Aussagen über die relative Umweltverträglichkeit machen zu können. Die Bewertung sollte dabei niemals aufgrund einer einzigen Wirkungskategorie erfolgen, sondern auch alle anderen ausgewählten Kategorien berücksichtigen, sodass oft eine begründete Ordnung und Gewichtung nötig ist. Die Bewertung der Umweltwirkung am Endpunkt findet selten statt, da die Datenlage oft nicht ausreichend ist und durch vielfältige Wechselwirkungen große Unsicherheiten in der Berechnung der Endpunkt-Wirkungen bestehen.

3.5 Auswertung – Interpretation und Evaluation

Sind die drei Hauptphasen der LCA abgeschlossen, findet eine abschließende Auswertung der Daten im Sinne einer Interpretation und Evaluierung statt. In Bezug auf die ursprüngliche Problemfrage wird zunächst klargestellt, ob schwerwiegende Umweltschäden oder -wirkungen zu erwarten sind. Umweltprobleme können dabei auf allen drei Ebenen der LCA identifiziert werden. Die Evaluierung der LCA sieht vor, dass die Studie zunächst auf Vollständigkeit geprüft wird und alle benötigten Daten vorhanden sind sowie die im Ziel definierten Fragen geklärt wurden. Eine Sensitivitätsanalyse kann Aufschluss über Empfindlichkeiten der Ergebnisse in Bezug auf einzelne Annahmen liefern. Die LCA sollte generell auf Konsistenz geprüft werden, also z. B. die Einhaltung gewisser Allokationsregeln oder die Zuordnung der Emissionen zu den Wirkungskategorien. Sind dabei Mängel zu finden, so muss die LCA verfeinert und auf Basis einer besseren Datenlage oder konsistenter Methoden erneut durchgeführt werden. Das iterative Vorgehen sichert die Qualität der LCA. Sind alle Fragestellungen geklärt und die Evaluierung der LCA positiv ausgefallen, so werden Schlüsse aus den Ergebnissen gezogen, auf Limitierungen aufmerksam gemacht und Empfehlungen formuliert. Diese Interpretation der LCA sieht vor, dass alle Ergebnisse in ihrem Gesamtkontext kritisch diskutiert werden.

Aus der Beurteilung der Ergebnisse wird ein Bericht generiert, der die gesamte LCA abbildet. Dort werden alle Schritte der LCA genau rekapituliert, Annahmen erläutert, die verwendeten Daten dokumentiert, methodische Entscheidungen begründet und Ergebnisse präsentiert. Diese Studien werden oftmals veröffentlicht, für betriebliche Optimierungen genutzt oder führen zu politisch relevanten Entscheidungen.

Die Bewertung von potenziellen Umweltschäden durch eine LCA lässt sich nicht nur auf bereits bestehende Prozesse anwenden, sondern kann auch im Sinne einer präventiven Prognose zukünftige Technologien beurteilen. Dies wird im Folgenden am Beispiel von CCU-Technologien zur Produktion von Basischemikalien für die chemische Industrie gezeigt.

4 Chemische Prozesse und Modelle

In diesem Kapitel werden die chemischen Prozesse zur Herstellung der industriell wichtigsten Basischemikalien genauer betrachtet. Da es eine Vielzahl an Unternehmen und Verfahren gibt, die sich oft nur in kleinen Teilen der Prozessschritte unterscheiden, wird der Fokus auf die bereits industriell etablierten, bzw. hochentwickelten Technologien gelegt. Sind für einzelne Prozesse noch keine industrietauglichen Verfahren entwickelt, werden aktuelle Forschungsarbeiten zur Modellierung von potenziellen Prozessen herangezogen. Dabei wird in Kapitel 4.1 zunächst die Gewinnung von CO_2 aus Luft und Abgasen und in Kapitel 4.2 die Herstellung von Wasserstoff durch Elektrolyse behandelt. In nachfolgenden Prozessen (Kapitel 4.3 und 4.4) wird aus diesen Gasen anschließend Methanol, Methan, Ethylen, Propylen und Benzol sowie weitere Nebenprodukte hergestellt. Ein breiter Überblick über diese und weitere chemische Produkte und Verfahren findet sich in einem aktuellen Bericht der DECHEMA.[29]

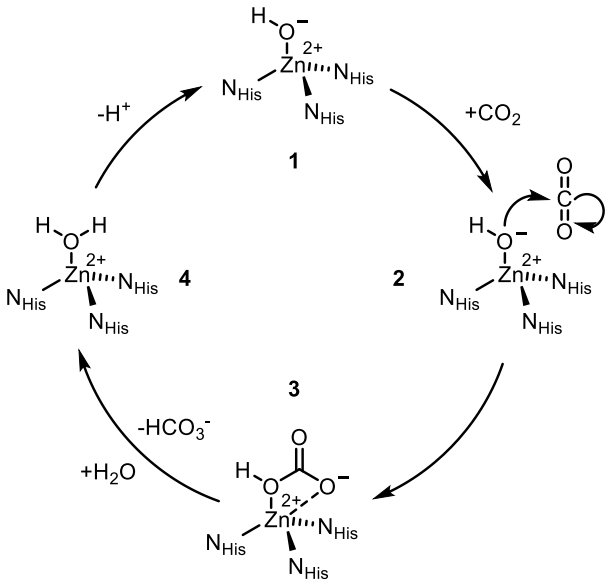
4.1 Carbon Capture Methoden

Die Frage nach einer Methode der CO_2-Abscheidung ist stark verknüpft mit der in Betracht zu ziehenden CO_2-Quelle. Sogenannte Punktquellen wie z. B. Zementwerke, Müllverbrennungsanlagen und Biogasanlage kommen ebenso in Frage wie die Abscheidung aus der Umgebungsluft. Im Hinblick auf die Nutzung des gewonnenen CO_2 als Rohstoff in der chemischen Industrie ist die Quelle von ebenso großer Bedeutung wie die angewandte Separationsmethode. Es ergibt beispielsweise keinen Sinn, CO_2 aus einem Biogasanlage zu verwenden, welches durch die Verbrennung von Methan zur Stromerzeugung für einen CCU-Prozess entstanden ist, wenn das erzeugte biogene Methan direkt als Chemikalie verwendet oder zu anderen Stoffen umgesetzt werden könnte. Andererseits benötigen viele Prozesse eine hohe Reaktionstemperatur; die Verbrennung eines CH_4-/CO_2-Gemisches aus Biogas kann diese Reaktionswärme liefern und gleichzeitig zu höher konzentrieren CO_2-Quellen führen. Ebenfalls wichtig sind die Berücksichtigung der Kapazitäten und CO_2-Konzentrationen der Abscheidungs- und Punktquellenanlagen, deren Design

bestimmt, welche CO_2-Menge aufgenommen werden kann. Eine Punktquelle erzeugt in der Regel deutlich höhere Konzentrationen (15–89 %) als die Umgebungsluft mit 410 ppm, was entsprechende verfahrenstechnische Schritte nach sich zieht und zu unterschiedlichen Reinheiten des abgetrennten CO_2 führt.

4.1.1 Carboanhydrase

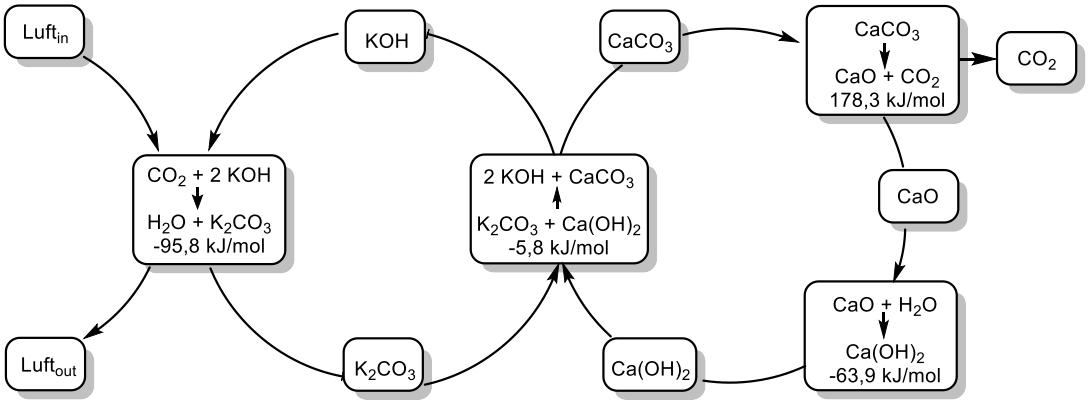
In der belebten Natur wird CO_2 durch das Enzym Carboanhydrase gebunden und in Hydrogencarbonat umgewandelt, um es für Organismen zugänglich zu machen. Die Funktionsweise des Enzyms könnte als Vorbild für die Entwicklung weiterer Abscheidungstechnologien dienen. Die Carboanhydrase besitzt ein Zn^{2+}-Ion als Cofaktor im aktiven Zentrum, welches an drei Imidazolreste der Aminosäure Histidin gebunden ist und einen Hydroxo-Liganden an der vierten Koordinationsstelle trägt. Die Geschwindigkeitskonstante der Reaktion k_{cat} hat einen Wert von 1.000.000 s^{-1}. Die Carboanhydrase kann somit 1.000.000 Moleküle CO_2 pro Sekunde hydratisieren, was 10^7-mal schneller ist als die unkatalysierte Reaktion der Solvatisierung in Wasser.[30] Der Mechanismus der Reaktion ist in Schema 1 gezeigt. CO_2 wird durch den Hydroxo-Liganden angegriffen (**2**) und bildet ein am Metall gebundenes Hydrogencarbonat (**3**). Durch Substitution mit Wasser (**4**) und Deprotonierung wird das Enzym in der ursprünglichen Struktur (**1**) regeneriert.



Schema 1: Reaktionsmechanismus der Hydrolyse von CO_2 durch die Carboanhydrase.[31]

4.1.2 Direct Air Capture (DAC)

Direct Air Capture bezeichnet die Methode, CO_2 direkt aus der Umgebungsluft zu separieren und anschließend zu speichern (CCS) oder nutzbar zu machen (CCU). Die Unterteilung bezogen auf die Desorptionstemperatur erfolgt in Hochtemperatur-(HT)-DAC mit flüssigen Sorptionsmitteln und Niedertemperatur-(NT)-DAC mit festen Sorptionsmitteln.[32] HT-DAC erfolgt in zwei Zyklen, einem Absorptions- und einem Regenerationszyklus, unter kontinuierlichem Betrieb der Anlage (Schema 2). Bei der Absorption wird das Sorptionsmittel (NaOH/KOH) der Umgebungsluft ausgesetzt und das CO_2 als Carbonat gebunden, während CO_2-arme Luft an die Atmosphäre abgegeben wird. Die Regeneration erfolgt durch Mischen des Carbonats mit $Ca(OH)_2$, wodurch $CaCO_3$ entsteht und NaOH/KOH zurückgebildet wird. Um das gebundene CO_2 abzutrennen, wird das Carbonat bei 900 °C gebrannt und das entstandene CaO anschließend mit Wasser wieder zu $Ca(OH)_2$ regeneriert, wodurch der Zyklus geschlossen wird.[33] Der Energiebedarf des Prozesses liegt bei 366–764 $kWh_{el}\ t^{-1}\ CO_2$ für den Betrieb der Ventilatoren, Pumpen und Kompressoren etc. sowie weiteren 1.420–2.250 $kWh_{th}\ t^{-1}\ CO_2$ Wärme aus der Verbrennung von Erdgas (NG). Bei einer Verbrennungseffizienz von 90 % entstehen dadurch etwa 0,44 t an direkten CO_2-Emissionen pro Tonne absorbiertem CO_2 durch die Verbrennung von Erdgas.[32]



Schema 2: HT-DAC mit KOH als Sorptionsmittel und einem Kalziumkreislauf auf der rechten Seite. Die Desorption von CO_2 ist stark endotherm. Abbildung nach Keith et al.[33]

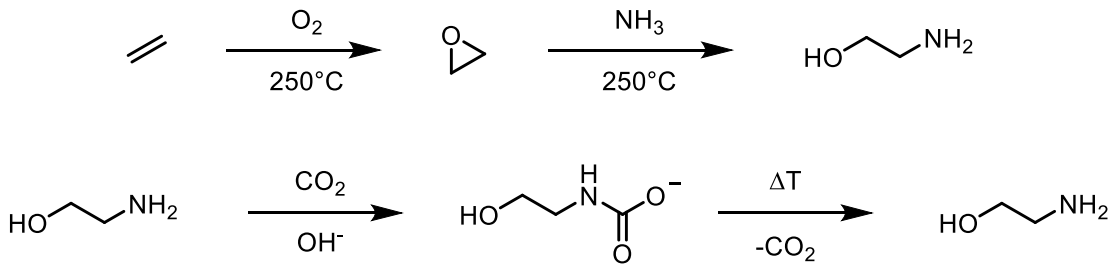
NT-DAC mit festen Sorptionsmitteln funktioniert mit einer einzigen Einheit, welche Absorption und Desorption in zwei nacheinander folgenden Schritten

ablaufen lässt. Zunächst wird Luft durch eine mit Aminen funktionalisierte Filtereinheit geleitet, die CO_2 chemisch bindet, bis der Filter gesättigt ist. Anschließend wird die Anlage geschlossen, evakuiert und erhitzt, wodurch das gebundene CO_2 abgegeben und abgeleitet wird, um es nutzbar zu machen. Nach dem Abkühlen der Anlage kann diese erneut genutzt werden. Der Energieverbrauch liegt bei etwa 200–300 $kWh_{el}\ t^{-1}\ CO_2$ für die Ventilatoren und Technik sowie 1.500–2.000 $kWh_{th}\ t^{-1}\ CO_2$ für die Regeneration.[32] Die Regeneration benötigt Temperaturen bis 100 °C, sodass die thermische Energie auch aus Abwärme anderer Prozesse bereitgestellt werden kann und ermöglicht eine Wärmeintegration zur Reduktion der Betriebskosten und Emissionen.[34] Andere Verfahren nutzen neben Aminen auch Metal-Organic Frameworks (MOFs)[35] oder K_2CO_3/Y_2O_3-Komposite[36], welche weniger Desorptionswärme benötigen. Um eine möglichst hohe Beladung mit CO_2 bei möglichst kleinem Energieeinsatz für die Desorption zu erreichen, müssen Adsorptions- und Desorptionsenergie passend gewählt werden.

4.1.3 Aminwäsche mit Monoethanolamin (MEA)

Die Aminwäsche mit Monoethanolamin (MEA) wurde bereits 1930 entwickelt und ist das gängigste Verfahren zur Abtrennung von CO_2 aus Abgasen von Punktquellen zur anschließenden Nutzung als gereinigtes Produkt.[37] Das Prinzip beruht auf der Absorption von CO_2 durch eine idealerweise nicht flüchtige, wässrige Aminlösung bei moderaten Temperaturen und Reaktion zum Carbamat[38], welches durch Erhitzen das gebundene CO_2 wieder freisetzt (Schema 3 unten). Die Trennung erfolgt bei etwa 120 °C und der entstehende Wasserdampf wird durch Kondensation in die Lösung zurückgeführt, wodurch CO_2 als gereinigtes Gas übrig bleibt.[39] MEA wird im Vergleich zu anderen Aminen am häufigsten eingesetzt, weil es gute Sorptionseigenschaften besitzt und sich relativ einfach aus leicht verfügbaren Chemikalien synthetisieren lässt: Ethylen wird zu Ethylenoxid (EO) umgesetzt und reagiert anschließend mit Ammoniak zu MEA (Schema 3 oben), wobei je nach Verhältnis von NH_3 zu EO auch Diethanolamin und Triethanolamin entstehen können.[40] Von 76 untersuchten Aminen sind sieben weitere Amine neben MEA mit herausragenden Absorptionseigenschaften für die CO_2-Abscheidung geeignet.[41]

Wässrige Aminlösungen besitzen meist Konzentrationen von 20–30 Gew.-% MEA und eine CO_2-Absorptionseffizienz von 90 %. Pro Tonne eingefangenes CO_2 gehen dabei 1,5–4,6 kg MEA verloren und müssen ersetzt werden.[42,43] MEA Verluste entstehen durch Emission im Absorber während der Destillation, durch Zerfall und chemische Reaktionen und aufgrund kleinerer Leckagen in der Anlage.[43-47] Der Energiebedarf der Aminwäsche mit 30%iger MEA-Lösung und 20 % CO_2 im Abgas beträgt 122–128 kWh_{el} t^{-1} CO_2 an elektrischer Energie für den Betrieb der Kompressoren und der Anlage sowie 1.052–1.063 kWh_{th} t^{-1} CO_2 an Wärmeenergie für die Desorption.[42] Wie auch bei DAC ist der Energiebedarf abhängig von der CO_2-Konzentration der genutzten Quelle und kann damit bei höheren CO_2-Konzentrationen gesenkt werden.[48] Daher wird die Aminwäsche vorrangig zur Reinigung von Abgasen aus Zementwerken, Müllverbrennungsanlagen und Biogasanlagen verwendet.



Schema 3: Reaktion von Ethylen zu Ethylenoxid und anschließend zu Monoethanolamin (MEA). MEA reagiert mit CO_2 in alkalischer Lösung zum Carbamat. Unter Temperatureinwirkung wird CO_2 freigesetzt und MEA regeneriert.

4.2 Wasserstoffherstellung

CO_2 alleine kann nicht als Basischemikalie fungieren, da es eine energetische Senke darstellt und sehr reaktionsträge ist. Mit -393 kJ mol^{-1} ist die Bildungsenthalpie stark negativ und das CO_2-Molekül muss zunächst energetisch aktiviert werden. Die Produktion von Wasserstoff ist ein elementarer Grundbaustein und Voraussetzung in der Anwendung von CCU-Technologien, um CO_2 zu reduzieren. Momentan wird Wasserstoff weltweit vor allem durch Reformierung von Erdgas (48 %), Erdöl (30 %) und Kohle (18 %) sowie zu einem kleinen Anteil aus Wasser durch Elektrolyse (4 %) hergestellt.[49] Hauptgrund für den geringen Anteil der Elektrolyse an der weltweiten Wasserstoffproduktion sind die hohen Kosten, die mit über 10,3 \$ kg^{-1} H_2 etwa das Fünffache der Kosten der Reformierung aus fossilen Trägern (1,5–2,3 \$ kg^{-1} H_2) betragen.[50]

Die Kosten für die Elektrolyse werden wiederum hauptsächlich durch den Strompreis bestimmt.[51] Um CO_2-neutrale CCU-Produkte erzeugen zu können, darf die genutzte Wasserstoffquelle nicht fossil sein, sondern muss auf günstigen, erneuerbaren Energien und Rohstoffen basieren. Aus der Vielzahl möglicher Erzeugungsoptionen haben sich für die Elektrolyse drei Techniken bewährt, auf die im Folgenden genauer eingegangen wird: Die Alkalische Elektrolyse (AE), Elektrolyse an Polyelektrolytmembranen (PEM) und Hochtemperatur-elektrolyse (HTE). Für die Produktion von 1 kg Wasserstoff werden 9 kg Wasser benötigt und zusätzliche 8 kg Sauerstoff erzeugt.[52]

4.2.1 Alkalische Elektrolyse (AE)

Bei der alkalischen Elektrolyse wird Wasser durch das Anlegen einer Spannung direkt zu Wasserstoff und Sauerstoff gespalten. An der Anode werden Hydroxidionen zu Wasser und Sauerstoffgas umgesetzt, an der Kathode entstehen Hydroxidionen und molekularer Wasserstoff aus Wasser. Die Gesamtgleichung der Reaktion *(3)* ist allgemeingültig für alle Arten der Elektrolyse.

Anode: $4\ OH^- \rightarrow O_2 + 2\ H_2O + 4\ e^-$ *(1)*

Kathode: $4\ H_2O + 4\ e^- \rightarrow 4\ OH^- + 2\ H_2$ *(2)*

Gesamtgleichung: $2\ H_2O \rightarrow 2\ H_2 + O_2$ *(3)*

AE wird normalerweise bei Temperaturen von 20–80 °C betrieben, mit einer Elektrolytlösung aus KOH und/oder NaOH, deren Konzentration 20–30 Gew.-% beträgt. Anode und Kathode bestehen meist aus nickelhaltigen Materialien und sind durch ein Diaphragma aus Asbest getrennt, welches für die erzeugten OH^- Ionen durchlässig ist. Der erzeugte Wasserstoff besitzt eine Reinheit von über 99 %; entstehende Alkalidämpfe müssen abgetrennt werden. Die Energiedichte ist bei der AE relativ niedrig und beträgt bis zu 400 mA cm^{-2} mit einem Energieverbrauch von 4,5–5,5 $kWh_{el}\ m_N^{-3}$ und einer elektrischen Effizienz von 59–70 % (bezogen auf den Brennwert) bei einer Zellspannung von 1,8–2,0 V.[53]

4.2.2 Polyelektrolytmembran (PEM) Elektrolyse

PEM Elektrolyse basiert auf einer Technik, die eine für Protonen leitfähige Membran zwischen den Zellen nutzt (Proton Exchange Membrane, PEM). Diese Membran besteht z. B. aus einem Perfluorosulfonsäure-polymer (Nafion®, fumapem®) und kann unterschiedliche Eigenschaften bieten. Abhängig von Länge der Seitenketten, Leitfähigkeit, Widerstand, Dicke der Membran, mechanische Stabilität usw. sind damit verschiedene Einsatzmöglichkeiten realisierbar.[50,54] Durch die Protonenleitfähigkeit ist keine Alkalilösung zum Betrieb der Zellen notwendig und für die Elektroden ergeben sich folgende Reaktions-Teilgleichungen:

Anode: $2\ H_2O \rightarrow 4\ H^+ + O_2 + 4\ e^-$ *(4)*

Kathode: $4\ H^+ + 4\ e^- \rightarrow 2\ H_2$ *(5)*

Vorteile der PEM Elektrolyse sind vor allem die geringere Gaspermeabilität der Membran, hohe Leitfähigkeiten (0,1 S cm^{-1}), geringe Schichtdicken (20–300 µm) und hoher Druck. Die Betriebstemperatur liegt wie bei der AE bei 20–80 °C, die Energiedichte ist mit 2,0 A cm^{-2} jedoch deutlich höher. Auch die Zellspannung kann mit 1,48 V deutlich gesenkt werden. Der Energiebedarf liegt bei etwa 4–5 $kWh_{el}\ m_N^{-3}$, allerdings benötigen die Elektroden hochaktive Edelmetalle, wie Pd und Pt für die Kathode und IrO_2/RuO_2 für die Anode, was die Materialkosten deutlich erhöht. Trotzdem sind große Vorteile der PEM Elektrolyse die damit einhergehende Effizienzsteigerung auf 80–90 % (bezogen auf den Brennwert) und eine hohe Reinheit des Wasserstoffgases von bis zu 99.99 %.

4.2.3 Hochtemperaturelektrolyse (HTE)

Die Hochtemperaturelektrolyse wird in der Regel an Feststoffoxidzellen durchgeführt, die aus Ni/Y-stabilisiertem Zr_2O_3 bestehen. Bei Temperaturen von über 500 °C werden die Materialien leitfähig für Oxidionen, welche als Ladungsträger fungieren:

Anode: $2\ O^{2-} \rightarrow O_2 + 4\ e^-$ *(6)*

Kathode: $4\ e^- + 2\ H_2O \rightarrow 2\ H_2 + 2\ O^{2-}$ *(7)*

Der Vorteil der HTE liegt in der durch die hohen Temperaturen mögliche Verringerung der benötigten Überspannung für die Elektrolyse. Bei 900–950 °C liegt die Zellspannung bei 1,29 V und ermöglicht eine theoretische elektrische Effizienz von 100 %.[55] Die tatsächliche Zellspannung liegt bei 0,95–1,30 V und die Spannungseffizienz bei 81–86 %. Die hohen Temperaturen beeinträchtigen die Lebensdauer der eingesetzten Materialien stark und daher ist keine dauerhafte stabile Nutzung möglich. Der hohe Bedarf an thermischer Energie erfordert eine Nutzung in Verbindung mit stark exothermen Prozessen. Der elektrische Energieverbrauch wäre bei kommerzieller Nutzung allerdings deutlich geringer und würde etwa 2,5–3,5 kWh_{el} m_N^{-3} Wasserstoff betragen.[56]

4.2.4 Überblick der AE, PEM und HTE

Ein kurzer Überblick über die drei Elektrolyseverfahren ist in Abbildung 8 gegeben und fasst die Betriebsparameter sowie die Anoden- und Kathodenreaktionsgleichungen zusammen.

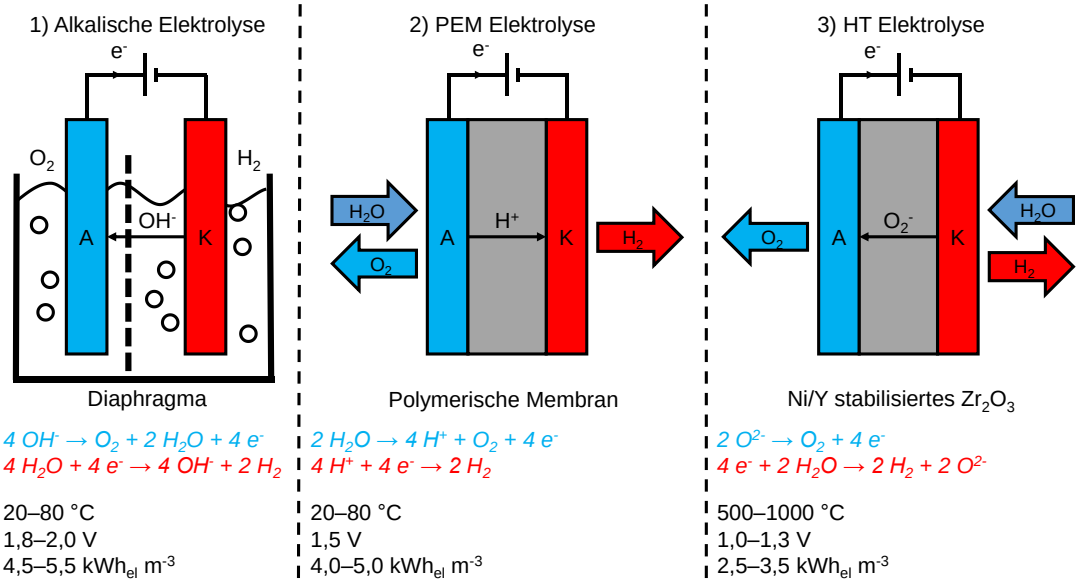


Abbildung 8: Überblick über die drei Elektrolyseverfahren 1) AE, 2) PEM und 3) HTE mit technischen Parametern Betriebstemperatur, Zellspannung und Energieverbrauch. A = Anode (blau), K = Kathode (rot). Abbildung nach Sapountzi et al.[57]

4.3 Chemische Verfahren

4.3.1 Methanol aus CO_2

Methanol wurde erstmals 1923 in industriellem Maßstab erzeugt, als ein Verfahren zur Produktion aus Synthesegas (RG 8) entwickelt wurde.[58] Synthesegas (SG) ist ein Gemisch aus CO und H_2 in einem Verhältnis zwischen 1:1 und 1:3 und wird größtenteils durch Dampfreformierung aus Erdgas, partielle Oxidation oder Kohlevergasung gewonnen.[59] Die Erzeugung von Methanol kann jedoch auch direkt aus CO_2 erfolgen, wobei folgende Reaktionen eine Rolle spielen:

$$CO + 2\,H_2 \rightleftharpoons CH_3OH \qquad \Delta H_{300\,K} = -90{,}8\ kJ/mol \qquad (8)$$

$$CO_2 + 3\,H_2 \rightleftharpoons CH_3OH + H_2O \qquad \Delta H_{300\,K} = -49{,}6\ kJ/mol \qquad (9)$$

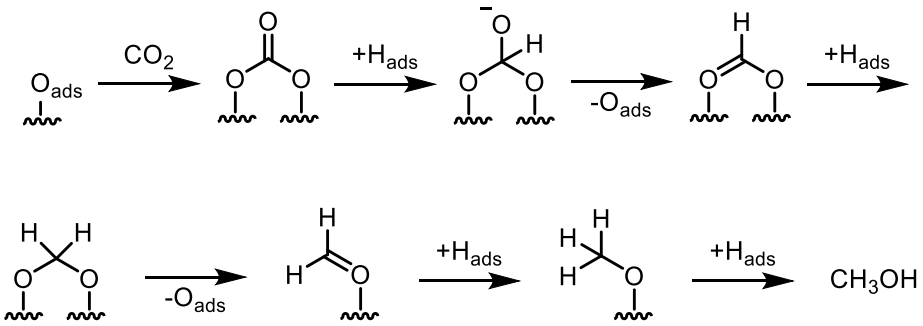
$$CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2 \qquad \Delta H_{300\,K} = -41{,}2\ kJ/mol \qquad (10)$$

Für die Reaktion nach RG (9) wird demnach ein Verhältnis von CO_2:H_2 = 1:3 benötigt. Reaktionsgleichung (RG 10) wird auch als Water Gas Shift (WGS) bezeichnet, auf die später genauer eingegangen wird (Kapitel 4.3.3), und gibt in Kombination mit RG (9) die oben erwähnte RG (8).

Erste Arbeiten zeigten, dass binäre und ternäre Katalysatoren auf Basis von CuO/ZrO_2 und Aluminium die Konversion zu Methanol begünstigten, jedoch mit einer geringeren Selektivität einhergingen.[60] Heutige kommerziell erhältliche Katalysatoren bestehen aus einer Mischung von Al_2O_3, CuO, MgO und ZnO in verschiedenen Gewichtsanteilen.

Mechanistische und kinetische Untersuchungen legen nahe, dass CO_2 und H_2 dissoziativ auf der Kupferoberfläche binden, wobei CO_2 oxidativ an Oberflächensauerstoff zum Carbonat reagiert. Die Carbonate werden sukzessiv zu Bicarbonat-, Format-, Formaldehyd-, Methoxy-Spezies und schließlich zu Methanol hydriert (Schema 4).[61] Die Hydrierung des Formats, welches überdies die langlebigste Spezies darstellt, ist der geschwindigkeitsbestimmende Schritt. Die zweistufige Synthese von Methanol durch Reduktion von CO_2 zu CO und anschließende Hydrierung zu Methanol findet nicht statt. Stattdessen

wird auch bei der Bildung aus Synthesegas zuerst CO mit adsorbiertem Sauerstoff zu CO_2 oxidiert, welches anschließend zu Methanol reagiert.[62,63]



Schema 4: Reaktionsmechanismus für die Reaktion von CO_2 zu Methanol an einer Kupferoberfläche. Dissoziative Adsorption von H_2, Oxidation von CO und Reaktion zu Wasser sind hier nicht gezeigt.[61]

Die Bildung von Methanol aus CO_2 ist thermodynamisch ungünstiger als die Bildung aus CO und besitzt eine geringere Reaktionswärme (vgl. RG 8 und RG 9). Dadurch ergeben sich Vorteile im Reaktordesign und bei der Kühlung gegenüber Prozessen mit höherer Reaktionswärme, allerdings werden größere Reaktoren benötigt und durch die höheren CO_2-Partialdrücke entsteht mehr Wasser in der Reverse-Water-Gas-Shift-Reaktion (RWGS, vgl. Kapitel 4.3.3).[64] Die weltweit erste Anlage, die Methanol in großem Maßstab aus CO_2 herstellt, wurde 2011 von Carbon Recycling International in Island in Betrieb genommen und nach dem Nobelpreisträger *George Olah* benannt.[59,65] Diese Anlage produziert bis zu 4.000 t Methanol aus 6.000 t CO_2 bei einer Elektrolyseleistung von 6 MW_{el} pro Jahr. Dabei werden geogenes CO_2 und geothermische Wärme sowie Wasserstoff aus Elektrolyse eingesetzt.[66]

Der Prozess lässt sich direkt auf CCU übertragen, wenn CO_2-Punktquellen wie Zementwerke genutzt werden. Die Verknüpfung der Prozesse ermöglicht die Berechnung von Stoff- und Energieströmen aus vorhandenen Prozessdaten oder durch Simulationen, die experimentelle Parameter nutzen. Wichtig für die Berechnung von Prozessinformationen sind beispielsweise die Flussrate der Abgase, die CO_2-Konzentration, Edukt- und Produktverhältnisse (stöchiometrisch oder überstöchiometrisch), Umsatzraten, Reaktortemperaturen, Energiebedarf und viele weitere.[67] Ergebnisse einer solchen Simulation sind in Abbildung 9 zusammengefasst und geben die technologische Metrik der CCU-Einheit bezogen auf die Produktion von 1.000 kg Methanol an. Neben

den Rohmaterialien und Infrastrukturinputs benötigt jeder Prozess Energie in Form von Strom und Wärme und erzeugt Emissionen (hier CO_2) sowie Nebenprodukte (Klinker, Prozesswasser, Sauerstoff) mit weiterem Nutzen.

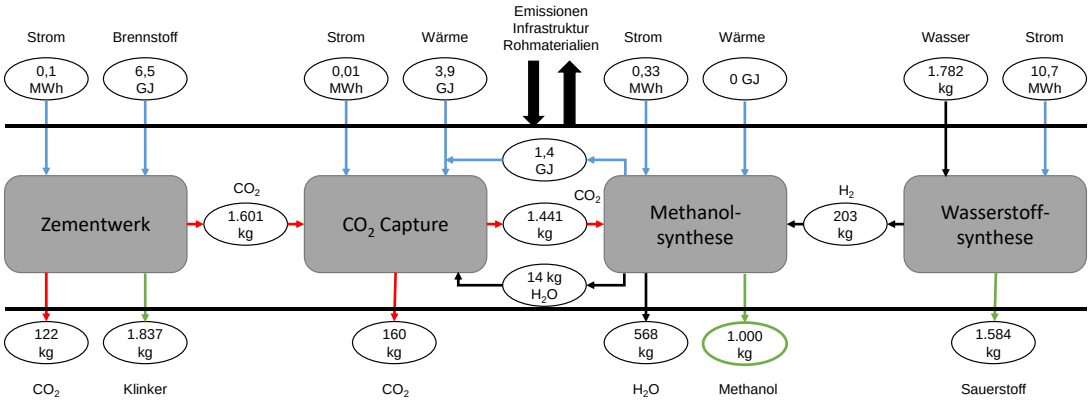


Abbildung 9: Ergebnisse der Prozesssimulation der Methanolsynthese; © nach Meunier et al.[67]

Wichtige Annahmen sind auch hier die Kapazität und Lebensdauer der Anlage oder Informationen über die Nutzbarkeit der Reaktionswärme aus der Methanolsynthese für den CO_2-Abscheidungsprozess. Solche Wärmeintegrationen senken den Energieaufwand, die Emissionen und auch die Kosten, was oftmals in techno-ökonomischen Analysen betont wird.[68] Kontext der heutigen erneuerbaren Methanolsynthese ist jedoch größtenteils die Verwendung von Methanol als Energieträger bzw. Treibstoff, wie in der von *Asinger* und *Olah* entwickelten Methanol-Wirtschaft, und nicht die in dieser Arbeit betrachtete Verwendung als Basischemikalie.[69]

4.3.2 Sabatier-Methanisierung

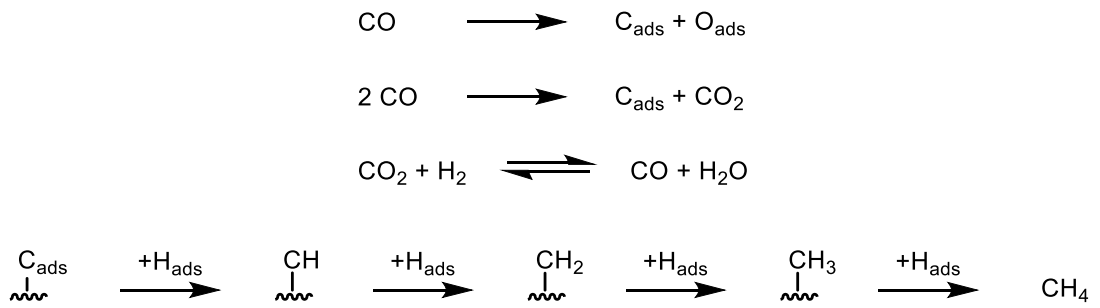
Die Methanisierung von CO_2, auch bezeichnet als Sabatier-Verfahren[70] (RG 11 und 12), zur Produktion von synthetischem Erdgas (Synthetic Natural Gas, SNG) aus CO/CO_2 ist eine bekannte und viel diskutierte Reaktion.[71-75]

$$CO + 3\,H_2 \rightleftharpoons CH_4 + H_2O_{(g)} \qquad \Delta H_{298\,K} = -206\ kJ/mol \qquad (11)$$

$$CO_2 + 4\,H_2 \rightleftharpoons CH_4 + 2\,H_2O_{(g)} \qquad \Delta H_{298\,K} = -164\ kJ/mol \qquad (12)$$

Hohe Drücke begünstigen die Bildung von Methan, hohe Temperaturen limitieren die Methanbildung. Als Katalysator wird Nickel eingesetzt, da es bei relativ hoher Aktivität die beste Selektivität für Methan besitzt und im Vergleich

zu Ruthenium und Kobalt deutlich billiger ist. Der Reaktionsmechanismus verläuft dabei höchstwahrscheinlich über die Reduktion von Oberflächenkohlenstoff, welcher durch die Dissoziation von CO im geschwindigkeitsbestimmenden Schritt entsteht (Schema 5).[76] Auch hier tritt die RWGS-Reaktion (RG 13 in Kapitel 4.3.3) als Nebenreaktion beim Einsatz von Nickelkatalysatoren auf.[71]



Schema 5: Mechanismus der Sabatier-Reaktion an Nickeloberflächen.

In der Regel werden drei Typen von Reaktoren aufgrund ihrer Temperaturprofile unterschieden: Adiabatische Festbettreaktoren ohne Kühlung mit einem klaren Hotspot von 250–700 °C, isotherme Wirbelschichtreaktoren und polytrope Festbettreaktoren mit Kühlsystemen und moderaten Temperaturen um die 300 °C.[75] Ein Festbettreaktor wird am Zentrum für Sonnenenergie- und Wasserstoffforschung (ZSW) in Stuttgart betrieben, in dem Methan aus Biogas-CO_2 bei 250–550 °C und 8 bar Druck hergestellt wird.[77] Dabei wird ein leicht überstöchiometrischer Anteil von 5,7 Vol.-% CO_2 eingesetzt, um möglichst vollständigen Wasserstoffverbrauch zu garantieren und Umsätze von bis zu 95 % zu erhalten. Die berechnete, freigesetzte Reaktionswärme beträgt 1.770 kW bei einem Methan-Produktstrom von 10,2 mol s^{-1}.[78] Die meisten Projekte fokussieren sich jedoch auch hier auf den Einsatz von synthetischem Methan als Treibstoff oder Energiespeicher zur Einspeisung ins (deutsche) Gasnetz und nicht zur Verwendung des Methans als Basischemikalie.[77-82]

4.3.3 Reverse Water Gas Shift (RWGS)

Ursprünglich wurde das Wassergasgleichgewicht (Water Gas Shift, WGS) genutzt, um Abgase durch Reaktion mit Wasser von giftigem CO zu befreien und gleichzeitig Wasserstoff für das Synthesegas (SG) zurückzugewinnen. SG

wurde meist aus Methan durch Dampfreformierung (Steam Methane Reforming, SMR) hergestellt, wobei CO entstand, das mit Wasser abreagieren konnte.[83] Die RWGS-Reaktion (RG 13) ist daher nützlich, um CO als Baustein für Synthesegas zu erhalten, indem CO_2 mit Wasserstoff im Verhältnis 1:1 reduziert wird.

$$CO_2 + H_2 \rightleftharpoons CO + H_2O \qquad \Delta H_{298\,K} = 41\ kJ/mol \qquad (13)$$

Thermodynamisch ist die Reaktion bei Temperaturen über 700 °C bevorzugt, bei unter 600 °C tritt die Bildung von Methan ein (Abbildung 10). Katalysiert wird die WGS-Reaktion in der ursprünglichen Variante meist von Eisen oder Kupfer bei 200–450 °C. Für die RWGS müssen die Katalysatoren deutlich stabiler gegenüber hohen Temperaturen sein; es werden zudem auch Platin- und Rhodium-Katalysatoren eingesetzt, die bei geringeren Temperaturen ohne Methanbildung aktiv sind.[84] Das SG kann anschließend in Fischer-Tropsch-Verfahren (Kapitel 4.3.6) genutzt werden, um weitere flüssige Kohlenwasserstoffe (KW) zu synthetisieren.[85] Allerdings sind die technischen Möglichkeiten der SG-Produktion aus RWGS limitiert und Dampfreformierung aus synthetischem Methan kann als alternativer Prozess für die Herstellung von Synthesegas dienen.[86]

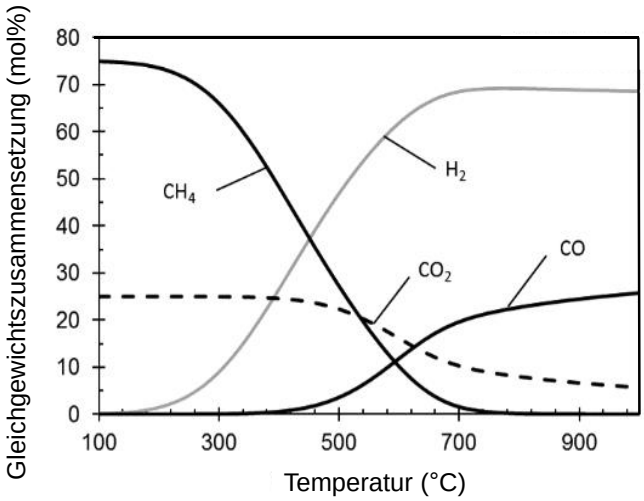


Abbildung 10: Thermodynamische Gleichgewichtskonzentrationen des Produktgases bei einem Druck von 0,1 MPa für ein H_2:CO_2 Verhältnis von 3:1. © Abbildung nach Jess et al.[85]

4.3.4 Methanol-to-Olefins (MTO)

Die Synthese von Kohlenwasserstoffen aus Methanol wurde erstmals 1977 von MOBIL entwickelt.[87] Intensive Forschung zu den Reaktionsprinzipien, mechanistische Studien und Prozessanforderungen führten 2010 zum Bau der ersten kommerziellen MTO-Anlage in China mit einer Produktionskapazität von 0,6 Mt Polyethylen und Polypropylen pro Jahr.[88] Die allgemeine Reaktionsgleichung (14) beinhaltet zunächst die Bildung von Dimethylether (DME) aus Methanol (RG 15), welcher anschließend zu Ethylen (RG 16), Propylen (RG 17) und weiteren Olefinen reagiert.[89,90]

$$n\ CH_3OH \rightleftharpoons C_nH_{2n} + n\ H_2O \qquad (14)$$

$$2\ CH_3OH \rightleftharpoons CH_3OCH_3 + H_2O_{(g)} \qquad \Delta H_{298\ K} = 5\ kJ/mol \qquad (15)$$

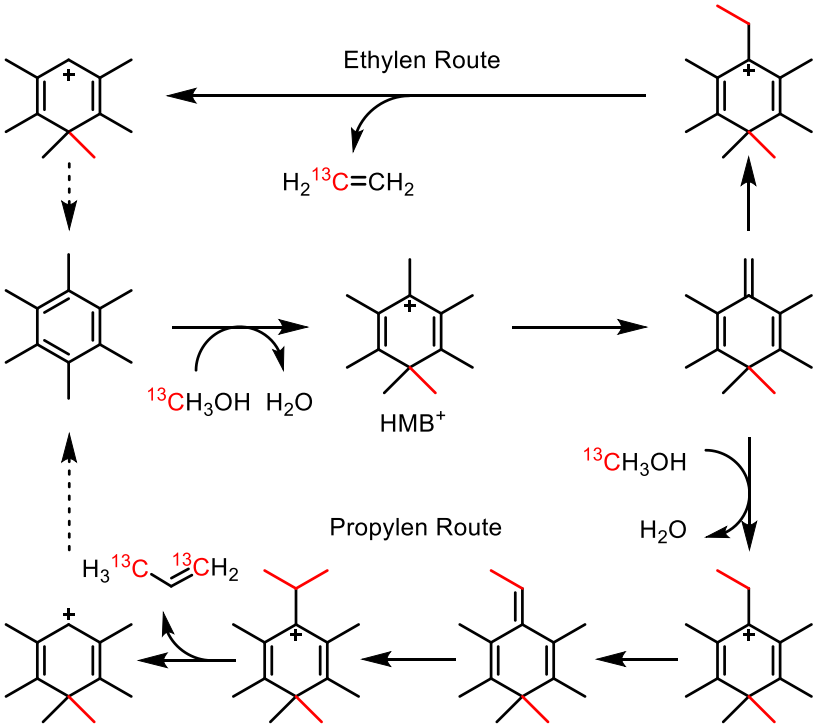
$$CH_3OCH_3 \rightleftharpoons C_2H_4 + H_2O_{(g)} \qquad \Delta H_{298\ K} = -49\ kJ/mol \qquad (16)$$

$$CH_3OCH_3 + CH_3OH \rightleftharpoons C_3H_6 + 2\ H_2O_{(g)} \qquad \Delta H_{298\ K} = -85\ kJ/mol \qquad (17)$$

Als Katalysatoren werden diverse Zeolithe (Alumosilikate) eingesetzt, beispielsweise ZSM-5/HZSM-5 und SAPO-34 (Silicoalumophosphate), welche sich in ihrer Zusammensetzung und Porengröße unterscheiden. Die Zusammensetzung bestimmt die Acidität, die Porengröße die Diffusionseigenschaften der Zeolithe und die Größe der möglichen Produkte. Die ablaufenden Mechanismen sind sehr komplex, bis heute nicht vollständig aufgeklärt und unterscheiden sich zudem je nach eingesetztem Zeolith.[91-94] Der sogenannte Hydrocarbon-Pool-Mechanismus (HCP), bei dem Methylbenzole als HCP-Spezies identifiziert wurden, zeigt eine Korrelation zwischen der Bildung von Olefinen und der Anwesenheit von Methylbenzolen. Dabei spielen Carbeniumionen und deren deprotonierte Gegenspieler eine entscheidende Rolle bei der Methylierung zu Olefinen. Ein genauer Mechanismus (Schema 6) wurde beispielweise für die Seitenketten-methylierung am Heptamethylbenzolkation (HMB^+) im Zeolith DNL-6 aufgeklärt, das als HCP-Molekül auch in SAPO-34 gefunden wurde.[95]

Die Selektivität der Reaktion ist eines der größten Probleme, da neben Ethylen und Propylen auch Methan, Ethan, Propan und höhere Kohlenwasserstoffe (C_4–C_6) entstehen. Methanol wird zu über 99 % konvertiert, wobei 80 % der

Produkte auf Ethylen und Propylen entfallen, etwa weitere 10 % auf Buten und die restlichen 10 % auf verschiedene Nebenprodukte. Der Methanolverbrauch liegt bei 2,96 t pro Tonne Ethylen/Propylen, deren Produktverhältnis, je nach Operationsbedingungen, von 0,8–1,2 variieren kann. Modernere Pilotanlagen ermöglichen eine Methanolkonversion von 99,97 %, eine Steigerung der Ethylen- bzw. Propylenausbeute auf über 85 % und eine Senkung des Verbrauchs auf 2,67 t Methanol pro Tonne Ethylen/Propylen. Da die Reaktion exotherm verläuft, entsteht im MTO-Prozess mit SAPO-34 eine Reaktionswärme von 820 kJ kg^{-1} Methanol bei einer Reaktionstemperatur von 495 °C. Der Energiebedarf der Prozessführung beträgt etwa 1 GJ_{el} t^{-1} Ethylen/Propylen.[29,88]



Schema 6: Mechanismus der Seitenketten-methylierung mit radioaktiv markiertem ^{13}C über HMB^+-Ionen in DNL-6; © nach Li et al.[95]

4.3.5 Methanol-to-Aromatics (MTA)

Prinzipiell unterscheidet sich das MTA-Verfahren nicht merklich vom MTO-Verfahren. Als Reaktand wird ebenfalls Methanol eingesetzt und als Katalysatoren kommen modifizierte ZSM-5 und HZSM-5-Zeolithe mit hoher Acidität zum Einsatz, wodurch sich das Produktspektrum gegenüber der MTO-Synthese unterscheidet (Tabelle 2).[96] Hauptprodukte in variierenden Mengen sind

o/m/p-Xylol (30–40 %), Toluol (24–26 %), Benzol (3–7 %) und höhere Aromaten wie Naphthalen (26–79 %).[29,87,97] Die Konversion von Methanol fällt mit knapp 33 % jedoch sehr gering aus und auch die Bildung von Benzol als aromatischer Grundbaustein gehört nicht zu den präferierten Reaktionen. Modernere Verfahren ermöglichen Konversionen von 95–100 % Methanol, 60–70 % Aromatenausbeute und bis zu 80 % Selektivität zu Benzol, Toluol und Xylol.[98] Der Energiebedarf für den Prozessbetrieb bei 370–540 °C und bei 20–25 bar liegt wie bei MTO bei 1 GJ_{el} t^{-1} Aromaten, wobei die Reaktionen ebenfalls exotherm verlaufen und die Abwärme genutzt werden kann. Es gibt jedoch nur einige wenige Anlagen in China, die MTA-Verfahren kommerziell betreiben und über Produktionskapazitäten zwischen 10.000 und 100.000 t pro Jahr verfügen.

Tabelle 2: Produktspektrum der MTA-Reaktionen an verschiedenen Zeolithkatalysatoren.[87,97]

Katalysator (Temperatur)	**HZSM-5 (370 °C)**	**HZSM-5 (400 °C)**	**NaZSM-5 (400 °C)**	**CuZSM-5 (400 °C)**
Produkt	**Selektivität (%)**			
Aromaten, davon	19,0	32,8	8,9	43,9
Benzol	4,1	6,9	5,7	3,5
Toluol	25,6	24,7	3,9	26,4
o/m/p-Xylol	9,0	30,3	10,7	32,2
Sonstige	28,5	38	79,7	37,9

4.3.6 Fischer-Tropsch-(FT)-Synthese

Franz Fischer und Hans Tropsch entwickelten in den 1920er Jahren ein Verfahren, um flüssige Kohlenwasserstoffe aus Synthesegas herzustellen.[99] Die ursprünglich aufgrund von Ölknappheit entwickelte Technik bediente sich der Kohlevorkommen in Deutschland als Kohlenstoffstofflieferant. Auch für die FT-Synthese kommt CO_2 als Rohstoffquelle für CCU in Frage. Das Synthesegas wird bei Temperaturen von 150–300 °C und Drücken um die 5–30 bar über Eisen- und Kobaltkatalysatoren zu gesättigten (RG 19), ungesättigten (RG 20) und alkoholischen (RG 21) Kohlenwasserstoffen umgesetzt.[100] Es entstehen geringe Anteile der C_3–C_4 Fraktionen, 33–72 % Benzin (C_5–C_{11}), 3–17 % Gasöl/Diesel sowie 40 % diverser Paraffine und 4–12 % Alkohole.

$$CO + 2\,H_2 \rightleftharpoons -(CH_2)- + H_2O \qquad \Delta H_{298\,K} = -165\ kJ/mol \qquad (18)$$

$$n\,CO + (2n+1)\,H_2 \rightleftharpoons C_nH_{2n+2} + n\,H_2O \qquad (19)$$

$$n\,CO + (2n)\,H_2 \rightleftharpoons C_nH_{2n} + n\,H_2O \qquad (20)$$

$$n\,CO + (2n)\,H_2 \rightleftharpoons C_nH_{2n+1}OH + (n-1)\,H_2O \qquad (21)$$

Die Zusammensetzung der FT-Syntheseprodukte variiert auch hier je nach Reaktionsbedingungen, Reaktortyp und SG-Mischungsverhältnis ($CO:H_2$ = 1:5 bis 1:20). Die Vielzahl der möglichen Produkte macht das Verfahren interessant, um – unabhängig von Erdöl – eine breite Basis chemischer Grundstoffe zu erhalten, die durch etablierte Trennverfahren wie z. B. Destillation in ihre Bestandteile zerlegt werden oder als Heiz-/Treibstoffe im Power-to-Gas-/Power-to-Liquid-Verfahren zur Anwendung kommen können.[101] Limitiert wird die Anwendung der FT-Synthese jedoch vor allem durch unausgereifte Technologien. Die Kopplung der FT-Synthese mit RWGS bei niedrigeren Temperaturen und auch der Hochtemperatur-FT-Synthese in Kombination mit Hochtemperaturelektrolyse befindet sich aktuell noch in der Testphase. Das bedeutet, dass die Anwendung kommerzieller CCU-Verfahren mit FT-Synthese aktuell noch nicht in industriellem Maßstab betrieben wird.[102]

4.4 Sonstige Verfahren

Viele weitere Verfahren zur Umsetzung von CO_2 zu Kohlenwasserstoffen sind denkbar und wünschenswert, befinden sich allerdings oft noch in der Entwicklung oder sind bisher unzureichend erforscht. Im Folgenden wird auf einige interessante Reaktionen eingegangen, zu denen grundlegende Arbeiten existieren, die sich jedoch noch im Labormaßstab befinden und für die bisher keine industrielle Anwendung absehbar ist.

4.4.1 Methan zu Methanol

Eine der wünschenswertesten Reaktionen der chemischen Synthese ist die direkte Oxidation von Methan zu Methanol. In chemischen Prozessen wird Methan bisher bei Temperaturen bis zu 1000 °C zu Synthesegas umgewandelt und dieses anschließend zu Methanol und anderen Produkten verarbeitet. Die Erzeugung von Synthesegas ist mitunter der teuerste und aufwendigste

Schritt zur Herstellung höherer Kohlenwasserstoffe.[103] Die selektive Oxidation von Methan wurde an Cu-ZSM-5-Katalysatoren beobachtet, wo mit Sauerstoff bei Temperaturen um die 450 °C die aktive $[Cu_2\text{-}(\mu\text{-Oxo})_2]^{2+}$-Spezies gebildet wird.[104] Bei 150–200 °C reagiert diese Spezies hochselektiv mit Methan zu Methanol, wenn auch mit einer geringen Methanolkonzentration von ca. 8 µmol g^{-1} Katalysator. Damit ist ein erster Schritt für die Eröffnung weiterer Pfade für die Reaktion von regenerativem Methan zu Methanol und damit alternativen Produktionsrouten getan. Das industrielle Potenzial ist im Hinblick auf die vier Leistungskriterien Selektivität, Aktivität, Materialverbrauch und Produktkonzentration jedoch noch nicht gegeben.[103,105]

4.4.2 Methan zu Ethylen und Benzol

Ein weiteres Konzept neben der Synthese von Ethylen und Benzol aus Methanol via MTO- bzw. MTA-Verfahren ist die direkte Kopplung von Methan. Ethylen kann durch oxidative Kopplung von Methan bei 500–1000 °C an Oxiden der Metalle Sn, Pb, Sb, Bi, Tl, Cd und Mn auf α-Alumina entstehen.[106] Die Selektivität zu Ethylen (und auch Ethan) liegt jedoch bei nur etwa 50 %. Die Reaktion von Methan zu Benzol unter nicht oxidativen Bedingungen wurde ebenfalls an dotierten ZSM-5-Katalysatoren mit verschiedenen Übergangsmetallen untersucht.[107] Eine Selektivität für Benzol von bis zu 80 % konnte erreicht werden, jedoch lagen die Konversionsraten unter 8 % bei Temperaturen von 750 °C und einer Reaktionszeit von 8 Stunden. Die nicht-oxidative Reaktion von Methan zu höheren Kohlenwasserstoffen wurde an in einer Silicamatrix eingebetteten, isolierten Fe-Atomen beobachtet.[108] Da die nicht-oxidative Konversion eine deutlich höhere Reaktionsenthalpie besitzt, sind auch hier Reaktionstemperaturen von über 1000 °C nötig. Als einzige Produkte entstanden Ethylen (40–48 %), Benzol (15–25 %) und Naphthalen (25–35 %), wobei Ethylen mit einer maximalen Ausbeute von 48 % bei etwa 1100 °C gewonnen wurde. Die Selektivität lag bei über 99 % für Kohlenwasserstoffe und die Methankonversion bei 48 %.

4.4.3 Synthesegas zu Olefinen

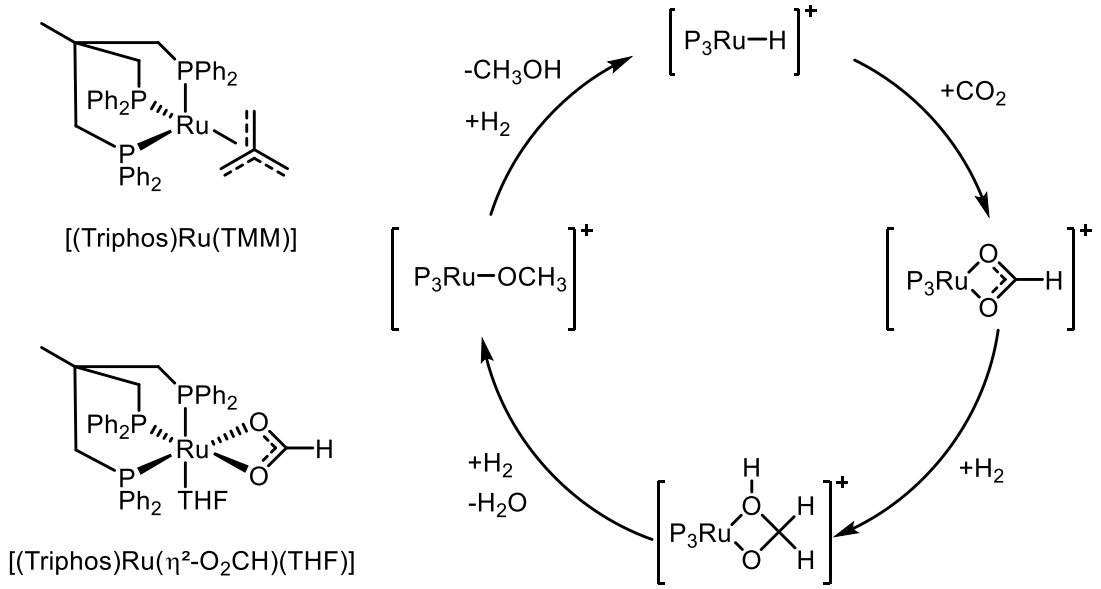
Der Versuch, Synthesegas via Fischer-Tropsch-Verfahren (FT) zu Olefinen innerhalb eines engen Produktspektrums umzuwandeln, ist ebenfalls eine herausfordernde Aufgabe. Die Synthese von C_2–C_4-Olefinen mit einer Selektivität von bis zu 80 % und einer CO-Konversion von 17 % wurde an einem bifunktionalen Katalysator mit zwei aktiven Zentren beobachtet.[109] Dieser bestand aus $ZnCrO_x$ mit einer teilweise reduzierten Oxidoberfläche und einem mesoporösen SAPO-Zeolith. Die Aktivierung von CO und H_2 wurde so von der C–C-Kopplung getrennt, was zur Möglichkeit der separaten Einstellung der CO-Konversions- und C–C-Kopplungseigenschaften führte.

4.4.4 Homogene Katalyse

Alle bisher diskutierten Verfahren nutzen die heterogene Katalyse für die Umsetzung zu den gewünschten Zielprodukten. Ein großes Forschungsfeld beschäftigt sich ebenfalls mit der homogenen Katalyse, bei der Reaktionen in einer Phase und oftmals unter milderen Bedingungen als bei der heterogenen Katalyse ablaufen, sodass weniger Energie für die Bereitstellung hoher Temperaturen und hoher Drücke aufgebracht werden muss.

Ein Beispiel hierfür ist die Hydrierung von CO_2 zu Methanol an einem einzelnen molekularen Rutheniumkatalysator, welcher von *Klankermayer et al.* entwickelt wurde (Schema 7).[110] Die Reaktion verläuft bei Temperaturen von 140 °C und Drücken von 80 bar (CO_2:H_2 = 20:60). Ein Kriterium zur Beurteilung der Aktivität (homogener) Katalysatoren ist die Turn-Over-Number (TON), welche angibt, wie viele Moleküle des Substrats der Katalysator umwandelt, bevor er inaktiviert wird. Je höher die TON, desto aktiver und stabiler der Katalysator. Idealerweise wird der Katalysator nicht verbraucht und die TON ist beliebig hoch. In der Arbeit von *Klankermayer et al.* liegt die TON nach dem ersten Reaktionszyklus bei 247. Der Katalysator kann recycelt werden und nach insgesamt vier Zyklen eine TON von 769 erreichen, was jedoch vergleichsweise gering ist; andere Katalysatorsysteme für die Hydrierung von Ketonen übersteigen beispielsweise eine TON von 2.400.000.[111]

Ein weiteres Problem der homogenen Katalyse ist in der Regel die Abtrennung von Produkten aus dem Reaktionsgemisch. In der oben beschriebenen Reaktion ist dies nicht der Fall, da der Siedepunkt des Methanols deutlich unterhalb der Reaktionstemperatur liegt und es somit kontinuierlich aus der Reaktionsmischung verdampfen kann. In der heterogenen Katalyse sind Reaktanden und Produkte nur kurz in Kontakt mit dem Katalysator und müssen nicht aufwendig abgetrennt werden.



Schema 7: Grundlegender Katalysezyklus der CO_2-Hydrierung am Katalysator [(Triphos)Ru(TMM)] über die Intermediate Ameisensäure und Formaldehyd zu Methanol. [(Triphos)Ru(η²-O_2CH)(THF)] stellt das katalytisch aktive Intermediat dar. THF = Tetrahydrofuran, TMM = Trimethylenmethan, Triphos = 1,1,1-tris(diphenylphosphinomethyl)ethan.[110]

Insgesamt betrachtet liefert das Feld der homogenen Katalyse interessante Ansätze, welche viele Reaktionsverläufe deutlich vereinfachen könnten. In Bezug auf industrielle Produktionswege können die Katalysatoren jedoch oft nicht mit denen der heterogenen Verfahren mithalten. Eine Betrachtung aus der LCA-Perspektive wäre dennoch interessant, um abschätzen zu können, ob sich die Vorteile durch geringere Energieaufwendungen in der Produktion mit dem oftmals verbundenen Mehraufwand der Katalysatorsynthese und Produktaufreinigung ausgleichen. Für die folgende ökobilanzielle Betrachtung werden allerdings nur die in Kapitel 4.1–4.3 beschriebenen chemischen Verfahren herangezogen.

5 LCA von CCU für die Produktion von Basischemikalien

Die chemische Industrie ist nach wie vor auf fossile Rohstoffe für die Produktion von Basischemikalien und den entsprechenden Folgeprodukten angewiesen. Im Rahmen der Defossilisierung aller wirtschaftlichen Sektoren muss daher gefragt werden, ob und auf welchem Wege die chemische Basisindustrie in der Lage ist, einen industriellen Wandel – weg von fossilen Energieträgern, hin zu erneuerbaren Rohstoffen und Energien – zu vollziehen. Die Produktionsprozesse von fünf Basischemikalien (Methan, Methanol, Ethylen, Propylen und Benzol) aus Carbon-Capture-and-Utilization-Verfahren (CCU) werden ökobilanziell betrachtet. Der errechnete Energie- und Ressourcenverbrauch und die daraus entstehenden Emissionen und potenziellen Umweltwirkungen werden mit den Ergebnissen der entsprechenden petrochemischen Prozesse verglichen und im Hinblick auf deren Umweltwirkungen diskutiert.

5.1 Ziel und Untersuchungsrahmen

5.1.1 Produktsystem, Systemgrenze, Funktionelle Einheit

Ziel der Arbeit ist es, herauszufinden, ob die Produktion von Basischemikalien durch CCU-Prozesse im Vergleich zu petrochemischen Verfahren einen ökologischen Vorteil bietet oder ob es durch CCU-Prozesse zu Nachteilen und Zielkonflikten durch unerwünschte Umweltwirkungen kommen kann. Das Produktsystem (Abbildung 11) beinhaltet ein Vordergrund- und ein Hintergrundsystem. Im Vordergrundsystem sind die CO_2-bereitstellenden Prozesse durch CO_2-Abscheidung, bzw. DAC und die H_2-bereitstellenden Prozesse aus Elektrolyse verortet. CO_2 aus der Umgebungsluft und Abgase aus Punktquellen sowie Rohmaterialien und Primärenergie werden dem System von außerhalb der Systemgrenzen zugeführt. Die produzierten Stoffe CO_2 und H_2 werden durch die entsprechende Synthese in das gewünschte CCU-Produkt umgewandelt. Die CCU-Produkte hier sind Methan, Methanol, Ethylen, Propylen und Benzol, die funktionelle Einheit (FE) beträgt 1000 kg des jeweiligen Produkts. Im Hintergrundsystem werden Strom und Wärme bereitgestellt sowie Infrastruktur und Hilfsmaterialen herangezogen. Die Herstellung der CCU-Produkte berücksichtigt alle benötigten Vorketten und schließt diese innerhalb der

Systemgrenze ein. Da der weitere Lebensweg einer Basischemikalie aufgrund vielfältiger Anwendungsmöglichkeiten nicht weiterverfolgt werden kann, endet das betrachtete System nach der Produktion (Cradle-to-Gate, C2G).

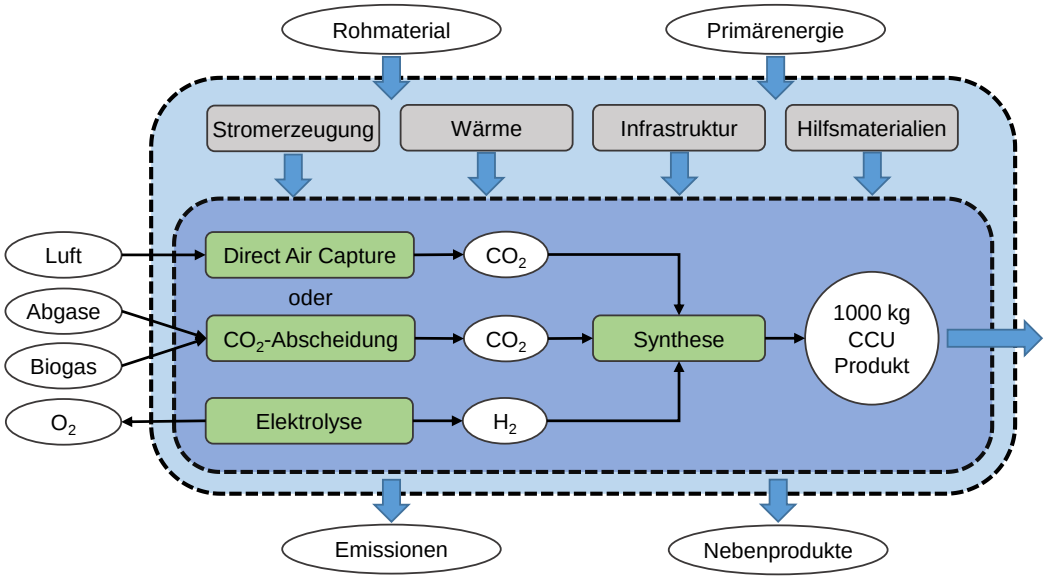


Abbildung 11: Produktsystem mit Vordergrund- und Hintergrundprozessen. Die Vordergrundmodule (grün) und Hintergrundmodule (grau) beziehen jeweils Energie und Materialien und erzeugen (Neben-)Produkte und Emissionen. FE = 1000 kg CCU-Produkt.

5.1.2 Wirkungskategorien, LCIA Methode

Zur Beurteilung der Umweltwirkungen werden insgesamt acht Wirkungskategorien herangezogen, welche im Kontext von CCU bedeutende Risikofaktoren darstellen:

1. Treibhauspotenzial über einen Zeithorizont von 100 Jahren (Global Warming Potential, GWP_{100}), angegeben in kg CO_2-eq. zur Klassifizierung der direkten und indirekten anthropogenen Erwärmung der Erdatmosphäre (nach IPCC, 2013).[112]
2. Versauerungspotenzial (Acidification Potential, AP), angegeben in kg SO_2-eq. durch Senkung des pH-Wertes aquatischer und terrestrischer Systeme. Als Schutzgut gilt die „Struktur und Funktion von Ökosystemen“ (nach *Hauschild & Wenzel*, 1998).[113]
3. Eutrophierungspotenzial (EP), angegeben in kg PO_4-eq. durch übermäßige Nährstoffeinträge in Gewässer und Böden, welches durch primär verstärktes Pflanzenwachstum das Gleichgewicht bestehender Ökosysteme beeinflussen kann (nach *Hejungs et al.*, 1992).[114]

4. Kumulierter Energieaufwand (KEA), angegeben in GJ, der die „Gesamtheit des primärenergetisch bewerteten Aufwands“ darstellt (nach VDI 4600, 2012).[115]
5. Stratosphärisches Ozonabbaupotenzial (Ozone Depletion Potential, ODP), angegeben in g CFC11-eq. für Substanzen, die zum katalytischen Abbau von stratosphärischem Ozon führen (nach WMO, 2010).[116]
6. Feinstaubbelastung (Particulate Matter, $PM_{2.5}$), angegeben in g $PM_{2.5}$-eq., welche inhalierbare und lungengängige Partikel umfasst, die „toxische Schädigungen von Menschen“ herbeiführen können (nach JRC, 2011).[117]
7. Landnutzung (Land Use, LU), angegeben in m², über verschiedene Hemerobie-Stufen bewertet, stellt die „Naturbelassenheit“ als Schutzgut für Landflächen als quantifizierbare Einheit dar (nach *Fehrenbach et al.*, 2015).[118]
8. Wassernutzung (Water Use, WU), angegeben in m³, als Indikator auf der Sachbilanzebene, der die Süßwassermenge umfasst, welche aus der Umwelt entnommen und in der Technosphäre eingesetzt wird.

Die Zuordnung der einzelnen Emissionen, Stoff- und Energieströmen zu Wirkungskategorien erfolgt auf Basis einer aktuellen methodischen Ausarbeitung des Umweltbundesamtes und bezieht sich immer auf die funktionelle Einheit (FE).[28] Aggregationen verschiedener Stoffe in einer Wirkungskategorie erfolgen durch eine Gewichtung mit den dort angegebenen Charakterisierungsfaktoren.

5.1.3 Allokationsregeln

Als funktionelle Einheit wurden 1000 kg des jeweils produzierten CCU-Produktes gewählt. Das bedeutet, dass im Sinne der Aufteilung von Umweltlasten (Allokation) auf eine Systemraumerweiterung und eine Betrachtung von Koppelprodukten verzichtet wird. Da für das Modul CO_2-Quelle (vgl. Tabelle 4) drei verschiedene Punktquellen in Betracht kommen, ein Zementwerk, eine Müllverbrennungsanlage (Koppelprodukt Energie) und eine Biogasanlage (Koppelprodukt Methan), wären für unterschiedliche Szenarien unterschiedliche Koppelprodukte zu betrachten. Das vom CCU-Prozess aufgenommene CO_2

wird im Sinne einer 100:0 Allokation als „Abfall zur Beseitigung“ gewertet. In den chemischen Prozessen fallen allerdings auch Nebenprodukte an, die ebenfalls einen Nutzen in der Industrie haben. Daher wird für die Aufteilung der Lasten zwischen dem CCU-Hauptprodukt und den entstehenden Nebenprodukten eine ökonomische Allokation vorgenommen. Die Marktpreise in Tabelle 3 sind 10-jährige Durchschnittswerte, die zeitlich begrenzte Schwankungen der Preise ausgleichen.

Tabelle 3: Marktpreise relevanter Chemikalien der EU28 Staaten von 2009–2018. Mengengewichtete Mittelwerte der Exporte und Importe innerhalb und außerhalb Europas.[119]

	EU28 Intra		EU28 Extra		Mengengewichtet
Stoff	Export	Import	Export	Import	**Preis (€/1000 kg)**
Methan	461	558	431	333	412
Methanol	286	300	380	262	277
Ethylen	907	909	848	947	908
Propylen	861	879	718	865	868
Benzol	730	770	713	781	751
Toluol	660	659	676	752	663
Alkylbenzole	1.810	1.674	2.137	1.423	1.619
o-Xylol	762	810	812	800	790
m-Xylol	1.232	891	817	1.064	985
p-Xylol	889	855	793	900	857
Ethylbenzol	828	832	716	787	829
Wasserstoff	2.585	1.342	7.860	4.519	1.800
Sauerstoff	98	99	374	153	104
Aliphaten	879	807	1.453	476	572

Die ökonomische Allokation ist deshalb sinnvoll, weil die Produktion von Chemikalien oft aus wirtschaftlichen Interessen betrieben wird. Ein Produkt, dem ein Nutzen und ein Wert zugeschrieben wird, sollte demnach auch einen Anteil der Produktionslasten tragen. Dies gilt ebenfalls für Sauerstoff, dem Co-Produkt der Elektrolyse zur Wasserstofferzeugung. In der Sensitivitätsprüfung wird Sauerstoff kein Wert zugeschrieben und die Lasten nur dem Wasserstoff zugeordnet. Die Lasten der Hintergrundsysteme werden voll und ganz den CCU-Produkten zugeordnet, da die Bereitstellung von Energie und Infrastruktur den CCU-Prozessen dient. Daher trägt die CO_2-Quelle theoretisch die volle Last der Emission, wofür dem CCU-Prozess eine Anrechnung im Sinne einer negativen Emission für die Aufnahme von CO_2 erteilt wird. Die Lasten für die Abscheidung trägt der jeweilige CO_2-Abscheidungsprozess und damit das

CCU-Produkt. Da die Anrechnung oftmals dazu führt, dass Produkte Netto-Negativemissionen aufweisen, wenn sie nicht bis zum Lebenszyklusende verfolgt werden (Cradle-to-Gate), wird ebenfalls der Einfluss einer idealisierten End-of-Life-Emission (EoL) durch vollständige Verbrennung des CCU-Produkts zu CO_2 (ohne Betrachtung der Nutzungsphase) dargestellt. Die Anrechnung der CO_2-Aufnahme entspricht rechnerisch der EoL-Emission, da sich durch die ökonomische Allokation sonst Verzerrungen der GWP_{100}-Daten ergeben würden.[120,121]

5.1.4 Daten und grundlegende Annahmen

Um ein geeignetes Modell zu erstellen, sind konsistente und valide Daten von zentraler Bedeutung. Grundsätzlich wurde versucht Prozessdaten zu verwenden, welche in Pilotprojekten ermittelt wurden oder bereits aus kommerziell genutzten Anlagen verfügbar waren (siehe Kapitel 4). Da viele Daten nicht öffentlich zugänglich sind, wurden ebenfalls Prozesssimulationen herangezogen, welche in diversen Publikationen mit der Software Aspen Plus® erstellt wurden. Waren weder Praxisdaten noch Simulationen verfügbar, so wurden unter Berücksichtigung thermodynamischer und stöchiometrischer Größen eigene Berechnungen durchgeführt. Die in der Literatur betrachteten Prozesse mit einem niedrigen Entwicklungsstand (z. B. im Labormaßstab) dienten als Quelle für weitere Erwägungen zu möglichen Ausbeuten, verwendeten Katalysatoren und Konversionsraten der chemischen Prozesse. Die Daten der meisten Prozessmodule stammen aus der Ökobilanzdatenbank ecoinvent 3.4 und beinhalten alle relevanten Vorketten, die für die Bereitstellung der Materialien benötigt werden.[27]

Im Folgenden werden einige grundlegende Annahmen aufgeführt, die für die Interpretation der Ergebnisse bedeutend sind. Weitere Prozessparameter werden in Kapitel 5.2.3 beschrieben.

Strom: Verfügbare Stromquellen sind abhängig vom zeitlichen Betrachtungsrahmen. Daher wurden der deutsche Strommix 2014 sowie Szenarien für den deutschen Strommix in den Jahren 2030 (Anteil erneuerbarer Energie 72,4 %) und 2050 (Anteil erneuerbarer Energie 100 %) gemäß der „RESCUE“-Studie

des Umweltbundesamtes angesetzt.[122] Wird Strom aus Photovoltaik (PV) bereitgestellt, so handelt es sich um Freiflächen-PV-Anlagen. Die Bereitstellung von Windenergie erfolgt aus Offshore-Windkraftanlagen.

Hintergrundsysteme: Hilfsmaterialien und Rohstoffe für die Infrastruktur und Hintergrundsysteme werden mit dem heutigen Technologieentwicklungsstand betrachtet. Für die PV- und Windkraftszenarien wird ebenfalls mit dem heutigen Technologiestand für alle weiteren Prozessparameter gerechnet. In den Szenarien für die Jahre 2030 und 2050 ist gemäß der „RESCUE"-Studie ein geringerer Ressourcen- und Energieverbraucht aufgrund gesteigerter Recyclingquoten und eines höheren Anteils erneuerbarer Energieträger im Strommix zu erwarten, sodass die Hintergrundsysteme in diesen beiden Szenarien an den jeweilig prognostizierten Technologiestand angepasst werden.[122,123]

Transport: Es wurde kein geographischer Rahmen festgelegt. Die Herstellung von CCU-Produkten erfolgt im Modell „on-site" am Ort der CO_2-Abscheidung. Daher wird die Infrastruktur vernachlässigt, die für die Komprimierung der Gase und den Transport von CO_2 bzw. H_2 benötigt würde.

Infrastruktur: Der Einfluss der Produktionsinfrastruktur ist in vielen Ökobilanzen nur marginal und wird oftmals vernachlässigt. Erhöht sich der relative Anteil erneuerbarer Energieträger, so gehen fossile Emissionen zurück und die Bereitstellung der Infrastruktur fällt bei den Umweltwirkungen relativ betrachtet stärker ins Gewicht. Die Produktionsinfrastruktur wird in dieser Arbeit deshalb für alle Anlagen berücksichtigt, entsprechend ihrer Kapazität skaliert[124] und eine Auslastung von 8700 Stunden im Jahr angenommen. Die Energiebereitstellung erneuerbaren Stroms erfolgt in der Regel nicht kontinuierlich und in realen Anlagen könnten geringere Auslastungen auftreten, wenn der benötigte Strom nicht zwischengespeichert wird. Die notwendigen Speicher für den kontinuierlichen Betrieb der Anlagen sind in dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

Wärmeintegration: Einige Reaktionen der CCU-Prozesse sind exotherm und produzieren daher Abwärme. Die Abwärme wird im Sinne einer Wärmeintegration nutzbar gemacht und der CO_2-Abschiedung zugeführt, welche

Wärme für die Desorption von CO_2 aus dem Adsorbens benötigt. Dadurch reduziert sich der Wärmebedarf der CO_2-Abscheidungs-Module aus externen Quellen, in diesem Modell durch Erzeugung aus Erdgas. Überschüssige Wärme (sofern vorhanden) wird im Modell in Strom umgewandelt und ebenfalls an die Prozesse geleitet, sodass der externe Strombedarf gesenkt werden kann.

MEA-Emissionen: Emissionen aus der MEA-Wäsche sind in einigen Publikationen verfügbar[43,45,47], allerdings sind viele der Stoffe noch keiner Wirkungskategorie zugeordnet. Die stickstoffhaltigen Verbindungen als „Non-Methane Volatile Organic Compounds“ (NMVOC) wurden daher der Kategorie $PM_{2.5}$ mit einem Charakterisierungsfaktor von 0,012 zugeteilt.[125]

5.1.5 Limitierungen

Da CCU-Prozesse in der Regel nicht weit entwickelt sind und kein Zugang zu Emissionsdaten zu erhalten ist, entstehen im Modell keine direkten Emissionen in den Syntheseprozessen. Durch die Modellierung von Purge-Gas-Verbrennungen, könnte ein Einfluss auf das Treibhauspotenzial simuliert werden, allerdings fehlen spezifische Emissionsdaten, um auch Versauerung, Eutrophierung, Ozonabbau und Feinstaubbelastung abzubilden.

Im Bereich der fossilen Referenzsynthesen sind Flächen- und Wasserbedarf nicht hinreichend abgebildet. Ein Vergleich in den Wirkungskategorien Landnutzung und Wassernutzung ist daher nur bedingt möglich.

Die Wärmeintegration fand ohne Berücksichtigung von Temperaturniveaus statt, sodass eine verlustfreie Wärmenutzung von 100 % angenommen wird. Eine Unterscheidung in Wasserdampf mit Temperaturen von >200 °C und <200 °C, mit entsprechenden Wirkungsgraden für die Nutzung für Prozesse oder als Fernwärme, konnte mangels fehlender Daten nur in der Methanisierung vorgenommen werden.

Prozess- und Kühlwasserbedarf der CCU-Prozesse wurden aufgrund fehlender Daten nicht berücksichtigt und sind damit nicht im Wasserverbrauch mit

einbezogen. Der Kühlwasserbedarf kann in diesem Fall jedoch vernachlässigt werden, da durch die Wärmeintegration ein geschlossener Kühlwasserkreislauf angenommen wird.

5.2 Sachbilanz

5.2.1 Umberto-Modell

Die Modellierung aller Stoff- und Energieflüsse erfolgte mit Hilfe der Ökobilanzierungs-Software Umberto®. Das Modell lässt sich grob in sechs relevante Bereiche unterteilen (Abbildung 12):

1. Stromerzeugung zur Bereitstellung elektrischer Energie aus verschiedenen Quellen. Darunter zählen der deutsche und europäische Strommix, Wind- und Solarkraft, Wasserkraft, Geothermie und andere.
2. Wasserstofferzeugung aus AE, PEM und HTE.
3. CO_2-Bereitstellung durch DAC sowie aus Biogasaufbereitung, Müllverbrennung und Zementwerk mit MEA-Wäsche.
4. CCU-Syntheseprozesse, die eigene Infrastruktur- und Katalysatorproduktionen enthalten sowie die chemischen Anlagen, um CO_2 und H_2 zu Basischemikalien umzuwandeln.
5. Hintergrundsysteme, die Infrastruktur, Wärme und weitere Hilfsmaterialien bereitstellen.
6. Biomassebereitstellung zur Herstellung von Biomethan, bei der ebenfalls anfallendes CO_2 genutzt werden kann. Der Bereich liegt mit den gewählten Allokationsregeln außerhalb der Systemgrenze.

Die einzelnen Abschnitte des Modells sind miteinander verknüpft, sodass das gesamte Netzwerk oder auch nur einzelne Teile dessen berechnet werden können. Die Berechnung erfolgt ausgehend von der Output-Seite, indem eine definierte Ausgabe (FE = 1000 kg) eingestellt und der Material- und Energiebedarf entlang des Netzes bis hin zu allen notwendigen Input-Stellen ermittelt wird. Welche Strom-, CO_2- und H_2-Quelle für das jeweilige Produkt berechnet werden soll, wird über Parameter eingestellt. Alle berechneten Inputs und Outputs werden in der Sachbilanz berücksichtigt und über das Allokations- und

Bewertungssystem den jeweiligen Wirkungskategorien zugeordnet. Eine detaillierte Auflistung aller verwendeten ecoinvent-Module findet sich im Anhang im Kapitel „Technisches Verzeichnis“.

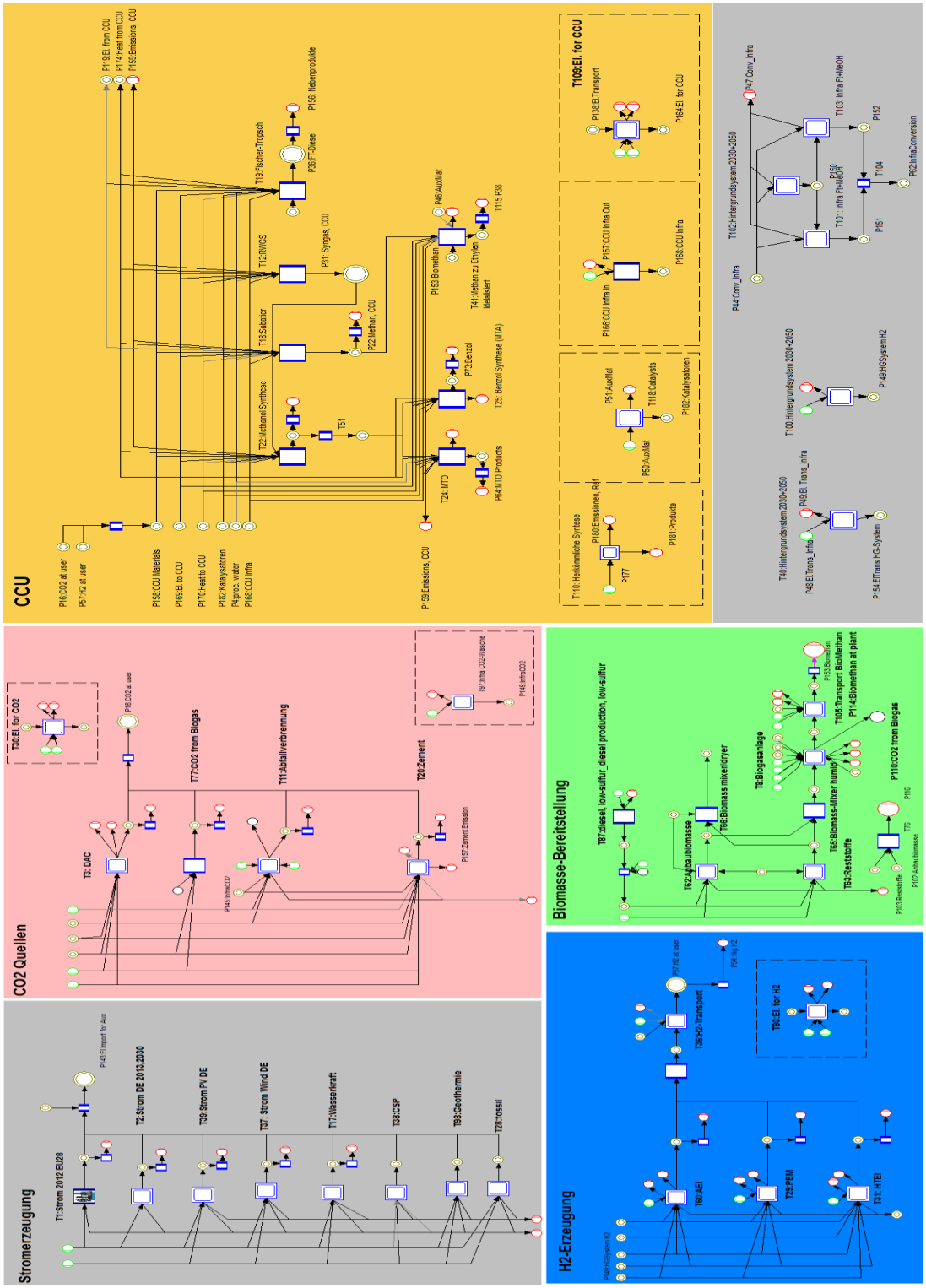


Abbildung 12: Umberto-Modell mit Stromerzeugung (grau, links), Wasserstofferzeugung (blau), CO_2-Bereitstellung (rosa), Biomasse (grün), CCU-Prozessen (orange) und Hintergrundsystemen (grau, rechts).

5.2.2 Szenarien

Durch die Auswahl der verschiedenen Module im Umberto-Modell lassen sich einzelne Szenarien zusammenstellen und berechnen. Die in Tabelle 4 angegebene Auswahl verschiedener Module für CCU-Produkt, CO_2-Bereitstellung, Wasserstoffproduktion und einer Stromquelle entspricht einer möglichen Gesamtzahl von 300 Szenarien. Im Rahmen dieser Arbeit werden einige relevante Basisszenarien für die Produktion von Methanol berechnet, die als Grundlage für die Modulauswahl der Basisszenarien der Produktion von Methan via Sabatier, Ethylen und Propylen via MTO und Benzol via MTA dienen (siehe Tabelle 5).

Tabelle 4: Auswahl der Module für verschiedene Szenarien.

CCU-Produkt	CO_2-Bereitstellung	Wasserstoffproduktion	Stromquelle
Methanol	Direct Air Capture	Alkalische Elektrolyse	Strommix 2014
Methan	Biogas	Polyelektrolytmembran	Strommix 2030
Ethylen	Müllverbrennungsanlage	Hochtemperatur Elektrolyse	Strommix 2050
Propylen	Zementwerk		Windkraft
Benzol			Photovoltaik

Die Szenarien S1–S10 bilden die Methanolsynthese ab. In den ersten fünf Szenarien wird die Stromquelle variiert, in S5–S7 die Wasserstoffquelle und in S7–S10 die CO_2-Quelle. Basisannahmen sind dabei jeweils AE für die Wasserstoffproduktion und Strom aus Windkraft. Die Bereitstellungspfade der anderen Chemikalien werden in jeweils zwei Szenarien behandelt, in dem der Strom aus Windkraft bezogen und Wasserstoff über AE produziert wird, während als CO_2-Quelle im einen Fall das DAC und im anderen Fall ein Zementwerk fungiert. Für Methan, Ethylen, Propylen und Benzol ergeben sich die Szenarien S11–S18. Alle Szenarien sind in Tabelle 5 zusammengefasst:

Tabelle 5: Szenarienauswahl über verschiedene Bereitstellungspfade.

CCU-Produkt	CO_2-Quelle	Wasserstoff	Stromquelle	Szenario
Methanol	DAC	AE	Strommix 2014	S1
			Strommix 2030	S2
			Strommix 2050	S3
			Photovoltaik	S4
			Windkraft	S5
		PEM	Windkraft	S6
		HTE	Windkraft	S7
	Biogas	AE	Windkraft	S8
	MVA			S9
	Zementwerk			S10
Methan	DAC	AE	Windkraft	S11
	Zementwerk			S12
Ethylen	DAC	AE	Windkraft	S13
	Zementwerk			S14
Propylen	DAC	AE	Windkraft	S15
	Zementwerk			S16
Benzol	DAC	AE	Windkraft	S17
	Zementwerk			S18

5.2.3 Prozessparameter

Einige wichtige Parameter der Umberto-Module sind in Tabelle *6* zusammengefasst und nach Elektrolyse, CO_2-Abscheidung und CCU-Prozessen gegliedert. Negative Werte beim Wärmebedarf bedeuten einen Netto-Wärmeexport, der im Falle der CCU-Prozesse in die Wärmeintegration fließt und bei der Elektrolyse als ungenutzte Abwärme verloren geht. Kapazitäten und Katalysatormengen sind entsprechend skaliert und auf die Lebenszeit der Anlagen angepasst (Elektrolyse = 20 Jahre, CCU = 50 Jahre). Weitere Parameter und technische Betriebsdaten der Syntheseprozesse finden sich im Anhang im Kapitel „Technisches Verzeichnis“.

Tabelle 6: Ausgewählte Prozessparameter für Module in Umberto.

Elektrolyse	**Produkt**	**Kapazität (t/a)**	**Elektrolyseleistung (kW)**	**Wirkungsgrad (%)**	**El. Energie (kJ/kg)**	**Wärme (kJ/kg)**
AE	H_2	233	6.000	67*	177.433	-58.069
PEM	H_2	178	6.000	67*	190.033	-70.157
HTE	H_2	31	6.000	82*	151.548	25.516
CO_2-Capture	**Produkt**	**Kapazität (t/a)**	**CO_2-Konzentration (%)**	**MEA-Verlust (kg/t)**	**El. Energie (kJ/kg)**	**Wärme (kJ/kg)**
DAC	CO_2	1.800	0,04	-	2.520	7.920
Biogasanlage	CO_2	9.314	40	1,74	27	2.840
MVA	CO_2	1.880.000	15	1,50	69	3.264
Zementwerk	CO_2	1.880.000	20	2,00	52	3.134
CCU-Prozess	**Produkt**	**Kapazität (t/a)**	**Katalysator**	**Katalysatormenge (t)**	**El. Energie (kJ/kg)**	**Wärme (kJ/kg)**
Sabatier	Methan	5.146	Ni/Al_2O_3	1,60**	863	-17.818
Methanol Synth.	Methanol	626.908	$CuO/ZnO/MgO/Al_2O_3$	156**	1.188	-1.400
MTO	Ethylen/Propylen	2.007.500[a]	SAPO-34	45**	1000***	-820***
MTA	Benzol	2.007.500[a]	HZSM-5	45**	1000***	-820***

*) Bezogen auf Heizwert

**) Bezogen auf Kapazität

***) Methanol Input

5.3 Ergebnisse der Wirkungsabschätzung (LCIA)

Die LCIA wird in drei Schritten ausgewertet: Als erstes erfolgt die Bestimmung der Referenzwerte und anschließend die Ermittlung der Ergebnisse für die Basisszenarien S1–S10 der Methanolproduktion, in welchen der Einfluss verschiedener H_2-, CO_2- und Stromquellen analysiert wird. Als letztes werden alle Produkte in jeweils zwei Szenarien mit verschiedenen CO_2-Quellen hinsichtlich ihrer Umweltwirkungen miteinander verglichen.

5.3.1 Referenzsysteme

Die Auswahl der Referenzsysteme erfolgte auf Basis verfügbarer ecoinvent-Daten. Für Methan wurde als Referenz die Produktion aus Erdgas in Deutschland gewählt, für Methanol die Produktion aus Methan via Synthesegas im globalen Durchschnitt, für Ethylen und Propylen die Produktion aus Naphtha durch Dampfreformierung im europäischen Durchschnitt und für Benzol die Herstellung durch katalytische Reformierung im europäischen Durchschnitt.[126,127] Dabei handelt es sich um Prozessmodule, welche die gesamte Vorkette der Herstellung umfassen und in welchen die Nutzungs- und End-of-Life-Phasen unberücksichtigt bleiben. Die Ergebnisse der LCIA der fossilen Referenzen in allen acht Wirkungskategorien sind in Tabelle 7 zusammengefasst. Eingeklammerte Werte sind aufgrund von Annahmen und fehlenden Prozessdaten nur bedingt aussagekräftig (vgl. Kapitel 5.1.5).

Tabelle 7: Umweltwirkungen der fossilen Referenzen.

Wirkungskategorie	Methanol	Methan	Ethylen	Propylen	Benzol	Einheit/FE
GWP_{100}	627	188	1.432	1.473	1.828	kg CO_2-eq.
AP	1,97	3,90	3,90	3,97	6,29	kg SO_2-eq.
EP	0,52	0,09	0,35	0,34	0,44	kg PO_4-eq.
KEA	31	43	62	64	63	GJ
ODP	0,40	0,09	0,05	0,05	0,06	g CFC-11-eq.
$PM_{2.5}$	1.639	2.268	3.353	3.339	4.907	g $PM_{2.5}$-eq.
LU	2,96	(0,71)	(0,09)	(0,10)	(0,11)	m^2
WU	694	(65)	(36)	(36)	(93)	m^3

5.3.2 Basisszenarien Methanol (S1–S10)

Im Folgenden wird zunächst auf die Beiträge der Module Strom, Elektrolyse, CO_2-Quelle und Hintergrundsysteme zu den Wirkungskategorien eingegangen. Anhand der acht Wirkungskategorien werden alle Ergebnisse genau, in den folgenden Kapiteln dann jeweils nur ausgewählte, besonders bedeutende Ergebnisse herausgegriffen. Eine tabellarische Übersicht aller Ergebnisse mit einer detaillierten Aufschlüsselung der einzelnen Beiträge (vgl. Tabelle 8) findet sich im Anhang im Kapitel „LCIA Ergebnistabellen“.

Der Einfluss verschiedener **Stromquellen** ist durch S1–S5 abgebildet. Im Allgemeinen werden die höchsten Umweltwirkungen in fast allen Kategorien beim Strommix im Jahr 2014 durch den hohen Anteil fossiler Energieträger verursacht, gefolgt vom Strommix 2030. Die Energieversorgung über Freiflächen-PV-Anlagen sticht vor allem durch einen hohen Flächenverbrauch für die Elektrolyse heraus und liegt bei den übrigen Wirkungskategorien im Bereich des Strommixes 2030. Die geringsten Umweltwirkungen kommen durch den Strommix 2050 sowie Strom durch Windenergie zustande. In allen folgenden Szenarien wird Windenergie als Basisannahme für die Stromquelle eingesetzt.

Der Einfluss der verschiedenen **Elektrolysetechnologien** in S5–S7 lässt keine signifikanten Unterschiede zwischen AE, PEM und HTE in der Ökobilanz erkennen. In allen Wirkungskategorien liegen die Werte in der gleichen Größenordnung und unterscheiden sich nur um wenige Prozent. Lediglich beim AP liegen die Ergebnisse der AE aufgrund des hohen Beitrags zur Infrastruktur etwa doppelt so hoch wie die Werte bei der PEM/HTE. Im Vergleich zu den Beiträgen der anderen Prozesse entfällt auf die Elektrolyse nur ein geringer Teil der Umweltlasten, solange sie mit Windenergie betrieben wird. Der größte Einfluss wird beim KEA aufgrund des hohen Energiebedarfs bewirkt. Da keine signifikanten Unterschiede bei den einzelnen Elektrolysetechnologien auftreten, wird für die folgenden Szenarien als Basisannahme die AE als bisher am weitesten entwickelte Elektrolysetechnologie betrachtet.

Die **CO_2-Quelle** beeinflusst die Ergebnisse deutlicher als die Auswahl der Elektrolysetechnologie. Im Allgemeinen treten die größten Umweltlasten in fast allen Wirkungskategorien beim DAC auf. Die Bereitstellung von CO_2 aus Biogas (S8) sticht etwas beim ODP und $PM_{2.5}$ hervor sowie beim LU anteilig die CO_2-Abscheidung durch den Biomasseanbau. Die Ergebnisse für CO_2 aus MVA (S9) und Zementwerk (S10) unterscheiden sich kaum und verursachen im Vergleich zu den anderen CO_2-Quellen die geringsten Emissionen. In den Ergebnissen der Szenarien S8 und S9 ist jedoch ein Teil der Lasten durch den CO_2-bereitstellenden Prozess enthalten, weshalb die gewählten Allokationsregeln nicht eingehalten werden (siehe Kapitel 5.1.3). Eine weitere Diskussion dessen folgt in Kapitel 0. Aus diesem Grund werden für die Szenarien der weiteren Produkte jeweils CO_2 aus DAC und aus Zementwerken im Vergleich betrachtet.

Die Bereitstellung von Energie und Rohstoffen für Hilfsmaterialien im **Hintergrundsystem** liefert in keiner Wirkungskategorie signifikante Beiträge und wird daher nicht weiter diskutiert.

In Tabelle 8 sind die Modulbezeichnungen aufgelistet, die Beiträge zu den behandelten Gesamtmodulen liefern. Im Folgenden wird nur auf die Gesamtmodule eingegangen, die Ergebnisse für die einzelnen Module finden sich im Anhang im Kapitel „LCIA Ergebnistabellen“.

Tabelle 8: Auflistung der Beiträge einzelner Module zu den Gesamtmodulen CCU-Prozess, CO_2-Abscheidung, Elektrolyse und Hintergrundsystem.

CCU-Prozess	CO_2-Abscheidung	Elektrolyse	Hintergrund
CCU Strom	CO2 Strom	H2 Strom	Strom
CCU Produktion	CO2 Produktion	H2 Produktion	Hilfsmaterialien
CCU Infrastruktur	CO2 Infrastruktur	H2 Infrastruktur	
CCU Katalysator	CO2 Anrechnung Wärme		

Das **Treibhauspotenzial** (GWP_{100}) für S1–S10 ist in Abbildung 13 zusammengestellt. In jedem Szenario erhält das Methanol eine Anrechnung („Gutschrift“, G) von 1375 kg CO_2 (negativ, grüner Balken) für die Aufnahme von CO_2 aus dem abgebenden Prozess gemäß der 100:0 Allokation. Auf Seite der

Emissionen (E) ist die EoL-Emission durch die Verbrennung von 1000 kg Methanol bereits berücksichtigt, welche 1375 kg CO_2 am Lebensende freisetzen würde (ohne Berücksichtigung der Nutzungsphase) und damit die Anrechnung ausgleicht. Die Netto-Emission ist durch die Summe (S) aus Emission und Anrechnung als roter Balken dargestellt, in dem die EoL Phase nicht berücksichtigt ist. Im Vergleich zum Referenzwert von 627 kg CO_2-eq./FE, liegen die Szenarien S3–S10 im Bereich von -1240–269 kg CO_2-eq./FE unterhalb der fossilen Emissionswerte. Werden die Emissionen des Methanols am Lebensende durch Verbrennung zu CO_2 berücksichtigt, so existiert kein Szenario, dass eine netto-negative CO_2-Bilanz aufweist (Emissionsbalken alle positiv). Wird berücksichtigt, dass bei der fossilen Referenz ebenfalls EoL-Emissionen anfallen, so beträgt der Referenzwert 2002 kg CO_2-eq./FE.

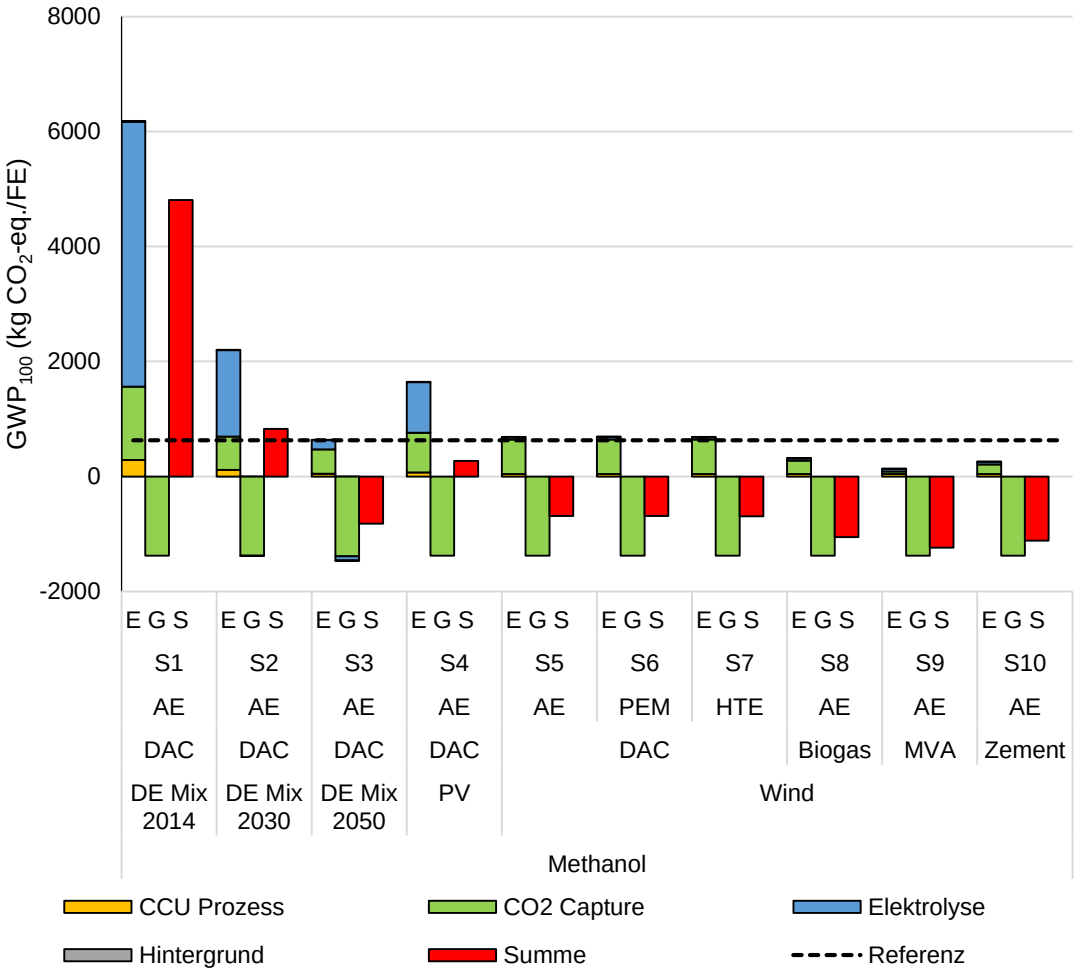


Abbildung 13: Treibhauspotenzial (GWP_{100}) der Szenarien S1–S10 für die Methanolsynthese. E = Emissionen, G = „Gutschrift“ durch CO_2-Aufnahme, S = Summe aus Emissionen und „Gutschrift“ ohne CO_2-Freisetzung am Lebensende. Die Linie gibt den Referenzwert wieder, unterhalb derer der CCU-Prozess einen Vorteil gegenüber der herkömmlichen Synthese erlangt.

Beim **Versauerungspotenzial** (AP, vgl. Tabelle 16) liegen die Szenarien S1–S4 mit 5–20 kg SO_2-eq./FE weit über dem Referenzwert von 2 kg SO_2-eq./FE. Auch wenn die Energie durch den Strommix im Jahr 2050 bereitgestellt wird, liegen die Emissionen 2,5-fach höher, als bei der Referenz. Die Szenarien S5–S10 liegen im Bereich 1,6–2,3 kg SO_2-eq./FE und damit nahe dem Referenzwert. In S5–S7 werden etwa ein Viertel der Emissionen durch den CCU-Prozess verursacht, die Hälfte durch die CO_2-Abscheidung und ein weiteres Viertel durch Elektrolyse. Bei S8–S10 sind die Anteile der Module etwa gleich verteilt, merkliche Unterschiede ergeben sich bei den CCU-Verfahren daher nicht.

Beim **Eutrophierungspotenzial** (EP, vgl. Tabelle 17) sind die Ergebnisse dem Versauerungspotenzial sehr ähnlich. In den Szenarien S1–S4 übersteigen sie die Referenz von 0,5 kg PO_4-eq./FE um einen Faktor 3 (S3) bis Faktor 52 (S1). In den Szenarien S5–S10 liegen die Ergebnisse zwischen 0,7 kg PO_4-eq./FE (S10) und 1,0 kg PO_4-eq./FE (S8) und damit alle über dem Referenzwert.

Der **Kumulierte Energieaufwand** (KEA, vgl. Tabelle 18) ist in S1 um den Faktor 3 größer, als die Referenz mit 31 GJ/FE. Die Szenarien S3 und S9 liegen mit 19 GJ/FE und 29 GJ/FE knapp unterhalb, die Szenarien S2, S4–S8 und S10 mit 32–54 GJ/FE oberhalb der Referenz. Den größten Beitrag liefert die Elektrolyse mit 27–30 GJ/FE in den Windstromszenarien. Insgesamt ist der Beitrag der CO_2-Abscheidung auf den KEA durch die Wärmeintegration deutlich reduziert und in S9 bei der Müllverbrennungsanlage nicht in der Bilanz enthalten, da der Wärmebedarf vollständig durch die thermische Verwertung von Abfällen gedeckt wird (siehe Kapitel 0).

Das **Ozonabbaupotenzial** (ODP, vgl. Tabelle 19) ist in der Referenz mit einem Wert von 0,40 g CFC11-eq./FE relativ gering. In den Szenarien S1–S8 wird das ODP der Referenz um mindestens das Dreifache übertroffen, hauptsächlich verursacht durch die CO_2-Abscheidung. Die Szenarien S9 und S10 liegen mit 0,08 g CFC11-eq./FE und 0,14 g CFC11-eq./FE deutlich niedriger

als die Referenz und Emissionen resultieren hauptsächlich aus Hintergrundprozessen.

Die **Feinstaubbelastung** ($PM_{2.5}$, vgl. Tabelle 20) ist in allen Szenarien ähnlich wie beim Versauerungspotenzial verteilt. Die Werte der Szenarien S1–S4 liegen deutlich oberhalb der Referenz mit 1639 g $PM_{2.5}$-eq./FE. Die Szenarien S5–S10 zeigen eine ähnlich hohe Belastung wie die Referenz, wobei S9 und S10 etwas geringere Beiträge im Bereich der CO_2-Abscheidung liefern.

Bei der **Landnutzung** (LU, vgl. Tabelle 21) sticht vor allem S4 deutlich heraus, da die Nutzung von PV-Anlagen einen vergleichbar hohen Flächenbedarf hat. Insgesamt werden dort 373 m²/FE Fläche in Anspruch genommen, davon 308 m²/FE für die Stromerzeugung der Elektrolyse und 46 m²/FE zur Stromerzeugung für die CO_2-Abscheidung. In S1 sind es zum Vergleich 101 m²/FE. Die Szenarien S5–S7 liegen im Bereich um die 7 m²/FE mit DAC, S8 durch die Biogasanlage bei 11 m²/FE und S9 und S10 bei 5 m²/FE. Der Referenzwert der Methanolsynthese auf fossiler Basis ist mit 3 m²/FE deutlich geringer.

Der **Wasserverbrauch** (WU, vgl. Tabelle 22) verhält sich ebenfalls ähnlich dem Versauerungspotenzial und der Feinstaubbelastung. S1–S4 benötigen insgesamt 12–31-mal so viel Wasser, wie die Referenz mit 694 m³ Wasser. S5–S10 liegen bei 693–1559 m³, wobei S9 und S10 ähnliche Werte wie der Referenzwert zeigen.

5.3.3 Treibhauspotenzial (GWP_{100})

In Abbildung 14 sind die Ergebnisse für das Treibhauspotenzial aller Szenarien für Produkte mit Strom aus Windkraft und Wasserstoff aus AE zusammengefasst.

Für jedes Produkt wurden zwei Szenarien berechnet, jeweils mit CO_2 aus DAC oder CO_2 aus einem Zementwerk. Auf die Ergebnisse der Szenarien S5 und S10 für Methanol wurde bereits im vorangegangenen Abschnitt eingegangen. Im Folgenden wird die Produktion von Methan, Ethylen, Propylen und Benzol

in den Szenarien S11–S18 im Vergleich zum jeweiligen fossilen Referenzprodukt betrachtet.

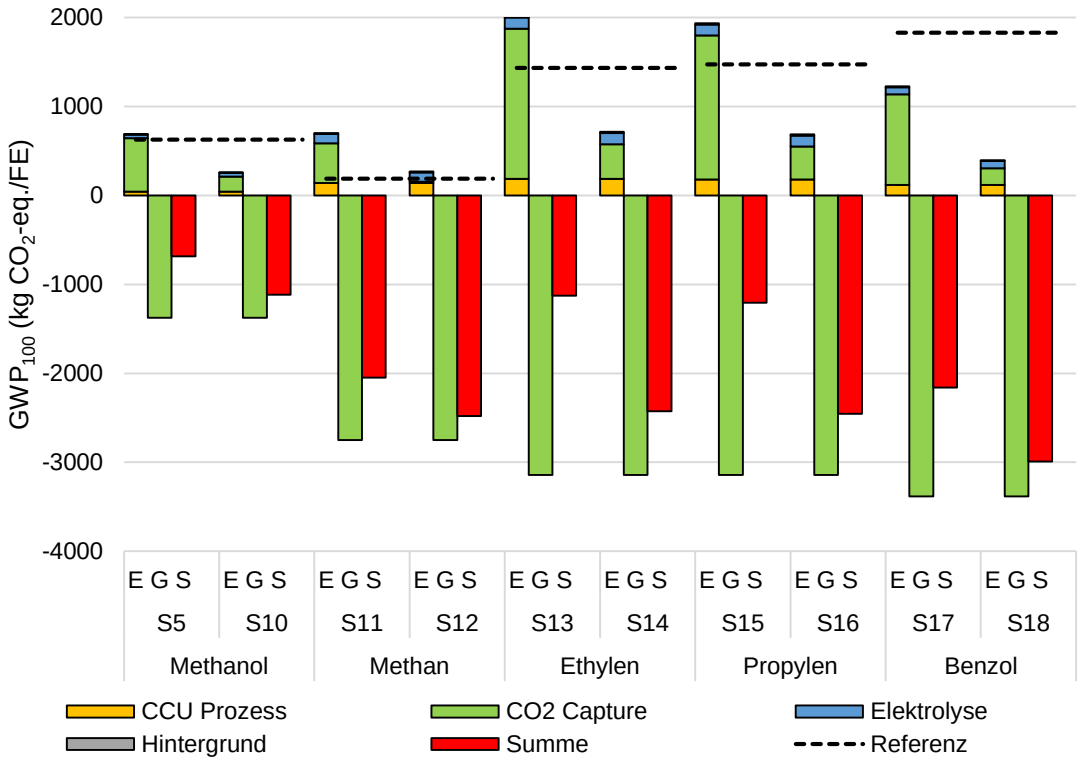


Abbildung 14: GWP_{100} für S5 und S10–S18. Vergleich des GWP_{100} von Methanol, Methan, Ethylen, Propylen und Benzol.

Für die Produktion von **Methan** durch CCU (S11 und S12) liegen die Emissionen bei 702 kg CO_2-eq./FE (DAC) bzw. 270 kg CO_2-eq./FE (Zementwerk). Der fossile Referenzwert beträgt 189 kg CO_2-eq./FE. Für die Herstellung von 1000 kg Methan werden 2750 kg CO_2 im Produkt gebunden, wodurch eine Netto-CO_2-Aufnahme von insgesamt -2047 kg CO_2-eq./FE (S11) und -2480 kg CO_2-eq./FE (S12) für die Lebensdauer des Methans resultiert.

Für **Ethylen** liegen die Emissionen der Referenzverfahren bei 1432 kg CO_2-eq./FE. Die Synthese von 1000 kg Ethylen durch CCU-Verfahren (S13 und S14) speichert 3142 kg CO_2 im Produkt und verursacht die größten Emissionen von 2105 kg CO_2-eq./FE (DAC) und 714 kg CO_2-eq./FE (Zementwerk). Insgesamt ergeben sich damit CO_2-Bilanzen von -1127 kg CO_2-eq./FE und -2428 kg CO_2-eq./FE.

Pro 1000 kg **Propylen** werden, wie beim Ethylen auch, 3142 kg CO_2 im Produkt gespeichert. Für S15 (DAC) ergeben sich Emissionen von 1936 kg CO_2-eq./FE und eine Bilanz von -1206 kg CO_2-eq./FE, für S16 (Zementwerk) ergeben sich Emissionen von 686 kg CO_2-eq./FE und eine Bilanz von -2456 kg CO_2-eq./FE. Der Referenzwert liegt bei 1473 kg CO_2-eq./FE.

Mit 1828 kg CO_2-eq./FE besitzt die Produktion von fossilem Benzol den höchsten Referenzwert. **Benzol** aus CCU-Verfahren speichert 3385 kg CO_2-eq./FE im Produkt, S17 (DAC) liefert Emissionen in Höhe von 1225 kg CO_2-eq./FE und S18 (Zementwerk) Emissionen in Höhe von 395 kg CO_2-eq./FE. Die Bilanzen liegen bei -2160 kg CO_2-eq./FE für S17 und -2990 kg CO_2-eq./FE für S18. S18 ist damit das Szenario mit der niedrigsten CO_2-Bilanz unter allen 18 betrachteten Szenarien..

Der Überblick der Szenarien in Abbildung 14 zeigt, dass die Emissionen hauptsächlich durch die CO_2-Abscheidung verursacht werden, wobei die Abscheidung durch DAC aufgrund des höheren Energiebedarfs deutlich höhere Emissionen verursacht als die Nutzung von CO_2 aus dem Zementwerk. Die CCU-Prozesse und Elektrolyse liefern nur geringe Beiträge zum GWP_{100}. Wird die EoL-Emission des zuvor gespeicherten CO_2 in die Bilanz mit einbezogen, so ergeben sich für keines der Szenarien netto-negative Emissionen.

Das maximale Treibhausgasreduktionspotenzial der CCU-Produkte im Vergleich zu den fossilen Referenzprodukten ist in Tabelle 9 gegeben. Die Entlastung berechnet sich aus dem Quotienten der fossilen Emissionen und der CCU-Produktemissionen inklusive der EoL-Emission (siehe Kapitel „Normierung“ im Anhang). Die Nutzungsphase der Produkte bleibt unberücksichtigt.

Tabelle 9: Maximales Treibhausgasreduktionspotenzial der CCU-Produkte.

CCU Produkt	**Methanol**	**Methan**	**Ethylen**	**Propylen**	**Benzol**
DAC-Szenario	**S5**	**S11**	**S13**	**S15**	**S17**
Max. Entlastung GWP_{100}	66 %	76 %	56 %	58 %	76 %

CCU Produkt	**Methanol**	**Methan**	**Ethylen**	**Propylen**	**Benzol**
Zementwerk-Szenario	**S10**	**S12**	**S14**	**S16**	**S18**
Max. Entlastung GWP_{100}	87 %	91 %	84 %	85 %	92 %

5.3.4 Versauerungspotenzial (AP)

In Abbildung 15 sind analog zum vorherigen Abschnitt die Ergebnisse für das Versauerungspotenzial aller Szenarien für Produkte mit Strom aus Windkraft und Wasserstoff aus AE zusammengefasst.

Für **Methan** liegt der Referenzwert des AP bei 3,9 kg SO_2-eq./FE. S11 mit DAC liegt mit einem Wert von 4,1 kg SO_2-eq./FE knapp oberhalb der Referenz, das AP in S12 mit CO_2 aus dem Zementwerk unterhalb der Referenz mit einem Wert von 3,2 kg SO_2-eq./FE.

Ethylen und **Propylen** liegen beim AP in allen Szenarien oberhalb des Referenzwertes von 4,0 kg SO_2-eq./FE. S13 (DAC) liefert den höchsten Wert von 7,3 kg SO_2-eq./FE, S14 (Zementwerk) einen Wert von 5,3 kg SO_2-eq./FE. Die Werte für Propylen in S15 und S16 liegen mit 7,0 kg SO_2-eq./FE und 5,1 kg SO_2-eq./FE ähnlich hoch.

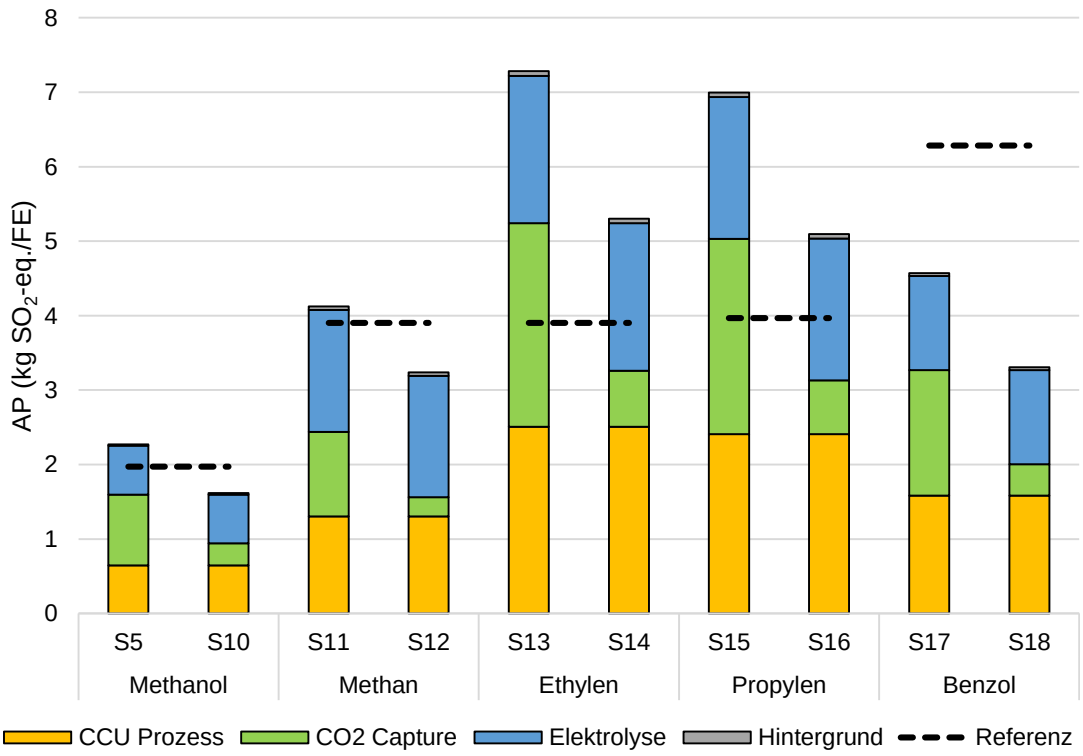


Abbildung 15: Versauerungspotenzial (AP) von S5 und S10–S18.

Bei **Benzol** liegen die Werte beider Szenarien unterhalb der Referenz von 6,3 kg SO_2-eq./FE. S17 (DAC) liefert Emissionen in Höhe von 4,6 kg SO_2-eq./FE und S18 (Zementwerk) Emissionen in Höhe von 3,3 kg SO_2-eq./FE.

Im Allgemeinen liegen auch hier die Emissionen durch CO_2 aus DAC höher als die durch CO_2 aus dem Zementwerk. In den Szenarien mit DAC sind die Anteile der Elektrolyse, CO_2-Abscheidung und CCU-Prozesse etwa gleich hoch. Bei den Szenarien mit CO_2 aus der Punktquelle Zementwerk verringert sich der Anteil der CO_2-Abscheidung, wodurch das Ergebnis des Versauerungspotenzials für Methanol, Methan und Benzol unterhalb der Referenzwerte liegt.

5.3.5 Eutrophierungspotenzial (EP)

In Abbildung 16 sind analog zu den vorherigen Abschnitten die Ergebnisse für das Eutrophierungspotenzial aller Szenarien für Produkte mit Strom aus Windkraft und Wasserstoff aus AE zusammengefasst.

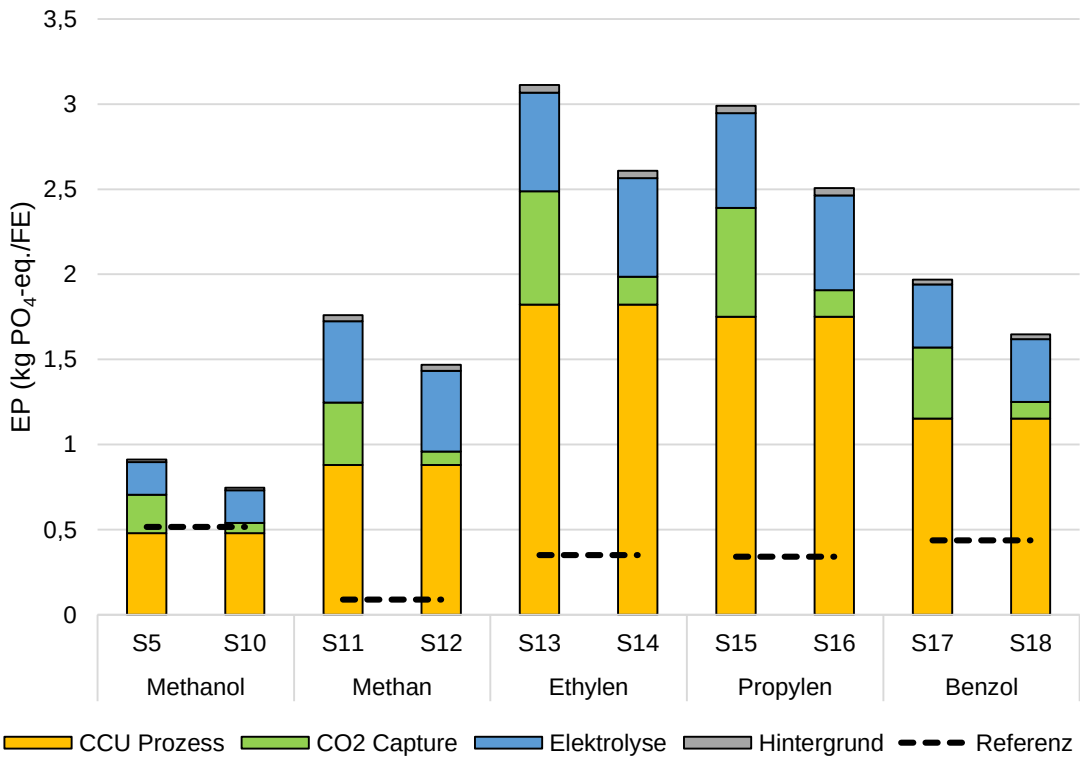


Abbildung 16: Eutrophierungspotenzial (EP) von S5 und S10–S18.

Das EP aller CCU-Produkte liegt um ein Vielfaches höher, als das der entsprechenden Referenzprodukte. Die Hauptlast trägt bei jedem der Produkte der CCU-Prozess mit 0,5–1,8 kg PO_4-eq./FE, bei dem die Bereitstellung der Infrastruktur sowie des Katalysators die Quelle der Emissionen darstellen. DAC mit 0,2–0,7 kg PO_4-eq./FE und Elektrolyse mit 0,2–0,6 kg PO_4-eq./FE verursachen ähnlich hohe Emissionen, CO_2 aus dem Zementwerk hat mit 0,2 kg PO_4-eq./FE den kleinsten Anteil am jeweiligen Gesamtergebnis.

Bei **Methan** liegen die Emissionen um einen Faktor 18–22 höher als die Referenz. Bei **Ethylen** und **Propylen** liegt der Faktor bei 7–9, für **Benzol** liegt der Faktor bei 3–4.

5.3.6 Kumulierter Energieaufwand (KEA)

In Abbildung 17 sind analog zu den vorherigen Abschnitten die Ergebnisse für den kumulierten Energieaufwand aller Szenarien für Produkte mit Strom aus Windkraft und Wasserstoff aus AE zusammengefasst.

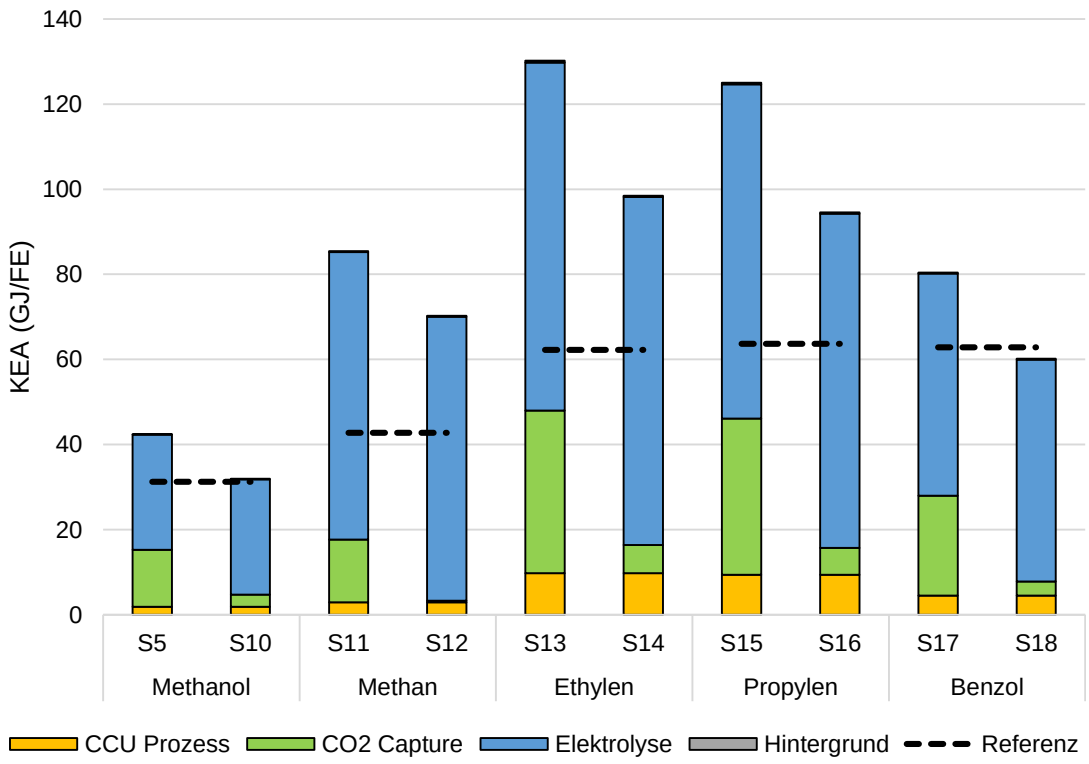


Abbildung 17: Kumulierter Energieaufwand (KEA) von S5 und 10–S18.

Der KEA wird in allen Szenarien hauptsächlich durch die Bereitstellung von Strom für die Elektrolyse bestimmt. Beim DAC fällt die Erzeugung von Wärmeenergie für die Desorption von CO_2 ins Gewicht, ein kleiner Anteil des jeweiligen Gesamtergebnisses der Szenarien entfällt auf Strom und Infrastruktur für die CCU-Prozesse.

Die Energieaufwendungen sind bei der Synthese von **Methan** (S11 und S12) im Vergleich zur Referenz mit 43 GJ/FE deutlich höher und machen insgesamt 70–85 GJ/FE aus. S12 ist das einzige Szenario, in dem der Wärmebedarf für die Synthese des Produkts vollständig durch die Wärmeintegration gedeckt wird.

Ethylen und **Propylen** in S13–S16 liegen mit einem KEA von 95–130 GJ/FE deutlich oberhalb der Referenzwerte von 62 GJ/FE und 64 GJ/FE.

Der Referenzwert für **Benzol** liegt mit 63 GJ/FE im selben Bereich wie für Ethylen und Propylen. Benzol aus CCU mit DAC in S17 besitzt mit einem Wert von 80 GJ/FE einen höheren Energieaufwand als die Referenz, S18 zeigt mit 60 GJ/FE als einziges der untersuchten Szenarien einen niedrigeren Wert als die entsprechende Referenz.

5.3.7 Stratosphärisches Ozonabbaupotenzial (ODP)

In Abbildung 18 sind analog zu den vorherigen Abschnitten die Ergebnisse für das stratosphärische Ozonabbaupotenzial aller Szenarien für Produkte mit Strom aus Windkraft und Wasserstoff aus AE zusammengefasst.

Beim ODP ist das Verhältnis der Emissionswerte für die Szenarien von CO_2 aus DAC und aus dem Zementwerk am größten. DAC verursacht in allen Szenarien deutlich höhere Emissionen, als die fossilen Referenzszenarien und die Erzeugung der CCU-Produkte mit CO_2 aus dem Zementwerk. Der CCU-Prozess verursacht jeweils nur einen kleinen Teil der Gesamtemissionen, übersteigt jedoch für sich genommen den jeweiligen Referenzwert aller Szenarien, abgesehen von der Methanolsynthese.

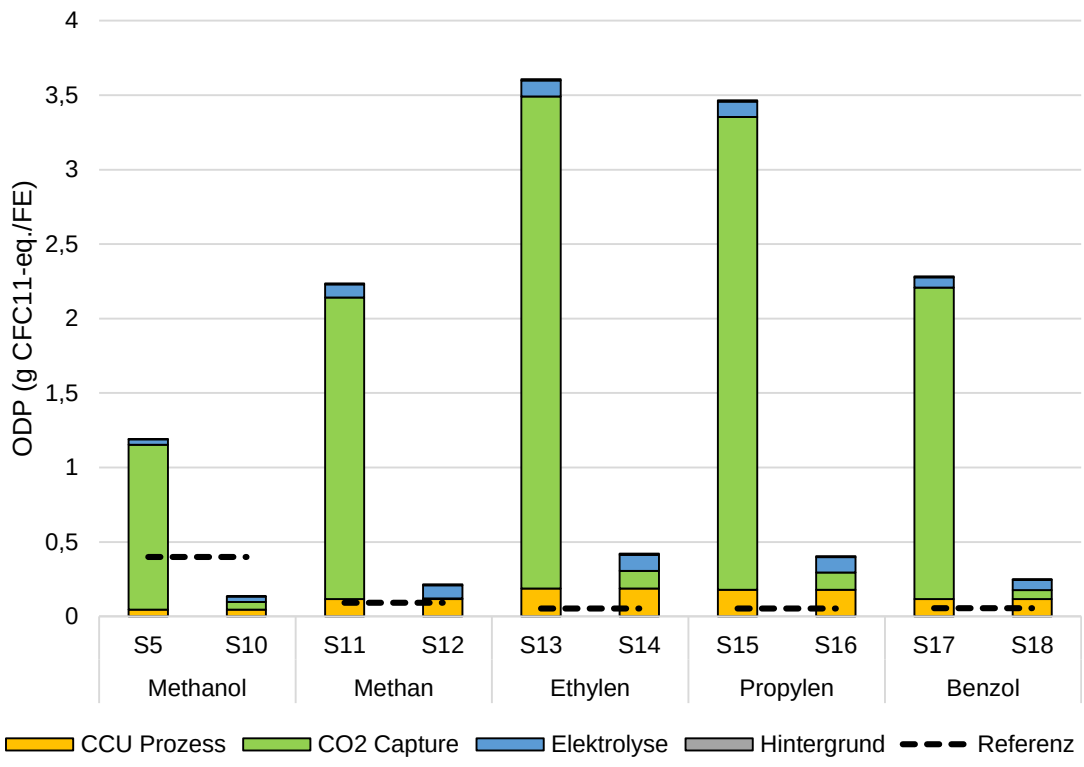


Abbildung 18: Stratosphärischer Ozonabbau (ODP) von S5 und S10–S18.

Für **Methan** in S11 (DAC) liegen die Emissionen um den Faktor 22 höher als die der Referenz. Für **Ethylen** und **Propylen** in S13 und S15 beträgt der Faktor 35 und 36 und für **Benzol** in S17 beträgt der Faktor 23.

5.3.8 Feinstaubbelastung ($PM_{2.5}$)

In Abbildung 19 sind analog zu den vorherigen Abschnitten die Ergebnisse für die Feinstaubbelastung aller Szenarien für Produkte mit Strom aus Windkraft und Wasserstoff aus AE zusammengefasst.

Die Feinstaubbelastung durch $PM_{2.5}$ liegt für **Methan** mit 3392 g $PM_{2.5}$-eq./FE in S11 (DAC) und mit 2314 g $PM_{2.5}$-eq./FE in S12 (Zementwerk) etwas über dem Referenzwert von 2268 g $PM_{2.5}$-eq./FE.

Für **Ethylen** und **Propylen** liegen die Werte deutlich oberhalb der Referenzwerte von 3353 g $PM_{2.5}$-eq./FE und 3339 g $PM_{2.5}$-eq./FE, wobei auch hier das CO_2 aus DAC mit höheren Emissionen belastet ist als die CCU-Prozesse und die Elektrolyse.

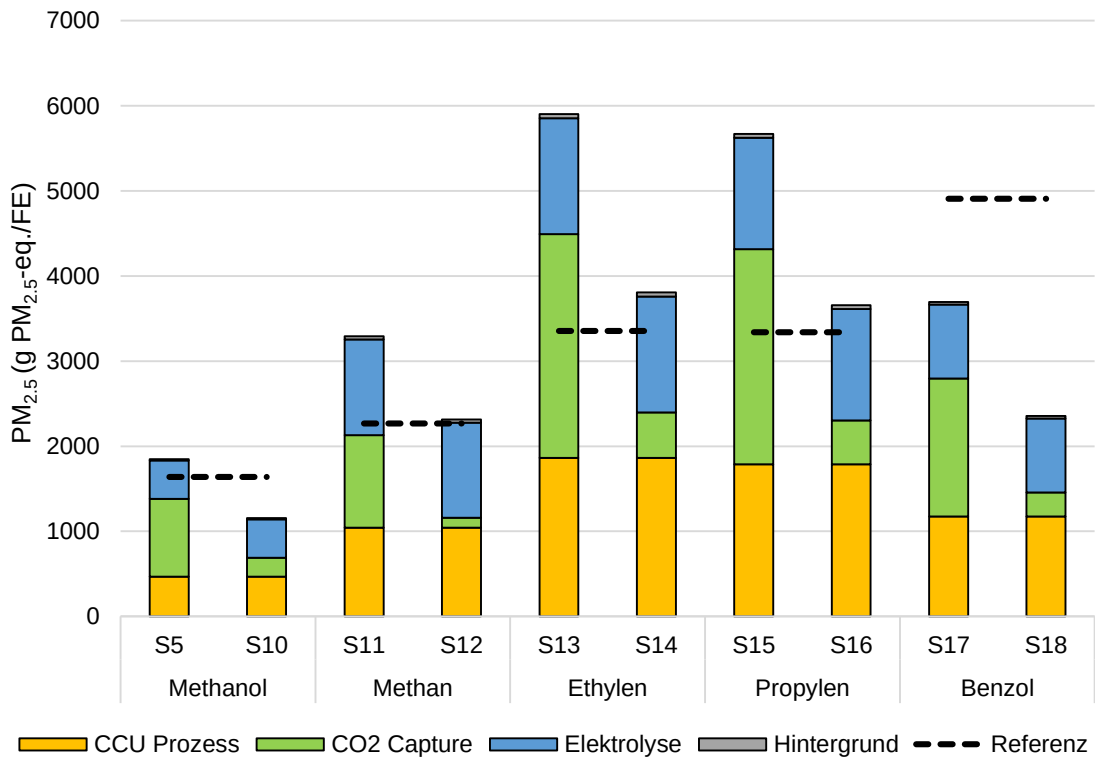


Abbildung 19: Feinstaubbelastung ($PM_{2.5}$) von S5 und S10–S18.

Für **Benzol** liegt der Referenzwert mit 4907 g $PM_{2.5}$-eq./FE am höchsten, die Emissionen in S17 (DAC) betragen 3694 g $PM_{2.5}$-eq./FE und in S18 (Zementwerk) 2356 g $PM_{2.5}$-eq./FE und liegen jeweils deutlich unterhalb des Referenzwertes.

Allgemein tragen die CCU-Prozesse etwa ein Drittel, das DAC ein Drittel bis die Hälfte und die Elektrolyse ca. ein Viertel zur Feinstaubbelastung bei. Emissionen aus der Abscheidung von CO_2 aus dem Zementwerken machen nur knapp über 14 % der Feinstaubemissionen aus.

5.3.9 Landnutzung (LU)

In Abbildung 20 sind analog zu den vorherigen Abschnitten die Ergebnisse für die Landnutzung in allen Szenarien für Produkte mit Strom aus Windkraft und Wasserstoff aus AE zusammengefasst.

Der LU für CCU-Produkte ist aufgrund mangelhafter Daten nicht mit den Referenzprodukten vergleichbar; die verfügbaren Werte sind in Abbildung 20

dennoch dargestellt. Es zeichnet sich ein allgemeines Bild ab, das einen Vergleich zulässt, wenn angenommen wird, dass die Flächenbedarfe der chemischen Fabriken (hier im CCU-Prozess enthalten), für die konventionellen Anlagen und die Anlagen für CCU vergleichbar groß sind.

Der Flächenbedarf für **Methan** in S11 (DAC) beträgt 20,8 m²/FE wovon 13,2 m²/FE auf den CCU-Prozess entfallen. Durch DAC werden weitere 4,2 m²/FE und für die Elektrolyse 3,4 m²/FE benötigt. S12 (Zementwerk) liegt mit 16,8 m²/FE etwas unterhalb des Wertes von S11, da hier DAC mehr Fläche für die gleiche abgeschiedene Menge CO_2 benötigt als die Abscheidung aus dem Zementwerk.

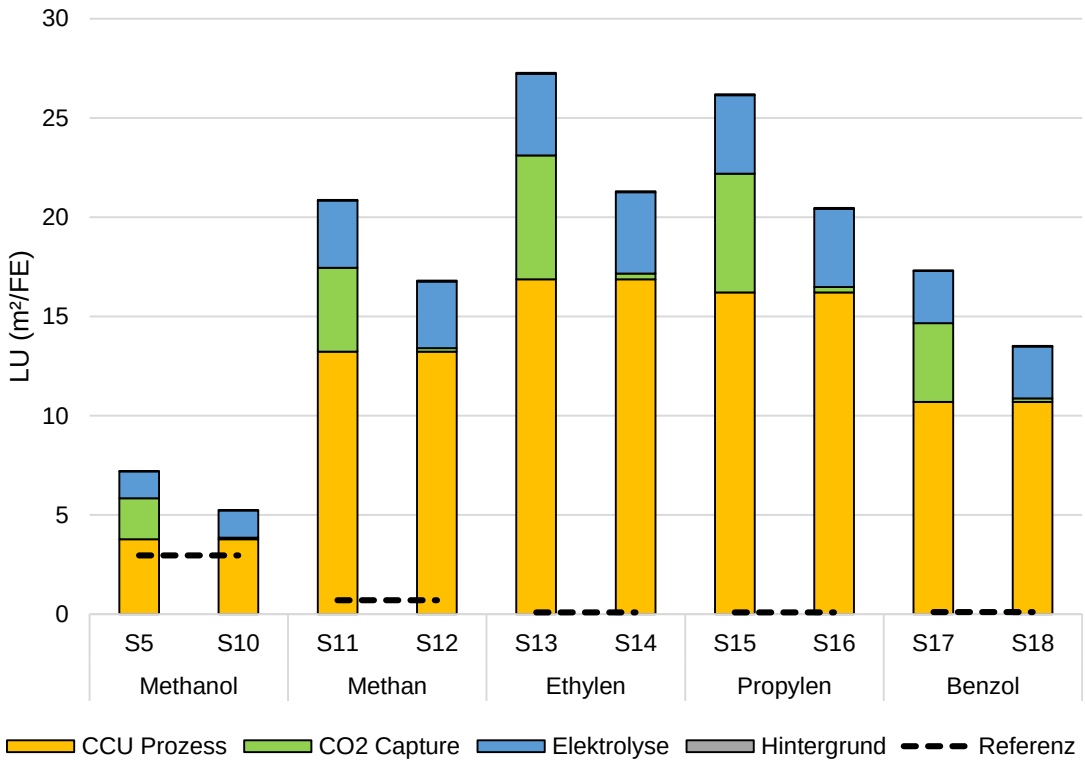


Abbildung 20: Landnutzung (LU) von S5 und S10–S18.

Für **Ethylen** wird in S13 (DAC) mit 27,7 m²/FE die größte Fläche in Anspruch genommen, bei **Propylen** beträgt der Wert 26,2 m²/FE in S15 (DAC) und 20,5 m²/FE in S16 (Zementwerk).

Benzol liegt bei einem Bedarf von 17,3 m²/FE in S17 (DAC) und 13,5 m²/FE in S18 (Zementwerk).

5.3.10 Wassernutzung (WU)

In Abbildung 21 sind analog zu den vorherigen Abschnitten die Ergebnisse für die Wassernutzung aller Szenarien für Produkte mit Strom aus Windkraft und Wasserstoff aus AE zusammengefasst.

Der WU ist aufgrund mangelnder Datenqualität der Referenzsysteme ebenfalls nicht mit dem der CCU-Produkte zu vergleichen. Auch hier zeigt sich, dass der Prozess des DAC im Allgemeinen den größten Wasserbedarf aufweist, gefolgt von den CCU-Prozessen und der Elektrolyse.

Bei **Methan** beträgt der Wert 3648 m³/FE in S11 (DAC) und 1982 m³/FE in S12 (Zementwerk).

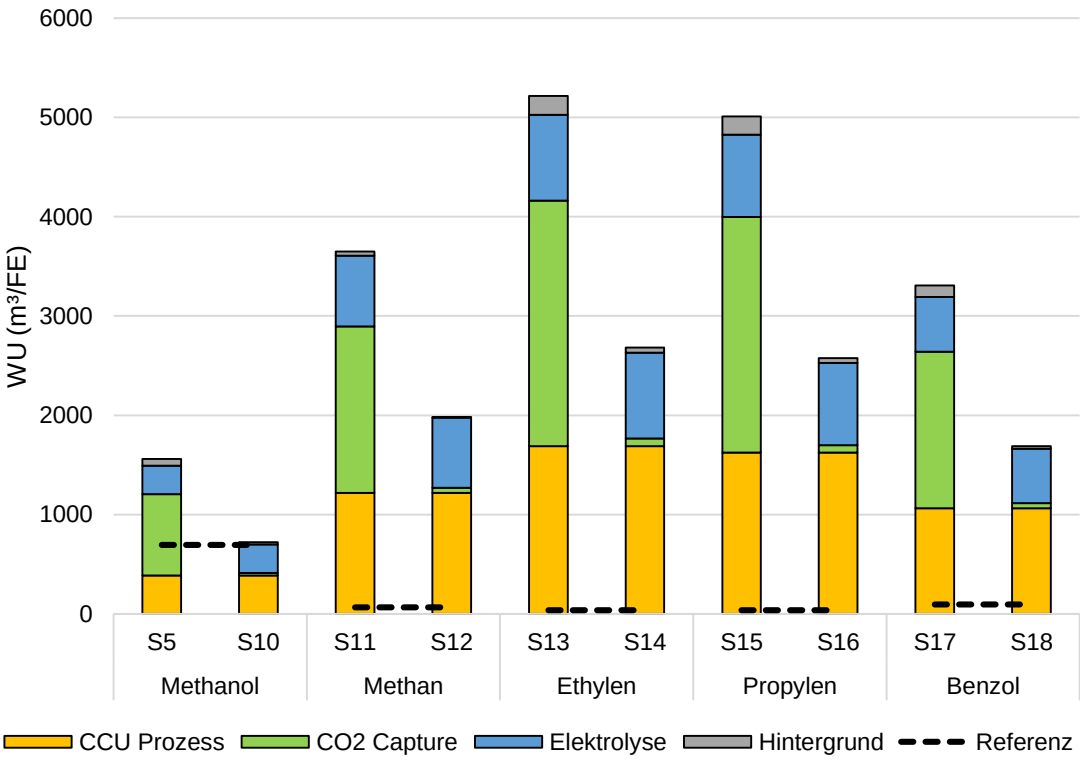


Abbildung 21: Wassernutzung (WU) von S5 und S10–S18.

In S13 (DAC) benötigt die Produktion von **Ethylen** die größte Menge Wasser mit 5216 m³/FE im Vergleich mit den anderen Szenarien. Die Ethylenproduktion in S14 (Zementwerk) benötigt 2683 m³/FE Wasser. Die Herstellung von **Propylen** benötigt 5010 m³/FE bzw. 2577 m³/FE in S15 (DAC) und S16 (Zementwerk).

Für **Benzol** steigt der Wasserbedarf in S17 (DAC) auf insgesamt 3306 m³/FE, der Wert für S18 (Zementwerk) liegt mit 1690 m³/FE etwa halb so hoch.

5.4 Interpretation und Evaluation

5.4.1 Signifikante Parameter

Beim Treibhauspotenzial (GWP_{100}) sind die größten Beiträge durch die CO_2-Abscheidungs-Prozesse aufgrund ihres hohen Wärmebedarfs für die Desorption von CO_2 verantwortlich. Da für die Erzeugung von Wärmeenergie hauptsächlich die Verbrennung von Erdgas angenommen wurde, ergeben sich hohe CO_2-Emissionen, welche in der Bilanz stark ins Gewicht fallen. Der Wärmebedarf für DAC kann trotz Wärmeintegration nicht gedeckt werden.

Das Eutrophierungspotenzial (EP) liegt in den meisten Szenarien um einen Faktor 3–9, bei der Herstellung von Methan sogar um einen Faktor 18–22 höher im Vergleich zur fossilen Referenz. Ursächlich dafür ist primär die Bereitstellung der Produktionsinfrastruktur, also Emissionen aus der Erzeugung von Stahl, Aluminium, Kupfer und Beton sowie die Herstellung der Katalysatoren und der Abbau entsprechender Schwermetalle wie Kobalt und Nickel. Die Ergebnisse sind kritisch zu betrachten, da die Umweltlasten aus der Bereitstellung der Produktionsinfrastruktur für Produkte aus CCU in einer ähnlichen Größenordnung wie die Werte der fossilen Referenz liegen sollte. Möglicherweise sind die Referenzwerte in diesem Fall zu niedrig berechnet und sollten erneut evaluiert werden. Andererseits kommen bei den konventionellen Anlagen aufgrund der hohen Kapazitäten Skaleneffekte zum Tragen, wodurch die Werte insgesamt niedriger ausfallen können.

Beim kumulierten Energieaufwand (KEA) ergeben sich signifikante Beiträge einerseits durch die Bereitstellung von elektrischer Energie für die Elektrolyse und andererseits durch die Bereitstellung von Wärme für die CO_2-Abscheidung. Ein großer Teil der Energieaufwendungen für die CO_2-Abscheidung wird durch die Wärmeintegration bereitgestellt. In Szenario 12 der Methansynthese mit CO_2 aus dem Zementwerk kann der Energiebedarf für die CO_2-Abschei-

dung vollständig aus der Reaktionswärme der Methanisierung gedeckt werden. Der Anteil des Stroms für die Elektrolyse macht 62–95 % der Energieaufwendungen aus.

Starke Belastungen beim stratosphärischen Ozonabbaupotenzial (ODP) ergeben sich in allen DAC-Szenarien durch den großen Bedarf an Infrastruktur der CO_2-Abscheide-Einheiten und den damit entstehenden Emissionen aus der Schwermetall-, Stahl-, und Betonindustrie. Die Mehrbelastungen reichen von Faktor 3 bei der Methanolsynthese bis Faktor 36 bei der Ethylensynthese.

Die Verwendung von CO_2 aus Biomasse in S8 führt in den Kategorien AP, EP, ODP, $PM_{2.5}$ und LU zu gesteigerten Beiträgen. Verantwortlich hierfür sind Emissionen aus der Landwirtschaft durch z. B. Verwendung von Düngemitteln und daraus resultierenden Ammoniakemissionen sowie der größere Flächenbedarf durch den Biomasseanbau. Wie bereits erwähnt, wird dieses Allokationsproblem in Kapitel 5.4.4 diskutiert.

5.4.2 Sensitivitätsprüfung

Die Sensitivitätsprüfung ist in der ISO 14044 einer von drei wahlweise erforderlichen Punkte einer LCA. Ziel der Prüfung ist die Einschätzung von Unsicherheiten der Ergebnisse, welche durch die Datenqualität oder methodische Festlegungen resultieren. Einige Sensitivitäten sind bereits innerhalb der verschiedenen Szenarien berücksichtigt, beispielsweise die Auswahl unterschiedlicher Stromquellen und Elektrolysetechnologien.

Wesentliche Unterschiede in den Ergebnissen resultieren durch die Variation der Stromquelle, beispielhaft in den Szenarien S1–S5 der Methanolsynthese gezeigt (vgl. Abbildung 13). Die größten Umweltwirkungen in allen Wirkungskategorien hat die Verwendung von Strom aus dem deutschen Strommix 2014. Der Beitrag verringert sich sukzessive mit höherem Anteil erneuerbarer Energien im Strommix und wird bei ausschließlicher Nutzung von Offshore-Windenergie minimal. Die Nutzung von Freiflächen-PV-Anlagen führt vor allem zu hohen Flächenbedarfen, welche in S4 das 126-fache des Referenzwerts betragen.

Im direkten Vergleich der CO_2-Quellen werden die größten Umweltwirkungen durch CO_2-Abscheidung aus DAC verursacht. Die Gewinnung von CO_2 aus Punktquellen benötigt weniger Energie und erzeugt weniger Emissionen als die Gewinnung durch DAC. Dadurch übersteigen die Umweltwirkungen aller Szenarien mit DAC die entsprechenden Referenzwerte in allen Kategorien.

In Kapitel 5.1.3 wurde die ökonomische Allokation gewählt, welche die Umweltlasten- und Aufwendungen entsprechend der ökonomischen Werte distribuiert. Dies gilt ebenfalls für die Elektrolyse, in der das Koppelprodukt Sauerstoff einen Teil der Lasten übernimmt. Obwohl die ökonomischen Werte von Wasserstoff (1800 €/t) und Sauerstoff (104 €/t) weit auseinander liegen (vgl. Tabelle 3), ist aufgrund des Produktmassenverhältnisses aus der Elektrolyse von 1:8 (H_2:O_2) ein signifikanter Einfluss der Allokationsmethode zu erwarten. Im ökonomischen Kontext wurde bereits gezeigt, dass eine Berücksichtigung von Sauerstoffverkäufen die Produktionskosten für Wasserstoff senken und die Elektrolyse damit wirtschaftlich attraktiver machen kann.[128] Gleichzeitig ist fraglich, ob bei einer stark gesteigerten Produktion von Wasserstoff durch Elektrolyse die entsprechenden Mengen Sauerstoff vermarktet werden können. Theoretisch ließe sich damit die Sauerstoffgewinnung durch Luftverflüssigung ersetzen; prinzipiell wird bei der Stickstoffgewinnung ebenfalls Sauerstoff als Nebenprodukt erzeugt, sodass eine Konkurrenzsituation entstehen könnte. Für Sauerstoff als Produkt fallen ebenfalls hohe Transportkosten durch eine zusätzlich benötigte Transportinfrastruktur an. Da der ökonomische Nutzen der Sauerstoffproduktion via Elektrolyse daher nicht garantiert werden kann, (obwohl er sicherlich einen Anreiz schaffen würde,) wird für eine Sensitivitätsrechnung eine vollständige Allokation auf Wasserstoff ohne ökonomischen Wert von Sauerstoff angenommen. Die Bezeichnung $O2 bezieht sich auf die Allokation mit Sauerstoff, die Bezeichnung $H2 auf die Allokation ohne Berücksichtigung von Sauerstoff. Den größten Einfluss hatte der Strom für die Elektrolyse in den Basisszenarien der Methanolproduktion in den Wirkungskategorien GWP_{100}, AP und KEA, sodass diese drei Kategorien kurz dargestellt und diskutiert werden.

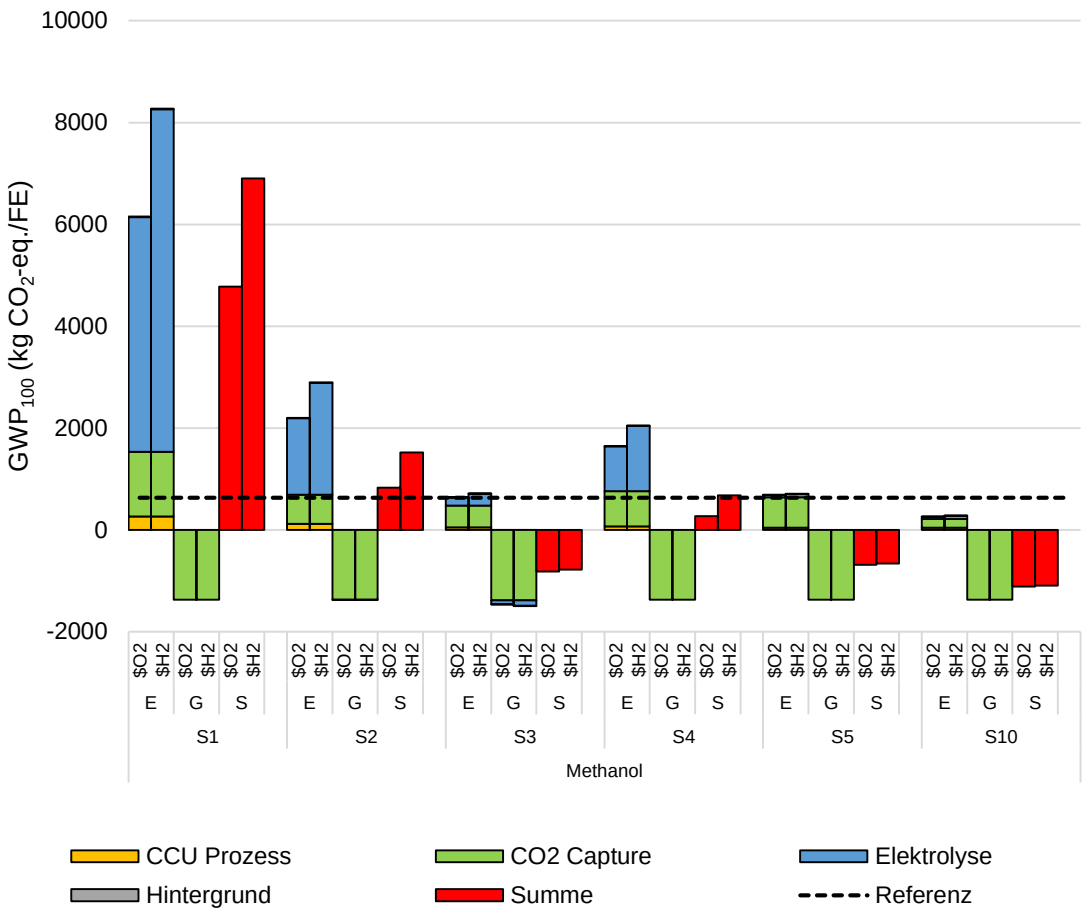


Abbildung 22: Sensitivität des GWP_{100} für die ökonomische Allokation der Elektrolyse mit Berücksichtigung von Sauerstoff ($O2) und ohne Sauerstoff ($H2).

Beim Treibhauspotenzial (Abbildung 22) wird deutlich, dass der Einfluss der ökonomischen Allokation besonders dann ins Gewicht fällt, wenn die Wasserstoffproduktion mit hohen Emissionen belastet ist. In S1 und S2 erhöht sich der Anteil der Elektrolyse am GWP_{100} um 2120 kg CO2-eq./FE und 692 kg CO2-eq./FE, was jeweils einer Steigerung um 46% der Elektrolyseemissionen (E) und 44 % (S1) bzw. 84 % (S2) des Summenwertes (S) entspricht. Werden die Szenarien S5 und S10 mit Strom aus Windkraft betrachtet, beträgt die Differenz lediglich 21 kg CO2-eq./FE.

Auch beim Versauerungspotenzial (Abbildung 23) steigen die Beiträge der Elektrolyse ohne die Allokation auf Sauerstoff um je 46 %. In S12 der Methansynthese führt dies dazu, dass der Vorteil gegenüber der fossilen Referenz verloren geht. In S13 und S15 der Ethylen- und Propylensynthese steigt der Wert des AP auf das Doppelte der Referenz. Das AP der Benzolsynthese liegt weiterhin unterhalb der Referenzwerte.

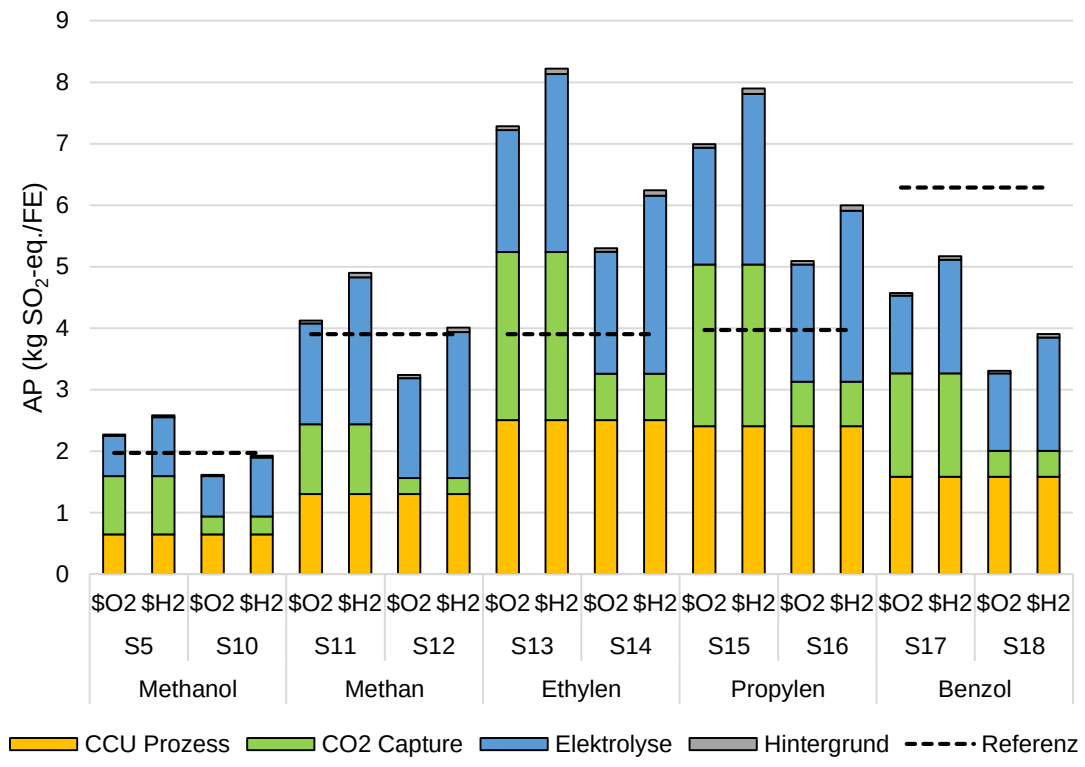


Abbildung 23: Sensitivität des AP für die ökonomische Allokation der Elektrolyse mit Berücksichtigung von Sauerstoff ($O2) und ohne Sauerstoff ($H2).

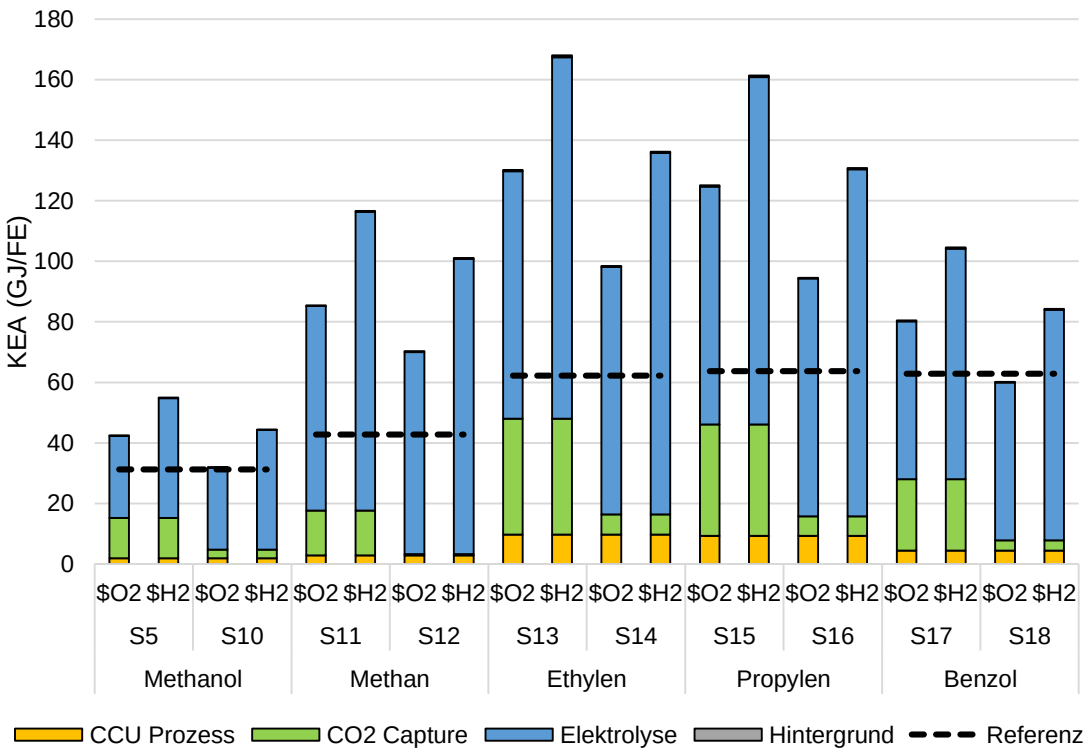


Abbildung 24: Sensitivität des KEA für die ökonomische Allokation der Elektrolyse mit Berücksichtigung von Sauerstoff ($O2) und ohne Sauerstoff ($H2).

Beim kumulierten Energieaufwand (Abbildung 24) führen die Beiträge der Elektrolyse zu den größten Differenzen der beiden Allokationsansätze. Bei der vollständigen Allokation auf Wasserstoff gibt es keinen Wert für den KEA mehr, der unterhalb des jeweiligen fossilen Referenzwertes liegt. In S11 steigt der KEA um 46 % von 85 GJ/FE auf 117 GJ/FE bei einem Referenzwert von 42 GJ/FE für Methan. Ethylen in S13 und Propylen in S15 erreichen Spitzenwerte des KEA von 168 GJ/FE und 161 GJ/FE.

In den anderen Wirkungskategorien erhöht sich der Beitrag der Elektrolyse ebenfalls um 46 %, allerdings führt dies durch den geringen Beitrag der Elektrolyse nicht zu signifikanten Änderungen der potenziellen Umweltwirkungen.

5.4.3 Normierung

Die verschiedenen Bereitstellungspfade führen zu unterschiedlicher Be- und Entlastung in den angegebenen Wirkungskategorien gegenüber der fossilen Referenz. Um einschätzen zu können wie hoch die potenziellen Umweltwirkungen einer CCU-basierten Basischemikalienherstellung ausfallen könnten, werden die Ergebnisse der LCIA normiert. Zunächst wird die Be- und Entlastung je Wirkungskategorie und funktioneller Einheit (also die Differenz zwischen CCU- und fossiler Produktion) in Bezug zur aktuellen Umweltbelastung der Bundesrepublik Deutschland gesetzt und anschließend angenommen, dass die komplette Produktion der Chemikalien von fossilen auf CCU-Prozesse umgestellt würde; so lässt sich die hypothetische Be- und Entlastung gegenüber dem aktuellen Bezugsjahr, in diesem Fall dem Jahr 2016, darstellen. Zusätzlich erfolgt eine Skalierung in Bezug auf das GWP_{100}, um die Emissionen der anderen Wirkungskategorien proportional zu diesem angeben zu können. Dies bedeutet, dass durch Verwendung von CCU-Prozessen eine Verringerung der Treibhausgasemissionen um X % mit Be- oder Entlastungen von X-mal Y % in den anderen Kategorien einhergehen. Ein Rechenbeispiel findet sich im Anhang im Kapitel „Normierung“. Die Emissionen der Bundesrepublik Deutschland im Jahr 2016 sind in Tabelle 10 angegeben. Da die Wirkungskategorien Land- und Wassernutzung in Bezug auf die Referenzsysteme keine valide Datenbasis liefern, werden diese nicht normiert.

Tabelle 10: Gesamtemissionen der BRD im Jahr 2016 in sechs Wirkungskategorien.[129]

Wirkungskategorie	Menge	Einheit
GWP_{100}	909.394.000	t CO_2-eq.
AP	2.653.440	t SO_2-eq.
EP	702.708	t PO_4-eq.
KEA	1.342.000	TJ
ODP	2.691	t CFC11-eq.
$PM_{2.5}$	1.903.524	t $PM_{2.5}$-eq.

Die normierten Be- und Entlastungen für die Produktion von Methanol aus CCU sind in Abbildung 25 dargestellt. Entlastungen ergeben sich beim GWP_{100}, AP, ODP und $PM_{2.5}$, solange die Bereitstellung von CO_2 aus Abgasen der Zementproduktion (Punktquelle) erfolgt. In allen anderen Wirkungskategorien werden zusätzliche Umweltbelastungen generiert, am größten ist diese beim KEA mit einem Faktor von 0,58 in Bezug auf die Treibhausgasreduktion, wenn CO_2 aus DAC genutzt wird.

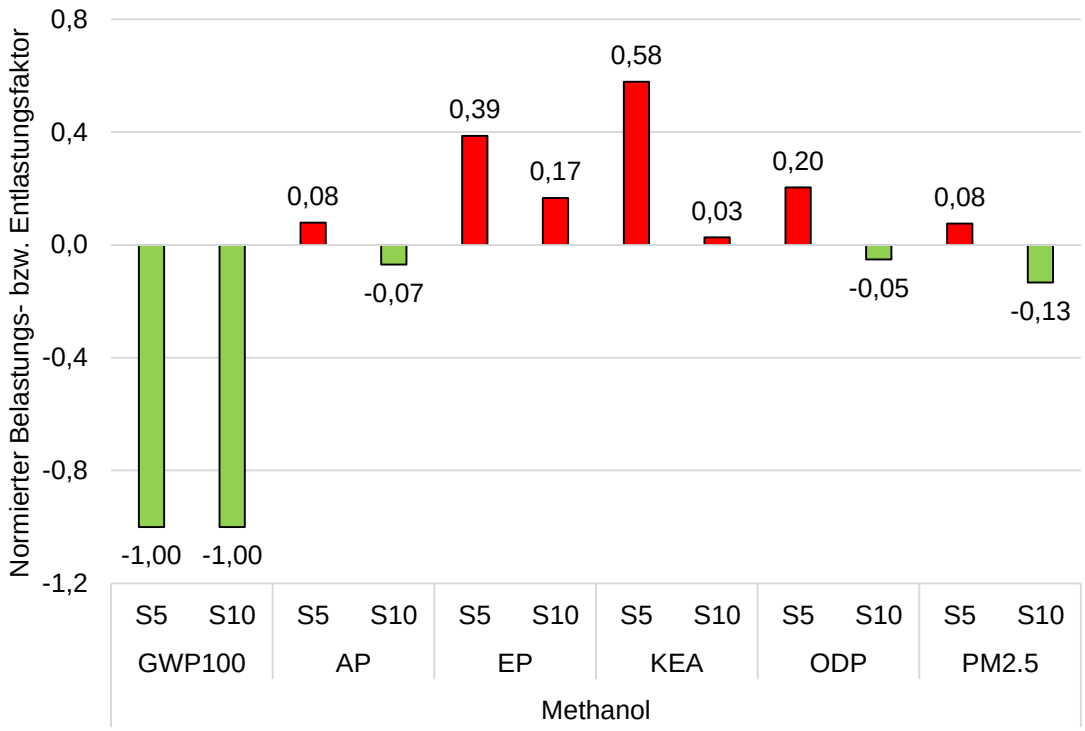


Abbildung 25: Normierte Belastung bzw. Entlastung der Methanolsynthese über CCU.

Die Ergebnisse der Normierung für die Produktion von Methan (Abbildung 26) zeigen starke Belastungen in faktisch allen Wirkungskategorien. Bei der CCU-Synthese in S11 (DAC) verdoppelt sich das EP, der KEA steigt um den Faktor 1,29. Die einzige Entlastung würde beim AP in S12 (Zementwerk) mit einem

Faktor von -0,08 erfolgen, dafür würden Emissionen beim EP um den Faktor 0,67, beim ODP um 0,02 und der $PM_{2.5}$ um 0,01 steigen, während der KEA um 0,70 wächst.

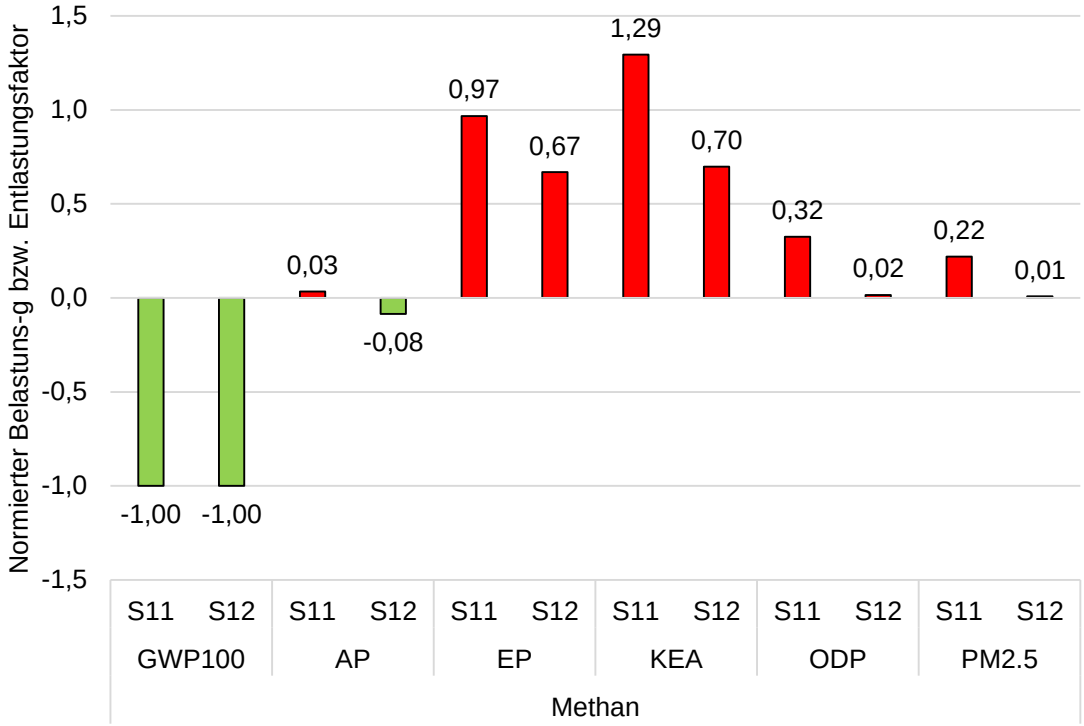


Abbildung 26: Normierte Belastung bzw. Entlastung der Methansynthese über CCU.

Die normierten Ergebnisse für Ethylen (Abbildung 27) und Propylen (Abbildung 28) zeigen ebenfalls starke Mehrbelastungen in allen Wirkungskategorien. Eine Entlastung beim GWP_{100} von -1 % würde zu Mehrbelastungen beim EP von 1,40 % bei Ethylen und 1,28 % bei Propylen und einem erhöhten KEA von 1,80 % und 1,55 % in den Szenarien S13 und S15 (DAC) führen.

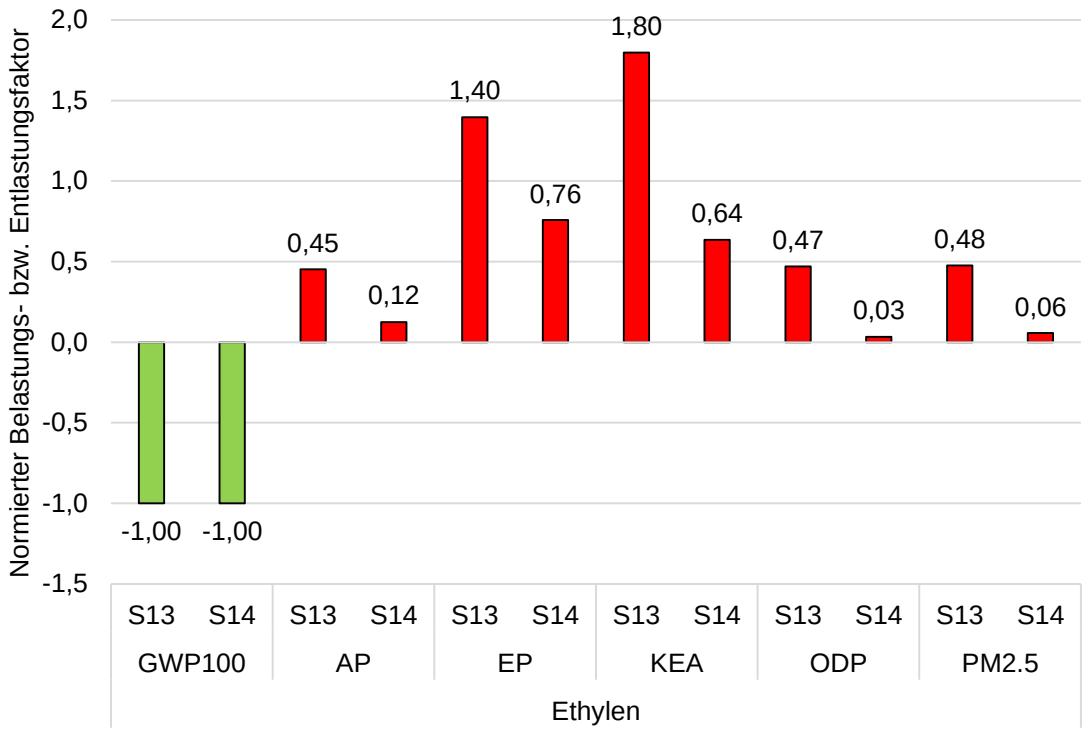


Abbildung 27: Normierte Belastung bzw. Entlastung der Ethylensynthese über CCU.

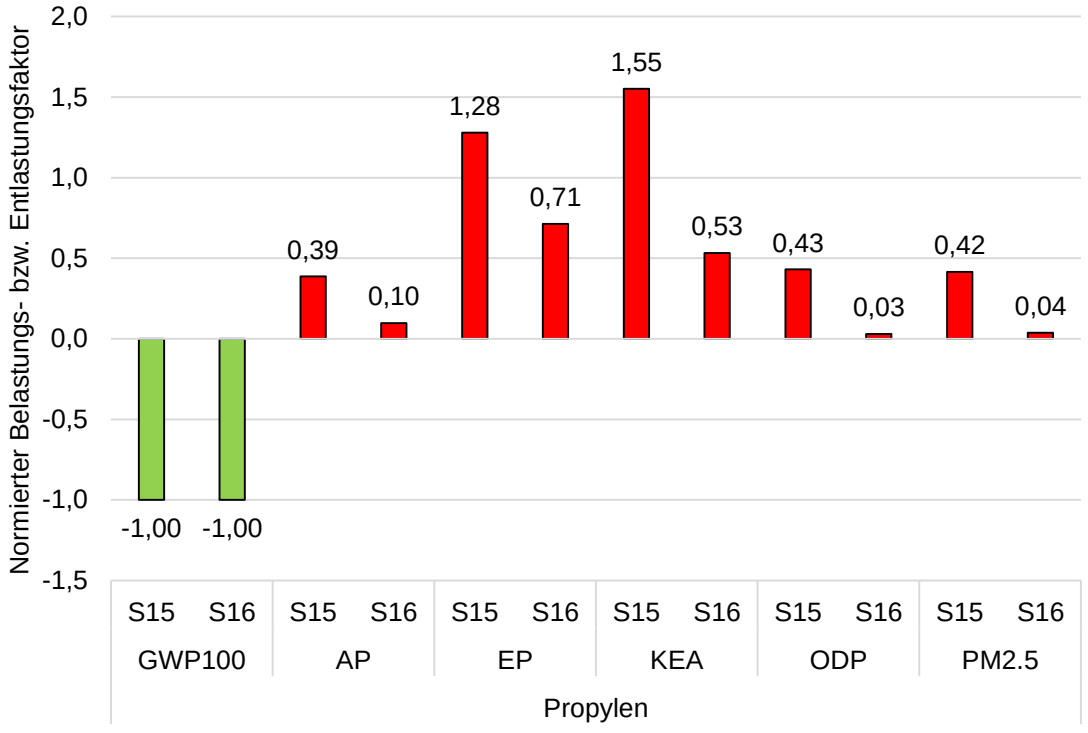


Abbildung 28: Normierte Belastung bzw. Entlastung der Propylensynthese über CCU.

Die Ergebnisse der Benzolsynthese sind in Abbildung 29 gezeigt. Eine Entlastung beim GWP_{100} von -1 % in S18 (Zementwerk) bedeutet geringe Entlastungen beim AP und $PM_{2.5}$ sowie eine minimale Entlastung beim KEA. EP und ODP verzeichnen in beiden Szenarien S17 (DAC) und S18 Mehrbelastungen, wobei auch hier das EP mit 0,50 % den größten Wert aufweist.

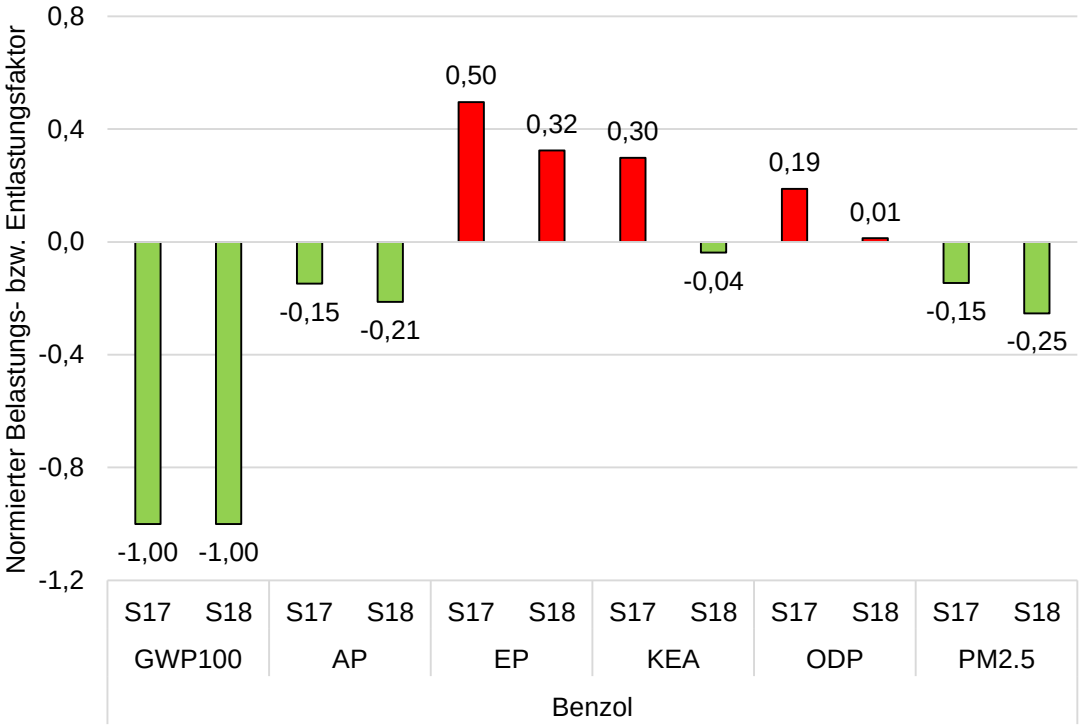


Abbildung 29: Normierte Belastung bzw. Entlastung der Benzolsynthese über CCU.

Die in Kapitel 1.5 angegebenen globalen Produktionsmengen der Basischemikalien aus dem Jahr 2010 werden laut Prognosen bis zum Jahr 2050 um 2,6 % pro Jahr wachsen.[130] Daraus resultiert eine Weltjahresproduktion in Höhe von 154 Mt für Methanol, 349 Mt für Ethylen, 223 Mt für Propylen und 112 Mt für Benzol, was etwa der dreifachen heutigen Produktionskapazität entspricht. In Deutschland ergeben sich anhand dieser Berechnungen Produktionsmengen in Höhe von 2,3 Mt für Methanol, 12,1 Mt für Ethylen, 9,6 Mt für Propylen und 4,2 Mt für Benzol im Jahr 2050. Methan gehört per Definition genau genommen nicht zu den Basischemikalien und die Hauptanwendung als Brennstoff macht eine Abschätzung der Produktionsmengen für die Verwendung in der chemischen Industrie schwer. Die Erdgas-Gesamtproduktion in Deutschland lag im Jahr 2010 bei 8,8 Mt und sank bis 2015 auf 6,1 Mt.[131]

Für die Produktion im Jahr 2050 wird eine Gesamtmenge von 5,0 Mt angenommen. Würde die Produktion der Chemikalien Methanol, Methan, Ethylen, Propylen und Benzol auf Verfahren aus CCU-Technologien umgestellt werden, so wäre der Anteil der Produktionsemissionen an den Gesamtemissionen in Deutschland im Vergleich zum Jahr 2016 nicht unerheblich (Tabelle 11):

Eine Entlastung beim GWP_{100} von -9,64 % (DAC Szenario) stünde einer Belastung von 2,43 % beim AP, 10,61 % beim EP, 12,85 % beim KEA, 3,63 % beim ODP und 2,82 % beim $PM_{2.5}$ entgegen. Wird CO_2 aus Punktquellen als Kohlenstoffquelle genutzt, so ergibt sich eine Reduktion des GWP_{100} um -13,42 % und $PM_{2.5}$ um -0,16 %. Nachteile würden bei den Wirkungskategorien AP, EP, KEA und ODP entstehen.

Tabelle 11: Gesamtemissionen der hypothetischen Produktion von Chemikalien durch CCU-Technologie bezogen auf die Gesamtemissionen der BRD in 2016. Oben: CO_2 aus DAC. Unten: CO_2 aus Punktquellen (Zementwerk).

CCU-Produkt	**Methanol**	**Methan**	**Ethylen**	**Propylen**	**Benzol**	**Summe**
Projizierte Menge (Mt)	2,3	5,0	12,1	9,6	4,2	33,2
DAC-Szenario	S5	S11	S13	S15	S17	
GWP_{100}	-0,33 %	-1,23 %	-3,41 %	-2,83 %	-1,84 %	-9,64 %
AP	0,03 %	0,04 %	1,54 %	1,09 %	-0,27 %	2,43 %
EP	0,13 %	1,19 %	4,76 %	3,62 %	0,91 %	10,61 %
KEA	0,19 %	1,59 %	6,12 %	4,39 %	0,55 %	12,85 %
ODP	0,07 %	0,40 %	1,60 %	1,22 %	0,35 %	3,63 %
$PM_{2.5}$	0,03 %	0,27 %	1,62 %	1,18 %	-0,27 %	2,82 %

CCU-Produkt	**Methanol**	**Methan**	**Ethylen**	**Propylen**	**Benzol**	**Summe**
Projizierte Menge (Mt)	2,3	5,0	12,1	9,6	4,2	33,2
Zementwerk-Szenario	S10	S12	S14	S16	S18	
GWP_{100}	-0,44 %	-1,47 %	-5,14 %	-4,15 %	-2,23 %	-13,42 %
AP	-0,03 %	-0,12 %	0,64 %	0,41 %	-0,47 %	0,42 %
EP	0,07 %	0,98 %	3,89 %	2,96 %	0,72 %	8,63 %
KEA	0,01 %	1,02 %	3,26 %	2,21 %	-0,08 %	6,42 %
ODP	-0,02 %	0,02 %	0,17 %	0,13 %	0,03 %	0,32 %
$PM_{2.5}$	-0,06 %	0,01 %	0,29 %	0,16 %	-0,56 %	-0,16 %

5.4.4 Vollständigkeit der LCA

Die Vollständigkeit der LCA im Rahmen der betrachteten Produktsysteme und Wirkungskategorien in Bezug auf die vorliegenden Daten ist gegeben. Für alle

fünf CCU-Produkte (Methanol, Methan, Ethylen, Propylen und Benzol) konnten in allen acht Wirkungskategorien (GWP_{100}, AP, EP, KEA, ODP, $PM_{2.5}$, LU und WU) die spezifischen potenziellen Umweltwirkungen quantifiziert und einzelnen Prozessschritten zugeordnet werden.

In den Szenarien S8 und S9 der Bereitstellung von CO_2 aus Biogas- und Müllverbrennungsanlagen trat ein Allokationsproblem auf. Lasten der CO_2-bereitstellenden Prozesse wurden durch das verwendete CO_2 auf die entsprechenden CCU-Produkte übertragen, wodurch sich höhere Beiträge in einzelnen Wirkungskategorien ergaben. Die Ergebnisse folgen damit den Allokationskriterien der Studie „Systemvergleich speicherbarer Energieträger aus erneuerbaren Energien (SYSEET)“[123], aus der die jeweiligen Prozessmodule entnommen wurden. Die Ergebnisse der Szenarien S8 und S9 können daher im weiteren Verlauf der Diskussion nicht berücksichtigt werden. Die Bereitstellung von CO_2 aus Müllverbrennungs- und - Biogasanlagen sollte mit angepassten Allokationskriterien erneut evaluiert werden.

Unvollständigkeiten in Teilen der Ergebnisse ergeben sich vor allem aus den in Kapitel 5.1.4 und 5.1.5 genannten Annahmen und Limitierungen, für die weitere Erhebungen von Prozessdaten nötig sind. Daher kann die LCA auf Basis der vorliegenden Daten aktuell nicht verfeinert werden. Die Limitierungen sollten jedoch als Startpunkt für weitere Untersuchungen und präzisere Modelle dienen.

5.4.5 End-of-Life-Emissionen

Das betrachtete Produktsystem schließt die Systemgrenze hinter der Produktion der FE und berücksichtigt daher nur die Prozesse auf Cradle-to-Gate-Basis (C2G). Auf dieser Grundlage entfallen alle Aufwendungen und Emissionen für weitere Transporte, Verarbeitungen, Nutzungsphasen, Recycling und Entsorgung, die aufgrund der hohen Bandbreite an Möglichkeiten und der Produktvielfalt nicht abgeschätzt werden können. Die in der Normierung (Kapitel 5.4.3) diskutierten Emissionsminderungen im GWP_{100} stellen damit die maximal möglichen Minderungspotenziale dar (vgl. Tabelle 9). Eine Berücksichtigung der Nutzungsphase würde diese Werte durch die Einbeziehung weiterer

Emissionen deutlich reduzieren. In der Wirkungskategorie GWP_{100} (Abbildung 13 und Abbildung 14) wurde anhand der angenommenen EoL-Emissionen einer vollständigen Verbrennung der Produkte gezeigt, dass die Produktion von Chemikalien durch CCU keine netto-negativen Emissionen erzeugt und höchstens eine Speicherung der entsprechenden Kohlenstoffmenge während der Lebensdauer des Produktes zu erzielen ist. Ob diese für die Speicherdauer als treibhausmindernd anzusehen ist (zeitabhängiges GWP), wird aktuell in Fachkreisen diskutiert; in dieser Arbeit stehen keine zeitabhängigen Emissionsprofile zur Verfügung.[10] Im Kontext dieser Arbeit kann CCU jedoch nicht als Mittel zur Minderung des Treibhauspotenzials und Klimawandels durch Negativemissionen verstanden werden.

In den verbleibenden Wirkungskategorien wurden EoL-Emissionen nicht berücksichtigt, sodass dort weiterhin die Betrachtung auf der C2G-Basis stattfindet.

5.4.6 Allokationsmethode

Die Wahl der Allokationsmethode hat einen bedeutenden Einfluss auf die Ergebnisse der LCIA. Nach ISO 14044 sollen Allokationen möglichst vermieden und Systemraumerweiterungen bevorzugt werden. In Kapitel 5.1.3 wurde diskutiert, warum die Systemraumerweiterung im Kontext dieser Arbeit nicht sinnvoll ist. Müssen Aufwendungen und Lasten alloziert werden, so ist nach *von der Assen* die ökonomische Allokation zu wählen.[10,132]

Die ökonomische Allokation bringt im Kontext der CCU mitunter Schwierigkeiten mit sich, sobald CO_2 einen ökonomischen Wert oder Marktpreis erhält. Im Kontext dieser Arbeit wurde CO_2 kein Wert zugeschrieben und dieses somit als „Abfall zur Verwertung“ klassifiziert. Der Betrieb einer Carbon Capture Einheit wird jedoch vor allem dann einen wirtschaftlichen Anreiz bieten, wenn CO_2 einen Wert hat und dieses verkauft werden kann, bzw. wenn im Sinne einer CO_2-Steuer Kosten durch vermiedene Emissionen verhindert werden.[120] Eine ökonomische Allokation mit einem Preis für CO_2 würde die Ergebnisse der LCIA beeinflussen und sollte daher im Rahmen zukünftiger Arbeiten nicht außer Acht gelassen werden.

Eine Problematik in der LCA ergibt sich dann, wenn CO_2-Anrechnungen erteilt und anschließend gemäß der ökonomischen Allokation auf die Produkte verteilt werden. Dieses Vorgehen führt dazu, dass Produkte mit höherem Wert auch höhere CO_2-Anrechnungen erhalten und Produkte mit geringerem Wert geringere Anrechnungen. Diese spiegeln dann nicht mehr die chemisch-physikalische CO_2-Aufnahme der Produkte wieder und führen zu Verzerrungen im GWP. Daher mussten die Anrechnungen der einzelnen Produkte der chemisch-physikalischen CO_2-Aufnahme angeglichen werden, wie es in dieser Arbeit getan wurde. Eine Lösung hierfür wäre die EoL-Emissionen, welche aufgrund der C2G-Betrachtung nicht direkt berücksichtigt werden konnten, ebenfalls ökonomisch auf Basis des produzierenden Prozesses zu allozieren. So würden bei einer ganzheitlichen Betrachtung des Lebenswegs auf EoL-Emissionen und Anrechnung der gleiche Betrag entfallen und diese trotzdem ökonomisch alloziert bleiben.

Die ökonomische Allokation ist zudem ebenfalls keine intuitiv erfassbare Methode, wenn fachfremde mit den Ergebnissen der LCIA konfrontiert werden. Als Beispiel dient hier die Synthese von Ethylen und Propylen in der MTO-Reaktion, die beide als Produkte aus demselben Prozesses stammen und in z. T. gleichen Mengen anfallen. Die physikalische Aufnahme von CO_2 sowie alle Aufwendungen und Emissionen sind pro Tonne Produkt eigentlich identisch und könnten somit gleich verteilt werden. Da Ethylen jedoch einen höheren Wert besitzt als Propylen, entfallen auf Ethylen auch etwas höhere Lasten. Dies ist im Sinne der ökonomischen Allokation logisch, muss jedoch immer wieder gesondert ausgewiesen werden.

Aus diesem Grund entfallen auch auf Benzol vergleichbar wenige Lasten, obwohl der MTA-Prozess deutlich mehr Methanol für die Synthese von Aromaten benötigt, als für die Herstellung von Ethylen oder Propylen notwendig ist. Im Produktspektrum der MTA-Reaktion finden sich vor allem große Anteile an Xylolen und Alkylbenzolen, die einen höheren Marktwert als Benzol besitzen. Da diese Produkte im Rahmen der Arbeit nicht betrachtet wurden, sind auch die Aufwendungen und Emissionen für diese nicht in der LCIA sichtbar.

Es ist prinzipiell sinnvoll, die Aufwendungen und Lasten von CCU-Produkten gemäß der ökonomischen Allokation zu verteilen, führt allerdings auch zu nicht-intuitiven Ergebnissen. Daher ist die Ausarbeitung einer verfeinerten Methodik für Allokationsregeln im Kontext von CCU eine weitere Aufgabe, die in LCA Fachkreisen diskutiert und bewältigt werden muss.

5.4.7 Literaturvergleich

Um die Ergebnisse dieser Arbeit in den aktuellen Forschungsstand einzuordnen, erfolgt an dieser Stelle ein kurzer Literaturvergleich mit ähnlichen Studien.

Eine herausragende Forschungsarbeit ist von *Kätelhön et al.* angefertigt worden, in der die Produktion von 20 Basischemikalien auf Basis von CCU-Technologien beschrieben wird.[133] Eine Aufschlüsselung nach einzelnen Produkten wird nicht vorgenommen, dafür wird ein weltweites Gesamtpotenzial der Treibhausgasreduktion von bis zu 3,5 Gt CO_2-eq. im Jahr 2030 angegeben. Dafür wären allerdings 55 % der projizierten globalen Stromproduktion im Jahr 2030 nötig (18,1 PWh bzw. 65,2 EJ). Als CO_2-Quelle dient einerseits die Abscheidung aus der Luft durch DAC und andererseits eine fiktive hochkonzentrierte Punktquelle mit einer CO_2-Konzentration von 100 %. Dementsprechend bezieht sich das angegebene maximale Reduktionspotenzial auf ein Szenario, in dem CCU-Produkte mit Strom aus Windenergie für die Elektrolyse und mit CO_2 aus einer 100%ig konzentrierten Punktquelle erzeugt werden. Würde eine weniger konzentrierte Quelle genutzt, so stiege der Energiebedarf höchstwahrscheinlich an. Ein direkter Vergleich mit den Ergebnissen dieser Arbeit ist aufgrund der unterschiedlichen Bezugsjahre nicht möglich. Anzumerken ist jedoch, dass innerhalb der von *Kätelhön et al.* angefertigten Studie andere Technologien mit einem weitaus größerem Treibhausgasreduktionspotenzial aufgezeigt werden, wie z. B. die Umstellung auf E-Mobilität oder Wärmepumpen statt Gasheizungen. Die Umstellung von der konventionellen auf die CCU-Produktion für Chemikalien zur Reduktion der Treibhausgasemissionen sollte daher nicht vorrangig betrieben werden.

Die von *Bazzanella & Ausfelder* erfolgte Analyse für die Implementierung von CCU-Technologien in der chemischen Industrie stellt einfachere Berechnungsgrundlagen zur Verfügung.[29] Für die Produktion von einer Tonne Methanol werden durch CCU 1,53 t CO_2-Emissionen vermieden und 39,7 GJ Energie benötigt. Diese beiden Werte liegen innerhalb der maximalen und minimalen Werte für die Szenarien S5 und S10 der Methanolsynthese dieser Arbeit. Für die Synthese einer Tonne Ethylen bzw. Propylen werden stöchiometrisch 2,28 t Methanol benötigt. Die erforderliche zusätzliche Energiemenge für den MTO-Prozess beträgt laut *Bazzanella & Ausfelder* 5 GJ t^{-1}, sodass sich ein Gesamtenergiebedarf von 95,5 GJ t^{-1} Ethylen bzw. Propylen ergibt. Gleichzeitig wird durch CCU eine Reduktion der CO_2-Emissionen von 1,89 t erzielt. In den Szenarien S13–S16 liegt die CO_2-Reduktion zwischen 2,6 t und 4,0 t für die Synthese von Ethylen und Propylen, der Energieaufwand liegt etwas höher bei 94–130 GJ t^{-1}. Die Differenzen in den CO_2-Emissionen bzw. die Einsparungen sind vor allem auf unterschiedliche Referenzwerte der fossilen Prozesse zurückzuführen. Größer wird die Differenz bei Betrachtung der Benzolsynthese via MTA. Stöchiometrisch werden laut *Bazzanella & Ausfelder* 4,3 t Methanol für eine Tonne Aromaten benötigt, was u. a. durch die Berücksichtigung der geringen Gesamtausbeute resultiert. Für den Prozess wird ein Energiebedarf von 171 GJ t^{-1} für Benzol angegeben. Die CO_2-Einsparungen werden wiederum mit 1,7 t pro Tonne Benzol im MTA-Verfahren betitelt. In S17 und S18 dieser Arbeit liegt die CO_2-Einsparung bei Werten von 4,0–4,8 t und der KEA bei 60–80 GJ für eine Tonne Benzol. Methodisch sind die ermittelten Werte im Bericht von *Bazzanella & Ausfelder* prinzipiell als Überschlagsrechnungen zu betrachten und stellen keine systematische LCA dar. Daher ergeben sich durch die vorgenommenen Allokationen und abweichenden Referenzwerte innerhalb dieser Arbeit deutliche Unterschiede, insbesondere beim Energiebedarf, der nicht uneingeschränkt mit dem hier berechneten KEA verglichen werden kann. Für eine erste Einschätzung der Größenordnung der vermiedenen Emissionen und benötigten Energiemengen, ist die Analyse jedoch gut geeignet und stellt im Rahmen ihrer Annahmen valide Ergebnisse zur Verfügung.

Tabelle 12: Überblick über einige LCA-Studien auf Cradle-to-Gate-Basis für CCU-Produkte. Das GWP ist für die jeweiligen Produkte pro Tonne angegeben, da sich die funktionellen Einheiten in den Arbeiten unterscheiden.

CCU-Produkt	Allokation	GWP (kg CO_2-eq./t)	Energiebedarf (GJ/t)	CO_2-Quelle	Anmerkungen	Quelle
Methanol	-	-1440	-	Zementwerk	Aspen Simulation	*Meunier et al.*[67]
Methanol	Ökonomisch	-1129	-	Ethanol-Fermentation	Aspen Simulation	*Matzen et al.*[134]
Methanol	k. A.	7300–8400	-	Abgas/DAC	1000 kg H_2-input, Strommix 2020	*Sternberg et al.*[135]
Methan	k. A.	7700–8900	-	Abgas/DAC	1000 kg H_2-input, Strommix 2020	*Sternberg et al.*[136]
Methanol	Substitution	-1530	39,7	Punktquelle	-	*Bazzanella & Ausfelder*[29]
Ethylen	Substitution	-1890	95,5	Punktquelle	-	*Bazzanella & Ausfelder*[29]
Propylen	Substitution	-1890	95,5	Punktquelle	-	*Bazzanella & Ausfelder*[29]
Benzol	Substitution	-1700	171	Punktquelle	-	*Bazzanella & Ausfelder*[29]
Methanol	k. A.	-30	-	Biogas	*nach Rihko-Struckmann et al.*[137]	*Hoppe et al.*[138]
Methan	k. A.	-1850	-	Biogas	*nach Müller et al.*[78]	*Hoppe et al.*[138]
Methanol	Substitution	-1137	-	Mix	-	*Thonemann & Pizzol*[139]
Methan	Substitution	-571	-	Mix	-	*Thonemann & Pizzol*[139]

Es existieren viele weitere Studien zu den Einflüssen der erneuerbaren Chemikalienproduktion durch CCU. Einige der aktuellen Publikationen sind in Tabelle 12 zusammengestellt. Eine Schwierigkeit beim direkten Vergleich der Studien stellen die unterschiedlichen methodischen Herangehensweisen und die vielen unterschiedlichen Annahmen dar, welche im Vorhinein getroffen werden. Unterschiede in der Allokationsmethode, der Wahl verschiedener funktioneller Einheiten und der CO_2- und H_2-Quellen beeinflussen die Ergebnisse deutlich. Zudem fehlen in vielen Studien wichtige methodische Angaben und Ergebnisse werden nur in Teilen genau beschrieben. In den meisten LCAs werden beispielsweise einzelne Beiträge zum Energiebedarf beschrieben, jedoch nicht der Gesamtenergiebedarf erläutert. Zudem beschränken sich viele Studien nur auf das Treibhauspotenzial als Wirkungskategorie und lassen

viele weitere Kategorien außer Acht. Nichtsdestotrotz ähneln die angegebenen Werte für das Treibhauspotenzial in den meisten Studien denen, die in dieser Arbeit ermittelt wurden. Ein Vergleich in anderen Wirkungskategorien steht jedoch aus.

5.4.8 Schlussfolgerungen

Die Hauptaussagen dieser LCA-Studie für die Produktion von Methanol, Methan, Ethylen, Propylen und Benzol auf Basis von CCU-Technologien werden hier stichpunktartig zusammengefasst:

1. Die Verwendung von elektrischer Energie aus dem deutschen Strommix im Jahr 2014, 2030 und aus Photovoltaik (PV) führt zu deutlichen Mehrbelastungen in allen Wirkungskategorien. In diesen Fällen sollte der erzeugte Strom aus ökologischen Gesichtspunkten nicht für CCU-Prozesse verwendet werden.
2. Die Verwendung von Windenergie und des Strommixes im Jahr 2050 führt zu den geringsten Umweltbelastungen und ist Voraussetzung für die Anwendung von CCU-Technologien.
3. Verschiedene Elektrolysetechnologien (AE, PEM, HTE) unterscheiden sich nicht bedeutend in ihren potenziellen Umweltwirkungen.
4. Die Verwendung von Direct Air Capture (DAC) als CO_2-Quelle führt zu deutlich höheren Belastungen als die Verwendung von CO_2 aus Biogasanlagen, Müllverbrennungsanlagen (MVA) oder Zementwerken mit nachgeschalteter Aminwäsche mit Monoethanolamin (MEA).
5. Die Kombination von Direct Air Capture (DAC) mit Strom aus Photovoltaikanlagen (PV) führt zu einem enormen Flächenbedarf.
6. Die Anwendung von CCU-Technologien für die Synthese von Basischemikalien führt auf der Cradle-to-Gate-Basis (C2G) in allen Szenarien mit Strom aus Windkraftanlangen zu einer deutlichen Reduktion der Treibhausgasemissionen (GWP_{100}) im Vergleich zu fossilen Referenzsynthesen.

7. CCU-Technologien erzeugen keine netto-negativen Emissionen, wenn die End-of-Life-Phase (EoL) mitberücksichtigt wird, bei der die erzeugten Produkte verbrannt werden und das gespeicherte CO_2 freigesetzt wird.
8. Der erhöhte Bedarf erneuerbarer Energien für CCU-Technologien erzeugen durch den zusätzlichen Bedarf an Infrastruktur einen größeren Ressourcenabbau (Stahl, Beton, Kupfer, etc.) und damit steigende Emissionen versauernder Substanzen (AP), eutrophierender Stoffe (EP) und Stoffe, die das stratosphärische Ozonabbaupotenzial (ODP) erhöhen.
9. Die Synthese von Ethylen und Propylen mit CCU hat aufgrund des hohen Bedarfs an Methanol neben dem Treibhauspotenzial (GWP_{100}) keine ökologischen Vorteile gegenüber der fossilen Synthese.
10. Die Synthese von Methanol, Methan und Benzol mit CCU hat nur wenige ökologische Vorteile gegenüber fossilen Prozessen.
11. Das maximale Treibhausgasreduktionspotenzial für Produkte aus CCU-Prozessen liegt bei 56–76 % (DAC-Szenarien) und 84–92 % (Zementwerk-Szenarien).
12. Die Berücksichtigung von Sauerstoff als Nebenprodukt der Elektrolyse führt in der ökonomischen Allokation zu einer Reduktion der Aufwendungen und Lasten der Elektrolyse um 46 % (vgl. Sensitivitätsprüfung).
13. Die Kombination der ökonomischen Allokation und der Zuordnung von CO_2 als „Abfall zur Beseitigung“ ohne ökonomischem Wert (100:0 Allokation), führt zu Minimalergebnissen der ermittelten Treibhausgasemissionen (GWP_{100}). Eine Berücksichtigung von End-of-Life-Emissionen (EoL) sollte auch bei Cradle-to-Gate-Systemen (C2G) erfolgen.
14. Die ökonomische Allokation führt bei CCU-Prozessen mit verschiedenen Produkten zu verzerrten Ergebnissen bei angerechneten CO_2-Aufnahmen. Ein Verfahren, welches intuitivere und chemisch-physikalisch valide Werte liefert, sollte erarbeitet werden.
15. Es gibt kaum einheitliche Studien im Bereich der LCA für CCU-Produkte, sodass ein Vergleich mit ähnlichen Studien aufgrund der unterschiedlichen methodischen Herangehensweise oft schwierig ist.

Generell ist es wichtig an dieser Stelle nochmals zu betonen, dass die ermittelten Ergebnisse nur unter den am Anfang definierten Rahmenbedingungen und den getroffenen Annahmen gültig sind.

Die Prozesse wurden alle auf der Cradle-to-Gate-Basis (C2G) betrachtet, sodass alle Aufwendungen und Emissionen für weitere Transporte, Verarbeitungen, Nutzungsphasen, Recycling und Entsorgung entfallen und lediglich End-of-Life-Emissionen beim GWP_{100} berücksichtigt wurden.

Ebenfalls wurde ein großer Teil der Transportinfrastruktur und Energiespeicher vernachlässigt und mit der vollständigen Wärmeintegration und Auslastung der Produktionsanlagen bereits eine optimale energetische Prozessführung vorausgesetzt. Unter diesen Aspekten sind die ermittelten Ergebnisse als ein „Best-Case“-Szenario zu verstehen, da der Optimierungsbedarf auf Ebene der Prozessführung nahezu vollständig ausgeschöpft wurde.

Nichtsdestotrotz lassen sich weitere Emissionsreduktionen erzielen, indem vor allem die energie- und emissionsintensiven Prozesse wie Stahl-, Kupfer-, Aluminium- und Betonproduktion etc. in Zukunft durch effizientere Prozesse und verbesserte Abgasreinigungen oder alternative Rohstoffquellen mit schonenderen Abbauverfahren ersetzt werden.

Wird die Anwendung von CCU-Technologien in Bezug zu den Gesamtemissionen der Bundesrepublik Deutschland gesetzt, ergibt sich eine große Zahl an Zielkonflikten in den gewählten Wirkungskategorien. Die Vorteile durch Reduktion der CO_2-Emissionen beim Treibhauspotential stehen großen Nachteilen im Energiebedarf und Eutrophierungspotenzial gegenüber.

Zudem ist fraglich, ob im Zuge einer defossilisierten Industrie zukünftig Punktquellen zur Abscheidung und Nutzung von CO_2 (CCU) für zur Verfügung stehen. Verbleibende Emissionen aus fossilen und mineralischen Quellen wie aus Zementwerken müssten für eine treibhausgasneutrale Wirtschaft durch die Abscheidung und Speicherung von CO_2 (CCS) ausgeglichen werden. Um

einen geschlossenen Kohlenstoffkreislauf in der chemischen Industrie zu ermöglichen, kommen daher nur biogene und atmosphärische CO_2-Quellen in Betracht.

Die Einführung von CCU-Technologien zur Produktion von Basischemikalien steht demnach noch vor großen umwelttechnischen Hürden und sollte nur mit Vorsicht als „grüne Alternative“ zur fossilen Chemikalienproduktion bezeichnet werden. Das Potenzial zur Minderung der Treibhausgasemissionen ist jedoch gegeben und sollte daher als Motivation dienen die nötigen Voraussetzungen für die Anwendung der CCU-Technologien zu schaffen.

5.4.9 Ausblick

Das entwickelte Modell zur Synthese von Chemikalien aus CCU-Prozessen beinhaltet weitere Reaktionswege, z. B. die Synthese von Methan aus Synthesegas oder die Synthese von Ethylen durch reduktive Kopplung von Methan (vgl. Kapitel 4.4.2). Auch wurde in der MTA-Reaktion (vgl. Kapitel 4.3.5) auf eine breite Auswahl an Nebenprodukten eingegangen, die in dieser Arbeit nicht berücksichtigt werden konnten. Die Umweltwirkungen dieser Nebenprodukte lassen sich auf Grundlage dieser Arbeit ebenfalls berechnen, sodass ein umfassenderer Überblick über die Umweltwirkungen einer breiten Palette an Basischemikalien erstellt werden kann.

Die Variation von Prozessparametern stellt überdies eine Möglichkeit dar weitere signifikante Parameter zur Reduktion von spezifischen Umweltwirkungen der CCU-Produkte zu identifizieren.

Ausgehend von dem in dieser Arbeit entwickelten Modell lassen sich daher viele weitere Prozesse modellieren und die spezifischen Umweltwirkungen verschiedener Produkte berechnen und analysieren.

6 Zusammenfassung

Der Klimawandel ist eines der drängendsten Probleme unserer Zeit und umso ausgiebiger werden Lösungsansätze in allen Bereichen des gesellschaftlichen Zusammenlebens vorgeschlagen und diskutiert. Die Nutzung von CO_2 als Rohstoff in der chemischen Industrie durch Einbindung von Carbon-Capture-and-Utilization-Technologien (CCU) ist ein Beitrag, welcher als Möglichkeit einer Reduktion der Treibhausgasemissionen und Minderung des Treibhauseffekts sowie zur Entkopplung der chemischen Industrie von fossilen Roh- und Brennstoffen diskutiert wird.

Da neben dem Treibhauspotenzial noch viele weitere Umweltwirkungen existieren, die im aktuellen Diskurs oft unberücksichtigt bleiben, wurde der Einfluss von CCU-Technologien für die Produktion von Basischemikalien im Rahmen dieser Arbeit einer umfassenderen ökologischen Betrachtung unterzogen. Die Methodik des Life Cycle Assessments (LCA) wurde in Kapitel 3 beschrieben und die wichtigsten methodischen Herangehensweisen erörtert. Dazu zählen die Definition eines Ziels und Untersuchungsrahmens (Kapitel 3.2), die Sachbilanz (Kapitel 3.3), die Wirkungsabschätzung (Kapitel 3.4) und die Interpretation und Evaluierung der Ergebnisse (Kapitel 3.5).

In Kapitel 4 wurden diejenigen chemischen Verfahren analysiert, die für die Anwendung von CCU-Technologien von entscheidender Bedeutung sind. Dazu zählt die Abscheidung von CO_2 (Kapitel 4.1) aus der Luft durch Direct Air Capture (DAC) und aus konzentrierten Punktquellen durch Absorption an Monoethanolamin (MEA). Darüber hinaus wurden die Bereitstellung von Wasserstoff durch Elektrolyse (Kapitel 4.2) als Reduktionsmittel und Energieträger sowie chemische Verfahren, die CO_2 und H_2 zu Methanol und weiteren Basischemikalien umwandeln, betrachtet (Kapitel 4.3). Die für die Produktion von Basischemikalien relevanten Prozesse wurden anschließend in einem Modell zusammengeführt.

Ausgehend von dem hier entwickelten Modell wurde die Produktion von fünf Basischemikalien in 18 verschiedenen Szenarien modelliert (Kapitel 5). Die

Produkte Methanol, Methan, Ethylen, Propylen und Benzol, welche zu den weltweit am meisten produzierten Chemikalien gehören, wurden analysiert und die potenziellen Umweltwirkungen der Produktion in acht Wirkungskategorien ermittelt. Das Produktsystem beinhaltete dabei auch die Bereitstellung von Infrastruktur, Produktionsanlagen und Energie für Hintergrundprozesse. Der betrachtete Lebensweg endete nach der Produktion; es wurde ein Cradle-to-Gate-Ansatz (C2G) gewählt. Für die Aufteilung von Aufwendungen und Lasten wurde die ökonomische Allokation für Nebenprodukte angewendet. Die gewählten Wirkungskategorien umfassten das Treibhauspotenzial (GWP_{100}), Versauerungspotenzial (AP), Eutrophierungspotenzial (EP), den kumulierten Energieaufwand (KEA), das stratosphärische Ozonabbaupotenzial (ODP), die Feinstaubbelastung ($PM_{2.5}$), Landnutzung (LU) und Wassernutzung (WU).

Die Ergebnisse der Wirkungsabschätzung wurden anhand der einzelnen Wirkungskategorien diskutiert (Kapitel 5.3) und die CCU-Produktszenarien miteinander verglichen. In der Interpretations- und Evaluationsphase (Kapitel 5.4) wurde auf bedeutende Prozessschritte eingegangen, eine Sensitivitätsprüfung für die Allokation mit und ohne ökonomischem Wert für Sauerstoff durchgeführt und eine Normierung anhand der Emissionen der Bundesrepublik Deutschland im Jahr 2016 vorgenommen. Zusätzlich wurde der Einfluss von End-of-Life-Emissionen (EoL) sowie der Allokationsmethode diskutiert und ein Literaturvergleich mit bereits erfolgten LCA-Studien durchgeführt. Abschließend erfolgte eine Zusammenfassung der Hauptaussagen, wie sie aus der vorliegenden Arbeit abgeleitet werden konnten (Kapitel 5.4.8).

Die angefertigte Arbeit bietet somit eine umfassende Analyse der potenziellen Umweltwirkungen der Produktion von fünf ausgewählten Basischemikalien durch CCU-Prozesse anhand der LCA-Methode. Im Gegensatz zu vielen anderen Studien wurde eine umfassende Auswahl an Wirkungskategorien berücksichtigt und großer Wert auf eine der ISO 14040/44 Normen konforme Herangehensweise an die Erstellung der LCA gelegt. Damit wird ein weiterer Weg für folgende Untersuchungen chemischer Produkte durch CCU-Verfahren anhand der LCA-Methode eröffnet.

Literatur

1 IPCC. Global warming of 1.5°C – an IPCC special report on the impacts of global warming of 1.5 °C above pre-industrial levels and related global greenhouse gas emission pathways, in the context of strengthening the global response to the threat of climate change, sustainable development, and efforts to eradicate poverty. (2018).

2 Dlugokencky, E. & Tans, P. Trends in Atmospheric Carbondioxide. (NOAA/ESRL, www.esrl.noaa.gov/gmd/ccgg/trends/, aufgerufen am 02.09.2019).

3 Trenberth, K. E., Fasullo, J. T. & Kiehl, J. Earth's Global Energy Budget. *Bulletin of the American Meteorological Society* **90**, 311-324, (2009).

4 Etheridge, D. M., Steele, L. P., Langenfelds, R. L., Francey, R. J., Barnola, J.-M. & Morgan, V. I. Natural and anthropogenic changes in atmospheric CO2 over the last 1000 years from air in Antarctic ice and firn. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* **101**, 4115-4128, (1996).

5 Le Quéré, C. *et al.* Global Carbon Budget 2018. *Earth Syst. Sci. Data* **10**, 2141-2194, (2018).

6 Marotzke, J. & Stratmann, M. *Die Zukunft des Klimas: Neue Erkenntnisse, neue Herausforderungen*. 1 edn, (Verlag C.H.Beck, 2015).

7 IPCC. The Ocean and Cryosphere in a Changing Climate. (2019).

8 Olshausen, C. v. CO2-Nutzung als elementare Basisanwendung bei Sunfire, CO2-Plus Abschlusskonferenz. (Sunfire GmbH, 2019).

9 von der Assen, N. *From Life-Cycle Assessment towards Life-Cycle Design of Carbon Dioxide Capture and Utilization.* Doctor thesis, RWTH Aachen, (2015).

10 von der Assen, N., Jung, J. & Bardow, A. Life-cycle assessment of carbon dioxide capture and utilization: avoiding the pitfalls. *Energy & Environmental Science* **6**, (2013).

11 Kuckshinrichs, W. & Hake, J.-F. *Carbon Capture, Storage and Use*. (Springer, 2015).

12 Bastin, J.-F., Finegold, Y., Garcia, C., Mollicone, D., Rezende, M., Routh, D., Zohner, C. M. & Crowther, T. W. The global tree restoration potential. *Science* **365**, 76, (2019).

13 Moncada, L. G. G., Asdrubali, F. & Rotili, A. Influence of new factors on global energy prospects in the medium term: comparison among the 2010, 2011 and 2012 editions of the IEA's World Energy Outlook reports. *Economics and Policy of Energy and the Environment*, (2013).

14 Burger, A., Lünenbürger, B. & Osiek, D. Nachhaltige Stromversorgung der Zukunft, Kosten und Nutzen einer Transformation hin zu 100% erneuerbaren Energien. (Umweltbundesamt, 2012).

15 IEA. World Energy Statistics. (OECD/IEA, 2018).

16 Asdrubali, F., Baldinelli, G., D'Alessandro, F. & Scrucca, F. Life cycle assessment of electricity production from renewable energies: Review and results harmonization. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **42**, 1113-1122, (2015).

17 Icha, P. Entwicklung der spezifischen Kohlendioxid-Emissionen des deutschen Strommix in den Jahren 1990 - 2018. (Umweltbundesamt, 2019).

18 VCI. Basischemie 2030. (2012).

19 VCI. Chemiewirtschaft in Zahlen 2018. (2018).

20 Geres, R., Kohn, A., Lenz, S., Ausfelder, F., Bazzanella, A. M. & Möller, A. Roadmap Chemie 2050 | Auf dem Weg zu einer treibhausgasneutralen chemischen Industrie in Deutschland. (FutureCamp Climate GmbH, DECHEMA Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e. V., 2019).

21 ISO 14040 - INTERNATIONAL STANDARD Environmental management — Life cycle assessment — Principles and framework. (2006).

22 JRC. ILCD Handbook: General guide for Life Cycle Assessment - Detailed guidance. (European Comission, Joint Research Center, Institute for Environment and Sustainability, 2010).

23 ISO 14044 - INTERNATIONAL STANDARD Environmental management — Life cycle assessment — Requirements and guidelines. (2006).

24 BSI. PAS 2050:2011 - Specification for the assessment of the life cycle greenhouse gas emissions of goods and services. (2011).

25 Klöpffer, W. & Grahl, B. *Ökobilanz (LCA): Ein Leitfaden für Ausbildung und Beruf*. (John Wiley & Sons, 2009).

26 *http://www.gabi-software.com/international/index/*.

27 *https://www.ecoinvent.org*.

28 Umweltbundesamt. Prüfung und Aktualisierung der Ökobilanzen für Getränkeverpackungen - Anhänge. (2016).

29 Bazzanella, A. M. & Ausfelder, F. Low carbon energy and feedstock for the European chemical industry. (DECHEMA, 2017).

30 Garrett, R. & Grisham, C. M. Enzymes—kinetics and specificity. *Biochemistry (4th ed., p. 394). Brooks/Cole, Cengage Learning: Belmont, CA*, (2010).

31 Lindskog, S. Structure and mechanism of carbonic anhydrase. *Pharmacology & Therapeutics* **74**, 1-20, (1997).

32 Fasihi, M., Efimova, O. & Breyer, C. Techno-economic assessment of CO2 direct air capture plants. *Journal of Cleaner Production* **224**, 957-980, (2019).

33 Keith, D. W., Holmes, G., St. Angelo, D. & Heidel, K. A Process for Capturing CO2 from the Atmosphere. *Joule* **2**, 1573-1594, (2018).

34 Climeworks. Capturing CO2 from the air: our technology. (2018).

35 Sinha, A., Darunte, L. A., Jones, C. W., Realff, M. J. & Kawajiri, Y. Systems Design and Economic Analysis of Direct Air Capture of CO2 through Temperature Vacuum Swing Adsorption Using MIL-101(Cr)-PEI-800 and mmen-Mg2(dobpdc) MOF Adsorbents. *Industrial & Engineering Chemistry Research* **56**, 750-764, (2017).

36 Derevschikov, V. S., Veselovskaya, J. V., Kardash, T. Y., Trubitsyn, D. A. & Okunev, A. G. Direct CO2 capture from ambient air using K2CO3/Y2O3 composite sorbent. *Fuel* **127**, 212-218, (2014).

37 Bottoms, R. Process for separating acidic gases. *USA Patent US* **1783901**, (1930).

38 Danckwerts, P. V. The reaction of CO2 with ethanolamines. *Chemical Engineering Science* **34**, 443-446, (1979).

39 Rochelle, G. Amine Scrubbing for CO2 Capture. *Science* **325**, 1652-1654, (2009).

40 Luis, P. Use of monoethanolamine (MEA) for CO2 capture in a global scenario: Consequences and alternatives. *Desalination* **380**, 93-99, (2016).

41 Puxty, G., Rowland, R., Allport, A., Yang, Q., Bown, M., Burns, R., Maeder, M. & Attalla, M. Carbon Dioxide Postcombustion Capture: A Novel Screening Study of the Carbon Dioxide Absorption Performance of 76 Amines. *Environmental Science & Technology* **43**, 6427-6433, (2009).

42 Roussanaly, S., Fu, C., Voldsund, M., Anantharaman, R., Spinelli, M. & Romano, M. Techno-economic Analysis of MEA CO2 Capture from a Cement Kiln – Impact of Steam Supply Scenario. *Energy Procedia* **114**, 6229-6239, (2017).

43 Morken, A. K., Pedersen, S., Kleppe, E. R., Wisthaler, A., Vernstad, K., Ullestad, Ø., Flø, N. E., Faramarzi, L. & Hamborg, E. S. Degradation and Emission Results of Amine Plant Operations from MEA Testing at the CO2 Technology Centre Mongstad. *Energy Procedia* **114**, 1245-1262, (2017).

44 Goff, G. S. & Rochelle, G. T. Monoethanolamine Degradation: O2 Mass Transfer Effects under CO2 Capture Conditions. *Industrial & Engineering Chemistry Research* **43**, 6400-6408, (2004).

45 Bello, A. & Idem, R. O. Pathways for the Formation of Products of the Oxidative Degradation of CO2-Loaded Concentrated Aqueous Monoethanolamine Solutions during CO2 Absorption from Flue Gases. *Industrial & Engineering Chemistry Research* **44**, 945-969, (2005).

46 Knudsen, J. N., Jensen, J. N., Vilhelmsen, P.-J. & Biede, O. Experience with CO2 capture from coal flue gas in pilot-scale: Testing of different amine solvents. *Energy Procedia* **1**, 783-790, (2009).

47 Morken, A. K. *et al.* Emission Results of Amine Plant Operations from MEA Testing at the CO2 Technology Centre Mongstad. *Energy Procedia* **63**, 6023-6038, (2014).

48 Husebye, J., Brunsvold, A. L., Roussanaly, S. & Zhang, X. Techno Economic Evaluation of Amine based CO2 Capture: Impact of CO2 Concentration and Steam Supply. *Energy Procedia* **23**, 381-390, (2012).

49 Koumi Ngoh, S. & Njomo, D. An overview of hydrogen gas production from solar energy. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **16**, 6782-6792, (2012).

50 Shiva Kumar, S. & Himabindu, V. Hydrogen production by PEM water electrolysis – A review. *Materials Science for Energy Technologies* **2**, 442-454, (2019).

51 Kuckshinrichs, W., Ketelaer, T. & Koj, J. Economic Analysis of Improved Alkaline Water Electrolysis. *Frontiers in Energy Research* **5**, 1, (2017).

52 Turner, J., Sverdrup, G., Mann, M. K., Maness, P.-C., Kroposki, B., Ghirardi, M., Evans, R. J. & Blake, D. Renewable hydrogen production. *International Journal of Energy Research* **32**, 379-407, (2008).

53 Chi, J. & Yu, H. Water electrolysis based on renewable energy for hydrogen production. *Chinese Journal of Catalysis* **39**, 390-394, (2018).

54 Aricò, A. S., Siracusano, S., Briguglio, N., Baglio, V., Di Blasi, A. & Antonucci, V. Polymer electrolyte membrane water electrolysis: status of technologies and potential applications in combination with renewable power sources. *Journal of Applied Electrochemistry* **43**, 107-118, (2013).

55 Laguna-Bercero, M. A. Recent advances in high temperature electrolysis using solid oxide fuel cells: A review. *Journal of Power Sources* **203**, 4-16, (2012).

56 David, M., Ocampo-Martínez, C. & Sánchez-Peña, R. Advances in alkaline water electrolyzers: A review. *Journal of Energy Storage* **23**, 392-403, (2019).

57 Sapountzi, F. M., Gracia, J. M., Weststrate, C. J., Fredriksson, H. O. A. & Niemantsverdriet, J. W. Electrocatalysts for the generation of hydrogen, oxygen and synthesis gas. *Progress in Energy and Combustion Science* **58**, 1-35, (2017).

58 Sheldon, D. Methanol Production – A Technical History. *Johnson Matthey Technology Review* **61**, 172-182, (2017).

59 Olah, G. A. Towards Oil Independence Through Renewable Methanol Chemistry. *Angewandte Chemie International Edition* **52**, 104-107, (2013).

60 Amenomiya, Y. Methanol synthesis from CO2 + H2 II. Copper-based binary and ternary catalysts. *Applied Catalysis* **30**, 57-68, (1987).

61 Bussche, K. M. V. & Froment, G. F. A Steady-State Kinetic Model for Methanol Synthesis and the Water Gas Shift Reaction on a Commercial Cu/ZnO/Al2O3 Catalyst. *Journal of Catalysis* **161**, 1-10, (1996).

62 Wender, I. Reactions of synthesis gas. *Fuel Processing Technology* **48**, 189-297, (1996).

63 Chinchen, G. C., Denny, P. J., Parker, D. G., Spencer, M. S. & Whan, D. A. Mechanism of methanol synthesis from CO2/CO/H2 mixtures over copper/zinc oxide/alumina catalysts: use of14C-labelled reactants. *Applied Catalysis* **30**, 333-338, (1987).

64 S. Marlin, D., Sarron, E. & Sigurbjörnsson, Ó. Process Advantages of Direct CO2 to Methanol Synthesis. *Frontiers in Chemistry* **6**, 446, (2018).

65 Bergins, C., Tran, K.-C., Koytsoumpa, E.-I., Kakaras, E., Buddenberg, T. & Sigurbjörnsson, Ó. Power to Methanol Solutions for Flexible and Sustainable Operations in Power and Process Industries. (Carbon Recycling International, Iceland; Mitsubishi Hitachi Power Systems Europe GmbH, Germany, 2015).

66 Bertau, M., Offermanns, H., Plass, L., Schmidt, F. & Wernicke, H.-J. *Methanol: The Basic Chemical and Energy Feedstock of the Future*. (Springer, Berlin, Heidelberg, 2014).

67 Meunier, N., Chauvy, R., Mouhoubi, S., Thomas, D. & De Weireld, G. Alternative production of methanol from industrial CO2. *Renewable Energy* **146**, 1192-1203, (2020).

68 Van-Dal, É. S. & Bouallou, C. Design and simulation of a methanol production plant from CO2 hydrogenation. *Journal of Cleaner Production* **57**, 38-45, (2013).

69 Olah, G. A. Beyond Oil and Gas: The Methanol Economy. *Angewandte Chemie International Edition* **44**, 2636-2639, (2005).

70 Sabatier, P. & Senderens, J. Comptes Rendus Des Seances De L'Academie Des Sciences Section VI—Chimie. *Imprimerie Gauthier-Villars: Paris, France*, (1902).

71 Mills, G. A. & Steffgen, F. W. Catalytic Methanation. *Catalysis Reviews* **8**, 159-210, (1974).

72 Wei, W. & Jinlong, G. Methanation of carbon dioxide: an overview. *Frontiers of Chemical Science and Engineering* **5**, 2-10, (2011).

73 Ghaib, K., Nitz, K. & Ben-Fares, F.-Z. Chemical Methanation of CO2: A Review. *ChemBioEng Reviews* **3**, 266-275, (2016).

74 Götz, M., Lefebvre, J., Mörs, F., McDaniel Koch, A., Graf, F., Bajohr, S., Reimert, R. & Kolb, T. Renewable Power-to-Gas: A technological and economic review. *Renewable Energy* **85**, 1371-1390, (2016).

75 Rönsch, S., Schneider, J., Matthischke, S., Schlüter, M., Götz, M., Lefebvre, J., Prabhakaran, P. & Bajohr, S. Review on methanation – From fundamentals to current projects. *Fuel* **166**, 276-296, (2016).

76 Araki, M. & Ponec, V. Methanation of carbon monoxide on nickel and nickel-copper alloys. *Journal of Catalysis* **44**, 439-448, (1976).

77 Specht, M., Brellochs, J., Frick, V., Stuermer, B., Zuberbuehler, U., Sterner, M. & Waldstein, G. Storage of renewable energy in the natural gas grid (Speicherung von Bioenergie und erneuerbarem Strom im Erdgasnetz). *Erdöl Erdgas Kohle* **126**, 342-345, (2010).

78 Müller, B., Müller, K., Teichmann, D. & Arlt, W. Energiespeicherung mittels Methan und energietragenden Stoffen – ein thermodynamischer Vergleich. *Chemie Ingenieur Technik* **83**, 2002-2013, (2011).

79 De Saint Jean, M., Baurens, P. & Bouallou, C. Parametric study of an efficient renewable power-to-substitute-natural-gas process including high-temperature steam electrolysis. *International Journal of Hydrogen Energy* **39**, 17024-17039, (2014).

80 Schaaf, T., Grünig, J., Schuster, M. R., Rothenfluh, T. & Orth, A. Methanation of CO2 - storage of renewable energy in a gas distribution system. *Energy, Sustainability and Society* **4**, 2, (2014).

81 Schildhauer, T. J. & Biollaz, S. M. A. *The Power To Gas Process: Storage of Renewable Energy in the Natural Gas Grid via Fixed Bed Methanation of CO2/H2.* in *Synthetic Natural Gas from Coal, Dry Biomass, and Power-to-Gas Applications* (John Wiley & Sons, Inc., 2016).

82 Faeizah Mohd Rudin, S. N., Muis, Z. A., Hashim, H. & Ho, W. S. Techno-economic Assessment of Integrated Power Plant with Methanation. *Chemical Engineering Transactions* **63**, 451-456, (2018).

83 Newsome, D. S. The Water-Gas Shift Reaction. *Catalysis Reviews* **21**, 275-318, (1980).

84 Daza, Y. A. & Kuhn, J. N. CO2 conversion by reverse water gas shift catalysis: comparison of catalysts, mechanisms and their consequences for CO2 conversion to liquid fuels. *RSC Advances* **6**, 49675-49691, (2016).

85 Kaiser, P., Unde, R. B., Kern, C. & Jess, A. Production of Liquid Hydrocarbons with CO2 as Carbon Source based on Reverse Water-Gas Shift and Fischer-Tropsch Synthesis. *Chemie Ingenieur Technik* **85**, 489-499, (2013).

86 Schwab, E., Milanov, A., Schunk, S. A., Behrens, A. & Schödel, N. Dry Reforming and Reverse Water Gas Shift: Alternatives for Syngas Production? *Chemie Ingenieur Technik* **87**, 347-353, (2015).

87 Chang, C. D. & Silvestri, A. J. The conversion of methanol and other O-compounds to hydrocarbons over zeolite catalysts. *Journal of Catalysis* **47**, 249-259, (1977).

88 Tian, P., Wei, Y., Ye, M. & Liu, Z. Methanol to Olefins (MTO): From Fundamentals to Commercialization. *ACS Catalysis* **5**, 1922-1938, (2015).

89 Sedran, U., Mahay, A. & de Lasa, H. I. Modelling methanol conversion to hydrocarbons: Alternative kinetic models. *The Chemical Engineering Journal* **45**, 33-42, (1990).

90 Schöfelder, H., Hinderer, J., Werther, J. & Keil, F. Olefinsynthese aus Methanol (MTO) im Reaktor mit Zirkulierender Wirbelschicht. *Chemie Ingenieur Technik* **66**, 960-963, (1994).

91 Jiang, Y. *Mechanistic Studies of the Methanol-to-olefin Process on Acidic Zeolite Catalysts by In Situ Solid-state NMR-UV/Vis Spectroscopy.* Doctor thesis, Stuttgart, (2007).

92 Li, J., Wei, Y., Liu, G., Qi, Y., Tian, P., Li, B., He, Y. & Liu, Z. Comparative study of MTO conversion over SAPO-34, H-ZSM-5 and H-ZSM-22: Correlating catalytic performance and reaction mechanism to zeolite topology. *Catalysis Today* **171**, 221-228, (2011).

93 Comas-Vives, A., Valla, M., Copéret, C. & Sautet, P. Cooperativity between Al Sites Promotes Hydrogen Transfer and Carbon–Carbon Bond Formation upon Dimethyl Ether Activation on Alumina. *ACS Central Science* **1**, 313-319, (2015).

94 Bakare, I. A., Muraza, O., Yoshioka, M., Yamani, Z. H. & Yokoi, T. Conversion of methanol to olefins over Al-rich ZSM-5 modified with alkaline earth metal oxides. *Catalysis Science & Technology* **6**, 7852-7859, (2016).

95 Li, J., Wei, Y., Xu, S., Tian, P., Chen, J. & Liu, Z. Heptamethylbenzenium cation formation and the correlated reaction pathway during methanol-to-olefins conversion over DNL-6. *Catalysis Today* **226**, 47-51, (2014).

96 Conte, M. *et al.* Modified zeolite ZSM-5 for the methanol to aromatics reaction. *Catalysis Science & Technology* **2**, 105-112, (2012).

97 Adebajo, M. O. & Long, M. A. The contribution of the methanol-to-aromatics reaction to benzene methylation over ZSM-5 catalysts. *Catalysis Communications* **4**, 71-76, (2003).

98 Kohler, E. How Non-Conventional Feedstocks will Affect Aromatics Technologies. *Oil Gas-Eur. Mag.* **40**, 70, (2014).

99 Fischer, F. & Tropsch, H. Über die Herstellung synthetischer Ölgemische (Synthol) durch Aufbau aus Kohlenoxyd und Wasserstoff. *Brennst. Chem* **4**, 276-285, (1923).

100 Henrici-Olivé, G. & Olivé, S. Die Fischer-Tropsch-Synthese: Molekulargewichtsverteilung der Primärprodukte und Reaktionsmechanismus. *Angewandte Chemie* **88**, 144-150, (1976).

101 Schmidt, P., Batteiger, V., Roth, A., Weindorf, W. & Raksha, T. Power-to-Liquids as Renewable Fuel Option for Aviation: A Review. *Chemie Ingenieur Technik* **90**, 127-140, (2018).

102 Schmidt, P., Weindorf, W., Roth, A., Batteiger, V. & Riegel, F. Power-to-Liquids Potentials and Perspectives for the Future Supply of Renewable Aviation Fuel. (Umweltbundesamt, Berlin, 2016).

103 Lange, J.-P., Sushkevich, V. L., Knorpp, A. J. & van Bokhoven, J. A. Methane-to-Methanol via Chemical Looping: Economic Potential and Guidance for Future Research. *Industrial & Engineering Chemistry Research* **58**, 8674-8680, (2019).

104 Groothaert, M. H., Smeets, P. J., Sels, B. F., Jacobs, P. A. & Schoonheydt, R. A. Selective Oxidation of Methane by the Bis(μ-oxo)dicopper Core Stabilized on ZSM-5 and Mordenite Zeolites. *Journal of the American Chemical Society* **127**, 1394-1395, (2005).

105 Lange, J.-P. Catalysis for biorefineries – performance criteria for industrial operation. *Catalysis Science & Technology* **6**, 4759-4767, (2016).

106 Keller, G. E. & Bhasin, M. M. Synthesis of ethylene via oxidative coupling of methane: I. Determination of active catalysts. *Journal of Catalysis* **73**, 9-19, (1982).

107 Weckhuysen, B. M., Wang, D., Rosynek, M. P. & Lunsford, J. H. Conversion of Methane to Benzene over Transition Metal Ion ZSM-5 Zeolites: I. Catalytic Characterization. *Journal of Catalysis* **175**, 338-346, (1998).

108 Guo, X. *et al.* Direct, Nonoxidative Conversion of Methane to Ethylene, Aromatics, and Hydrogen. *Science* **344**, 616-619, (2014).

109 Jiao, F. *et al.* Selective conversion of syngas to light olefins. *Science* **351**, 1065-1068, (2016).

110 Wesselbaum, S. *et al.* Hydrogenation of carbon dioxide to methanol using a homogeneous ruthenium–Triphos catalyst: from mechanistic investigations to multiphase catalysis. *Chemical Science* **6**, 693-704, (2015).

111 Ohkuma, T. Tailor-made Catalysts for Asymmetric Hydrogenation of Ketones. *Journal of Synthetic Organic Chemistry, Japan* **65**, 1070-1080, (2007).

112 Stocker, T. F. *et al.* Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. (IPCC, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, 2013).

113 Kietzmann, M. Environmental Assessment of Products. Volume 2: Scientific Background; M. Hauschild, H. Wenzel (eds.), Chapman & Hall, London, Weinheim, New York, Tokyo, Melbourne, Madras, 1998, XII +565 pp. *Toxicon* **38**, 471-471, (2000).

114 Heijungs, R. *et al.* Environmental life cycle assessment of products: guide and backgrounds (part 1). (1992).

115 VDI. *VDI 4600 – Kumulierter Energieaufwand (KEA)*. (VDI-Gesellschaft Energie und Umwelt, Beuth Verlag, 2012).

116 Montzka, S. *et al.* Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2010, Global Ozone Research and Monitoring Project. *WMO, Geneva, Switzerland* **516**, (2011).

117 JRC. International Life Cycle Data System (ILCD) Handbook – Recommendations for Life Cycle Impact Assessment in the European context., (European Commission-Joint Research Centre, Luxemburg, 2011).

118 Fehrenbach, H., Grahl, B., Giegrich, J. & Busch, M. Hemeroby as an impact category indicator for the integration of land use into life cycle (impact) assessment. *The International Journal of Life Cycle Assessment* **20**, 1511-1527, (2015).

119 Eurostat. http://appsso.eurostat.ec.europa.eu/, aufgerufen am 05.11.2019.

120 Giegrich, J., Liebich, A., Fröhlich, T. & Fehrenbach, H. Methodological Considerations for the Impact Assessment of CO2 as Raw Material. (ifeu, 2018, nicht veröffentlicht).

121 Fröhlich, T., Blömer, S., Münter, D. & Brischke, L.-A. CO2-Quellen für die PtX-Herstellung in Deutschland - Technologien, Umweltwirkung, Verfügbarkeit. (ifeu, Heidelberg, 2019).

122 Purr, K., Günther, J., Lehmann, H. & Nuss, P. Wege in eine ressourcenschonende Treibhausgasneutralität - RESCUE. (Umweltbundesamt, 2019).

123 Umweltbundesamt. Systemvergleich speicherbarer Energieträger aus erneuerbaren Energien (SYSEET). (ifeu, DLR, JOHANNEUM RESEARCH, 2020, unveröffentlicht).

124 Perry, J. & Chilton, C. H. Chemical Engineers Handbook. *McGraw-Hill* **11**, 911, (1950).

125 de Leeuw, F. A. A. M. A set of emission indicators for long-range transboundary air pollution. *Environmental Science & Policy* **5**, 135-145, (2002).

126 PlasticsEurope. Eco profiles and Environmental Product Declarations of the European Plastics Manufacturers. Ethylene, Propylene, Butadiene, Pyrolysis Gasoline, Ethylene Oxide (EO), Ethylene Glycols (MEG, DEG, TEG). (2012).

127 PlasticsEurope. Eco-profiles and Environmental Product Declarations of the European Plastics Manufacturers. Benzene, Toluene, and Xylenes (Aromatics, BTX). (2013).

128 Matzen, M., Alhajji, M. & Demirel, Y. Chemical storage of wind energy by renewable methanol production: Feasibility analysis using a multi-criteria decision matrix. *Energy* **93**, 343-353, (2015).

129 Umweltbundesamt. Berichterstattung unter der Klimarahmenkonvention der Vereinten Nationen und dem Kyoto-Protokoll 2018. Nationaler Inventarbericht zum Deutschen Treibhausgasinventar 1990 – 2016. (2018).

130 IEA. Technology Roadmap: Energy and GHG Reductions in the Chemical Industry via Catalytic Processes. (International Energy Agency, 2013).

131 CIA. The World Factbook (https://www.cia.gov/library/publications/the-world-factbook/geos/gm.html, aufgerufen am 16.12.2019).

132 von der Assen, N., Voll, P., Peters, M. & Bardow, A. Life cycle assessment of CO2 capture and utilization: a tutorial review. *Chem Soc Rev* **43**, 7982-7994, (2014).

133 Kätelhön, A., Meys, R., Deutz, S., Suh, S. & Bardow, A. Climate change mitigation potential of carbon capture and utilization in the chemical industry. *Proc Natl Acad Sci U S A* **116**, 11187-11194, (2019).

134 Matzen, M. & Demirel, Y. Methanol and dimethyl ether from renewable hydrogen and carbon dioxide: Alternative fuels production and life-cycle assessment. *Journal of Cleaner Production* **139**, 1068-1077, (2016).

135 Sternberg, A., Jens, C. M. & Bardow, A. Life cycle assessment of CO2-based C1-chemicals. *Green Chemistry* **19**, 2244-2259, (2017).

136 Sternberg, A. & Bardow, A. Life Cycle Assessment of Power-to-Gas: Syngas vs Methane. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering* **4**, 4156–4165, (2016).

137 Rihko-Struckmann, L. K., Peschel, A., Hanke-Rauschenbach, R. & Sundmacher, K. Assessment of Methanol Synthesis Utilizing Exhaust CO2 for Chemical Storage of Electrical Energy. *Industrial & Engineering Chemistry Research* **49**, 11073-11078, (2010).

138 Hoppe, W., Thonemann, N. & Bringezu, S. Life Cycle Assessment of Carbon Dioxide-Based Production of Methane and Methanol and Derived Polymers. *Journal of Industrial Ecology* **22**, 327-340, (2018).

139 Thonemann, N. & Pizzol, M. Consequential life cycle assessment of carbon capture and utilization technologies within the chemical industry. *Energy & Environmental Science* **12**, 2253-2263, (2019).

Anhang

Abkürzungsverzeichnis

AE	Alkalische Elektrolyse
AP	Acidification Potential
CC	Carbon Capture
CCS	Carbon Capture and Storage
CCU	Carbon Capture and Utilization
CDR	Carbon Dioxide Removal
C2C	Cradle-to-cradle
C2G	Cradle-to-gate
DAC	Direct Air Capture
DME	Dimethylether
EO	Ethylenoxid
EoL	End-of-Life
EP	Eutrophierungspotenzial
eq.	Äquivalente
FCKW	Fluor-Chlor-Kohlenwasserstoffe
FE	Funktionelle Einheit
FT	Fischer-Tropsch
GtC	Gigatonnen Kohlenstoff

GWP	Global Warming Potential
HMB^+	Heptamethylbenzolkation
HT	Hochtemperatur
HTE	Hochtemperaturelektrolyse
IPCC	Intergovernmental Panel on Climate Change
KEA	Kumulierter Energieaufwand
KW	Kohlenwasserstoffe
LCA	Life Cycle Assessment
LCIA	Life Cycle Impact Assessment
LU	Land Use
MEA	Monoethanolamin
MOF	Metal-Organic Framework
MTA	Methanol-to-Aromatics
MTO	Methanol-to-Olefins
Mt RÖE	Megatonnen Rohöl-Äquivalente
NMVOC	Non-Methane Volatile Organic Compounds
NT	Niedertemperatur
ODP	Ozone Depletion Potential
o/m/p	*ortho/meta/para*
PEM	Polyelektrolytmembran/Proton Exchange Membrane

PtG	Power-to-Gas
PtL	Power-to-Liquid
PM	Particulate Matter
POC	Particulate Organic Compound
PtX	Power-to-X
PV	Photovoltaik
RG	Reaktionsgleichung
RWGS	Reverse Water Gas Shift
SNG	Synthetisches Erdgas/Synthetic Natural Gas
SMR	Steam Methane Reforming
THG	Treibhausgase
TMR	Total Material Requirement
TON	Turn-Over-Number
VOC	Volatile Organic Compound
WU	Water Use

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Strahlungsleistung in W m^{-2} auf der Erde und ihre Energieflüsse in den Jahren 2000–2004. Kurzwellige Strahlung (gelb) fällt ein und wird zum Teil reflektiert und absorbiert, langwellige Strahlung (rot) wird emittiert und ein Teil zurückgestrahlt. Die Strahlungsbilanz ist ausgeglichen.[3] 2

Abbildung 2: Globale Kohlenstoffvorkommen und -flüsse durch anthropogene Eingriffe in GtC pro Jahr. Emissionen duch fossile Brennstoffe (grau) und durch Landnutzungsänderung (orange), Aufnahme an Land (grün) und im Wasser (türkis). 1 GtC entspricht 3,664 Gt CO_2. Durchschnittswerte für die Jahre 2008–2017, Abbildung nach Le Quéré et al.[5] 3

Abbildung 3: CHO-Mischungsdreieck mit verschiedenen, punktuellen Stoffzusammensetzungen. Verbrennungsprozesse (rote Pfeile) bewegen sich im Diagramm immer von der linken zur rechten Seite, natürliche Reduktionsprozesse wie die Photosynthese (grüne Pfeile) laufen von rechts nach links ab. Technologien, die Wasserstoff und CO_2 nutzen, bewegen sich in beide Richtungen (blaue Pfeile).[8] 5

Abbildung 4: Globale Primärenergieversorgung nach Energieträgern im Jahr 2016. Zu den neuen erneuerbare Energien zählen Geothermie, Solarenergie, Windenergie und Meeresenergie.[15] 9

Abbildung 5: Struktur einer Ökobilanz nach ISO EN 14044.[25] 14

Abbildung 6: Allgemeiner Lebensweg eines Produkts von der Rohstoffgewinnung bis zum Lebensende (Cradle-to-Grave). Das Produktsystem besteht aus einzelnen Modulen innerhalb der Systemgrenze. Energie- und Stoffströme betreten und verlassen das System für jedes einzelne Modul.[25] 15

Abbildung 7: LCIA beginnend aus den Emissionen der Sachbilanz (Inventar), einfache Zuordnung zu einer Wirkungskategorie (Auswirkung) und mögliche Bedeutung für Mensch und Umwelt (Endpunkt). FCKW = Fluor-Chlor-Kohlenwasserstoffe, POC = Particulate Organic Compound, VOC = Volatile Organic Compound.[25] 18

Abbildung 8: Überblick über die drei Elektrolyseverfahren 1) AE, 2) PEM und 3) HTE mit technischen Parametern Betriebstemperatur, Zellspannung und Energieverbrauch. A = Anode (blau), K = Kathode (rot). Abbildung nach Sapountzi et al.[57] 27

Abbildung 9: Ergebnisse der Prozesssimulation der Methanolsynthese nach Meunier et al.[67] 30

Abbildung 10: Thermodynamische Gleichgewichtskonzentrationen des Produktgases bei einem Druck von 0,1 MPa für ein H_2:CO_2 Verhältnis von 3:1. Abbildung nach Jess et al.[85] 32

Abbildung 11: Produktsystem mit Vordergrund- und Hintergrundprozessen. Die Vordergrundmodule (grün) und Hintergrundmodule (grau) beziehen jeweils Energie und Materialien und erzeugen (Neben-)Produkte und Emissionen. FE = 1000 kg CCU-Produkt. 41

Abbildung 12: Umberto-Modell mit Stromerzeugung (grau, links), Wasserstofferzeugung (blau), CO_2-Bereitstellung (rosa), Biomasse (grün), CCU-Prozessen (orange) und Hintergrundsystemen (grau, rechts). 48

Abbildung 13: Treibhauspotenzial (GWP_{100}) der Szenarien S1–S10 für die Methanolsynthese. E = Emissionen, G = „Gutschrift“ durch CO_2-Aufnahme, S = Summe aus Emissionen und „Gutschrift“ ohne CO_2-Freisetzung am Lebensende. Die Linie gibt den Referenzwert wieder, unterhalb derer der CCU-Prozess einen Vorteil gegenüber der herkömmlichen Synthese erlangt. 55

Abbildung 14: GWP_{100} für S5 und S10–S18. Vergleich des GWP_{100} von Methanol, Methan, Ethylen, Propylen und Benzol. 58

Abbildung 15: Versauerungspotenzial (AP) von S5 und S10–S18. 60

Abbildung 16: Eutrophierungspotenzial (EP) von S5 und S10–S18. 61

Abbildung 17: Kumulierter Energieaufwand (KEA) von S5 und 10–S18. 62

Abbildung 18: Stratosphärischer Ozonabbau (ODP) von S5 und S10–S18. 64

Abbildung 19: Feinstaubbelastung ($PM_{2.5}$) von S5 und S10–S18. 65

Abbildung 20: Landnutzung (LU) von S5 und S10–S18. 66

Abbildung 21: Wassernutzung (WU) von S5 und S10–S18. 67

Abbildung 22: Sensitivität des GWP_{100} für die ökonomische Allokation der Elektrolyse mit Berücksichtigung von Sauerstoff ($O2) und ohne Sauerstoff ($H2). 71

Abbildung 23: Sensitivität des AP für die ökonomische Allokation der Elektrolyse mit Berücksichtigung von Sauerstoff ($O2) und ohne Sauerstoff ($H2). 72

Abbildung 24: Sensitivität des KEA für die ökonomische Allokation der Elektrolyse mit Berücksichtigung von Sauerstoff ($O2) und ohne Sauerstoff ($H2). 72

Abbildung 25: Normierte Belastung bzw. Entlastung der Methanolsynthese über CCU. 74

Abbildung 26: Normierte Belastung bzw. Entlastung der Methansynthese über CCU. 75

Abbildung 27: Normierte Belastung bzw. Entlastung der Ethylensynthese über CCU. 76

Abbildung 28: Normierte Belastung bzw. Entlastung der Propylensynthese über CCU. 76

Abbildung 29: Normierte Belastung bzw. Entlastung der Benzolsynthese über CCU. 77

Schemenverzeichnis

Schema 1: Reaktionsmechanismus der Hydrolyse von CO_2 durch die Carboanhydrase.[31] 21

Schema 2: HT-DAC mit KOH als Sorptionsmittel und einem Kalziumkreislauf auf der rechten Seite. Die Desorption von CO_2 ist stark endotherm. Abbildung nach Keith et al.[33] 22

Schema 3: Reaktion von Ethylen zu Ethylenoxid und anschließend zu Monoethanolamin (MEA). MEA reagiert mit CO_2 in alkalischer Lösung zum

Carbamat. Unter Temperatureinwirkung wird CO_2 freigesetzt und MEA regeneriert. 24

Schema 4: Reaktionsmechanismus für die Reaktion von CO_2 zu Methanol an einer Kupferoberfläche. Dissoziative Adsorption von H_2, Oxidation von CO und Reaktion zu Wasser sind hier nicht gezeigt.[61] 29

Schema 5: Mechanismus der Sabatier-Reaktion an Nickeloberflächen. 31

Schema 6: Mechanismus der Seitenketten-methylierung mit radioaktiv markiertem ^{13}C über HMB^+-Ionen in DNL-6 nach Li et al.[95] 34

Schema 7: Grundlegender Katalysezyklus der CO_2-Hydrierung am Katalysator [(Triphos)Ru(TMM)] über die Intermediate Ameisensäure und Formaldehyd zu Methanol. [(Triphos)Ru(η^2-O_2CH)(THF)] stellt das katalytisch aktive Intermediat dar. THF = Tetrahydrofuran, TMM = Trimethylenmethan, Triphos = 1,1,1-tris(diphenylphosphinomethyl)ethan.[110] 39

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Produktionsmengen einiger ausgewählter organischer und anorganischer Basischemikalien in der Bundesrepublik Deutschland im Jahr 2017.[19] 11

Tabelle 2: Produktspektrum der MTA-Reaktionen an verschiedenen Zeolithkatalysatoren.[87,97] 35

Tabelle 3: Marktpreise relevanter Chemikalien der EU28 Staaten von 2009–2018. Mengengewichtete Mittelwerte der Exporte und Importe innerhalb und außerhalb Europas.[119] 43

Tabelle 4: Auswahl der Module für verschiedene Szenarien. 49

Tabelle 5: Szenarienauswahl über verschiedene Bereitstellungspfade. 50

Tabelle 6: Ausgewählte Prozessparameter für Module in Umberto. 51

Tabelle 7: Umweltwirkungen der fossilen Referenzen. 52

Tabelle 8: Auflistung der Beiträge einzelner Module zu den Gesamtmodulen CCU-Prozess, CO_2-Abscheidung, Elektrolyse und Hintergrundsystem. 54

Tabelle 9: Maximales Treibhausgasreduktionspotenzial der CCU-Produkte. 59

Tabelle 10: Gesamtemissionen der BRD im Jahr 2016 in sechs Wirkungskategorien.[129] 74

Tabelle 11: Gesamtemissionen der hypothetischen Produktion von Chemikalien durch CCU-Technologie bezogen auf die Gesamtemissionen der BRD in 2016. Oben: CO_2 aus DAC. Unten: CO_2 aus Punktquellen (Zementwerk). 78

Tabelle 12: Überblick über einige LCA-Studien auf Cradle-to-Gate-Basis für CCU-Produkte. Das GWP ist für die jeweiligen Produkte pro Tonne angegeben, da sich die funktionellen Einheiten in den Arbeiten unterscheiden. 84

Tabelle 13: Technologische Metrik der CCU-Prozesse bezogen auf 1000 kg des Produkts. XIV

Tabelle 14: GWP_{100} ohne EoL-Emissionen der Szenarien S1–S18. XX

Tabelle 15: GWP_{100} mit EoL-Emissionen der Szenarien S1–S18. XXI

Tabelle 16: AP der Szenarien S1–S18. XXII

Tabelle 17: EP der Szenarien S1–S18. XXIII

Tabelle 18: KEA der Szenarien S1–S18. XXIV

Tabelle 19: ODP der Szenarien S1–S18. XXV

Tabelle 20: $PM_{2.5}$ der Szenarien S1–S18. XXVI

Tabelle 21: LU der Szenarien S1–S18. XXVII

Tabelle 22: WU der Szenarien S1–S18. XXVIII

Technisches Verzeichnis

Technologische Metrik der CCU-Prozesse

Tabelle 13: Technologische Metrik der CCU-Prozesse bezogen auf 1000 kg des Produkts.

CCU-Produkt	Input	Menge	Einheit	Output	Menge	Einheit
Methanol	CO_2	1.440	kg	Methanol	1.000	kg
	H_2	203	kg	Wasser	568	kg
	Strom	1.188.000	kJ	Wärme	1.400.000	kJ
	Infrastruktur	2,35E-07	unit			
	Al_2O_3	0,183	kg			
	CuO	1,171	kg			
	MgO	0,037	kg			
	ZnO	0,439	kg			
Methan	CO_2	2.945	kg	Methan	1.000	kg
	H_2	506	kg	Wasser	2.451	kg
	Strom	863.636	kJ	Wärme (3 bar, 190 °C)	7.181.818	kJ
	Infrastruktur	9,44E-07	unit	Wärme (10 bar, 220 °C)	10.636.364	kJ
	Al_2O_3	0,002	kg			
	Ni	0,020	kg			
Ethylen	Methanol	5.328	kg	Ethylen	1.000	kg
	Strom	5.328.000	kJ	Propylen	800	kg
	Infrastruktur	6,61E-07	unit	Wasser	3.528	kg
	Zeolith	1,488	kg	Wärme	4.372.157	kJ
Propylen	Methanol	5427	kg	Propylen	1.000	kg
	Strom	5.426.667	kJ	Ethylen	833	kg
	Infrastruktur	6,74E-07	unit	Wasser	3.593	kg
	Zeolith	1,516	kg	Wärme	4.453.123	kJ
Benzol	Methanol	128.370	kg	Benzol	1.000	kg
	Strom	23.609.756	kJ	Aliphaten C_5+	6.418	kg
	Infrastruktur	1,59E-05	unit	Ethylbenzol	463	kg
	Zeolith	36,858	kg	Ethyltoluol	1.171	kg
				Isopropylbenzol	49	kg
				Olefine C_2-C_4	25.674	kg
				Tetramethylbenzol	1.049	kg
				Trimethylbenzol	3.439	kg
				m-Xylol	5.561	kg
				o-Xylol	2.195	kg
				p-Xylol	2.439	kg
				Toluol	6.244	kg
				Wasser	71.887	kg
				Wärme	179.253.049	kJ

Weitere Prozessdaten und Parameter entstammen aus der vom Umweltbundesamt in Auftrag gegebenen und am ifeu angefertigten Studie „Systemvergleich speicherbarer Energieträger aus erneuerbaren Energien (SYSEET)“.[123]

Liste der verwendeten ecoinvent 3.4 Module

Biomasse

- anaerobic digestion plant,..._anaerobic digestion plant construction, agricul._1 [CH]
- chemical factory, organics_chemical factory construction, organics [RER]
- diesel, low-sulfur_diesel production, low-sulfur [Euro...]
- heat and power co-generati..._market for heat and power co-generation unit, 1… [GLO]
- pipeline, natural gas, lon..._market for pipeline, natural gas, long distance._2 [GLO]
- waste mineral oil_market for waste mineral oil [Euro…]

CCU Infrastruktur

- chemical factory, organics_market for chemical factory, organics [GLO]

Direct Air Capture

- aluminium, cast alloy; market for aluminium, cast alloy [GLO]
- gravel, crushed; market for gravel, crushed [RoW]
- concrete, sole plate and foundation; market for concrete, sole plate and foundation [RoW]
- chromium steel pipe; market for chromium steel pipe [GLO]
- ethylene glycol, at plant [RER]
- copper; market for copper [GLO]
- anionic resin; market for anionic resin [GLO]
- polyethylene, high density, granulate; market for polyethylene, high density, granulate [Euro...]
- reinforcing steel; market for reinforcing steel [GLO]
- sand; market for sand [GLO]
- steel, low-alloyed; market for steel, low-alloyed [GLO]
- stone wool, packed; market for stone wool, packed [GLO]

Hintergrundsystem

- sodium hydroxide, 50% in H2O, production mix, at plant [RER]
- monoethanolamine_ethanolamine production [RER]
- diethanolamine_ethanolamine production [RER]
- zinc_market for zinc [GLO]
- ethylene glycol dimethyl ether_ethylene glycol dimethyl ether production [RER]
- carbon black_carbon black production [GLO]
- hydrochloric acid, 30% in H2O, at plant [RER]

- cobalt_market for cobalt [GLO]
- chromium oxide, flakes_market for chromium oxide, flakes [GLO]
- nickel, 99.5%_market for nickel, 99.5% [GLO]
- ammonia, liquid_market for ammonia, liquid [RER]
- Water desalination [MENA]

Infrastruktur Aminwäsche
- concrete, sole plate and foundation; market for concrete, sole plate and foundation [RoW]
- steel, chromium steel 18/8..._market for steel, chromium steel 18/8, hot rolled [GLO]
- transport, freight, lorry ..._market for transport, freight, lorry >32 metric._3 [RER]

Katalysatoren
- aluminium oxide_market for aluminium oxide [GLO]
- cobalt_market for cobalt [GLO]
- copper oxide_market for copper oxide [GLO]
- magnesium oxide_market for magnesium oxide [GLO]
- nickel, 99.5%_market for nickel, 99.5% [GLO]
- zeolite, powder_market for zeolite, powder [GLO]
- zinc oxide_market for zinc oxide [GLO]

Referenzsysteme
- benzene_benzene production [RER]
- ethylene, average_ethylene production, average [RER]
- methanol_methanol production [GLO]
- natural gas, high pressure_natural gas production [DE]
- propylene_propylene production [RER]

Stromerzeugung
- electricity production mix DE 2030
- electricity production mix DE 2050 - GS f. fos. En.
- electricity, high voltage; electricity production, hard coal [DE]
- electricity, high voltage; electricity production, hydro, reservoir, alpine [NO]
- electricity, high voltage; electricity production, lignite [DE]
- electricity, high voltage; electricity production, natural gas, combined cycle [DE]
- electricity, high voltage; electricity production, wind, gr 3MW turbine, onshore [DE]
- electricity, high voltage_electricity production, wind, 1-3MW turbine, offshore [DE]
- electricity, low voltage; electricity production, photovoltaic, 570kWp [DE]
- electricity, low voltage_electricity production, photovoltaic, 3kWp slan… [DE]
- electricity, medium voltage; market for electricity, medium voltage [DE]

- lubricating oil_market for lubricating oil [GLO]
- photovoltaic plant, 570kWp..._market for photovoltaic plant, 570kWp, multi-Si… [GLO]
- photovoltaic slanted-roof ..._market for photovoltaic slanted-roof installati… [GLO]
- PV 570 kWp open ground installation, multi-Si, on open ground [ES, Infra]
- PV energy plant, open ground inst., m-Si, Germany 2050 - GS f. fos. En [ES, Infra]
- tap water_market for tap water [Euro…]
- transport, freight, lorry ..._market for transport, freight, lorry 7.5-16 met... [GLO]
- waste mineral oil_market for waste mineral oil [Euro...]
- wastewater, from residence_market for wastewater, from residence [RoW]
- wind energy plant, offshore, average, Germany [DE]
- wind energy plant, onshore, strong wind, average, Germany [DE]
- wind power plant, 2MW, off..._market for wind power plant, 2MW, offshore, fix... [GLO]
- wind power plant, 2MW, off..._market for wind power plant, 2MW, offshore, mov... [GLO]
- wind turbine network conne..._market for network connection, turbine 4.5MW, o... [GLO]
- wind turbine, 4.5MW, onshore_wind turbine construction, 4.5MW, onshore [GLO]

Wasserstofferzeugung

- acrylonitrile-butadiene-st..._market for acrylonitrile-butadiene-styrene copo… [GLO]
- fuel cell, stack polymer e..._fuel cell production, stack polymer electrolyte… [CH]
- charcoal_market for charcoal [GLO]
- cast iron_market for cast iron [GLO]
- fuel cell, polymer electro..._fuel cell production, polymer electrolyte membr… [CH]
- copper_market for copper [GLO]
- aluminium, wrought alloy_market for aluminium, wrought alloy [GLO]
- glass fibre_market for glass fibre [GLO]
- graphite_market for graphite [GLO]
- heat, district or industri..._market for heat, district or industrial, natura… [CH]
- inverter, 500kW_market for inverter, 500kW [GLO]
- manganese_market for manganese [GLO]
- nickel, 99.5%_market for nickel, 99.5% [GLO]
- N-methyl-2-pyrrolidone_market for N-methyl-2-pyrrolidone [GLO]
- phenolic resin_market for phenolic resin [GLO]
- platinum_market for platinum [GLO]

- polyethylene, high density..._market for polyethylene, high density, granulate [GLO]
- polyphenylene sulfide_market for polyphenylene sulfide [GLO]
- polysulfone_market for polysulfone [GLO]
- propylene glycol, liquid_market for propylene glycol, liquid [GLO]
- sheet rolling, steel_market for sheet rolling, steel [GLO]
- steel, chromium steel 18/8..._market for steel, chromium steel 18/8, hot rolled [GLO]
- steel, low-alloyed_market for steel, low-alloyed [GLO]
- tetrafluoroethylene_market for tetrafluoroethylene [GLO]
- titanium dioxide_market for titanium dioxide [RER]
- zinc_market for zinc [GLO]

Wärmeerzeugung
- Erdgas_aus_VCMPublicEnergy_V1.0
- Geothermie Strom (nach Karlsdottir) [IS]

Zementwerk
- clinker_clinker production [CH]

Normierung

Die Berechnungsgrundlage der Normierung wird exemplarisch an den Ergebnissen aus Szenario 5 der Methanolproduktion gezeigt.

Zunächst wird die Differenz Δ_{GWP} aus den GWP-Werten der CCU- und Referenzprodukte gebildet:

$$\Delta_{GWP} = GWP_{CCU} - GWP_{Ref} = (-686 - 627)\ \frac{kg\ CO_2\ eq.}{t} = -1313\ \frac{kg\ CO_2\ eq.}{t}$$

Der negative Wert indiziert eine Entlastung in der angegebenen Kategorie. Die maximale Emissionsreduktion ε_{Max} des GWP_{100} in % ergibt sich aus dem Quotienten der entsprechenden Emissionen GWP_{CCU} und GWP_{Ref} inklusive der EoL-Emissionen (vgl. Kapitel 5.3.3):

$$\varepsilon_{Max} = 1 - \frac{GWP_{CCU} + EoL}{GWP_{Ref} + EoL} = 1 - \frac{(-686 + 1375)\frac{kg\ CO_2\ eq.}{t}}{(627 + 1375)\frac{kg\ CO_2\ eq.}{t}} = 66\ \%$$

Um die Entlastung Δ_{GWP} auf die Emissionen der BRD im Jahr 2016 zu beziehen, wird der Quotient Q_{GWP} gebildet:

$$Q_{GWP} = \frac{\Delta_{GWP}}{GWP_{BRD}} = \frac{-1313\ \frac{kg\ CO_2\ eq.}{t}}{909.394.000.000\ kg\ CO_2\ eq.} = -1{,}44 \cdot 10^{-9}\frac{1}{t}$$

Die Quotienten werden zueinander in Relation R_{GWP}, R_{AP}, …, gesetzt, indem die Quotienten der anderen Wirkungskategorien Q_{AP}, Q_{EP}, Q_{KEA}, usw. jeweils durch den Quotienten des GWP Q_{GWP} geteilt werden:

$$R_{GWP} = \frac{Q_{GWP}}{-Q_{GWP}} \cdot \varepsilon_{Max} = \frac{-1{,}44 \cdot 10^{-9}\frac{1}{t}}{1{,}44 \cdot 10^{-9}\frac{1}{t}} = -1{,}00$$

$$R_{AP} = \frac{Q_{AP}}{-Q_{GWP}} \cdot \varepsilon_{Max} = \frac{1{,}14 \cdot 10^{-10}\frac{1}{t}}{1{,}44 \cdot 10^{-9}\frac{1}{t}} = 0{,}08$$

$$R_{EP} = \frac{Q_{EP}}{-Q_{GWP}} \cdot \varepsilon_{Max} = \frac{5{,}58 \cdot 10^{-10}\frac{1}{t}}{1{,}44 \cdot 10^{-9}\frac{1}{t}} = 0{,}39$$

…

Die Werte geben damit die relativen Beiträge der Belastung (positiv) und Entlastung (negativ) in Bezug auf das GWP_{100} und die Emissionen der BRD im Jahr 2016 an, wenn der fossile Prozess durch den CCU-Prozess ersetzt werden würde.

Der Gesamtbeitrag G_{GWP}, G_{AP}, …, in % bezogen auf das projizierte Produktionsvolumen und die Emissionen des Jahres 2016 ergibt sich durch Multiplikation des Quotienten Q_{GWP} mit der Produktionsmenge M_{proj}:

$$G_{GWP} = Q_{GWP} \cdot M_{proj} = -1{,}44 \cdot 10^{-9}\frac{1}{t} \cdot 2.300.000\ t = -0.33\ \%$$

…

LCIA Ergebnistabellen

Tabelle 14: GWP_{100} ohne EoL-Emissionen der Szenarien S1–S18.

GWP_{100} ohne EoL (kg CO_2-eq./FE)	**S1**	**S2**	**S3**	**S4**	**S5**	**S6**	**S7**	**S8**	**S9**
CCU-Prozess	**289**	**115**	**48**	**69**	**41**	**41**	**41**	**41**	**41**
CCU Strom	222	76	9	30	2	2	2	2	2
CCU Produktion	28	0	0	0	0	0	0	0	0
CCU Katalysator	5	5	5	5	5	5	5	5	5
CCU Infrastruktur	34	34	34	34	34	34	34	34	34
CO_2-Abscheidung	**-102**	**-799**	**-950**	**-684**	**-773**	**-773**	**-773**	**-1141**	**-1329**
Wärme	524	361	361	524	524	524	524		
CO_2 Strom	677	132	16	94	5	5	5		
CO_2 Produktion	73	83	49	73	73	73	73	234	46
CO_2 Infrastruktur*									0
CO_2 Anrechnung	-1375	-1375	-1375	-1375	-1375	-1375	-1375	-1375	-1375
Elektrolyse	**4606**	**1503**	**160**	**878**	**42**	**44**	**39**	**42**	**42**
H_2 Strom	4601	1499	157	873	37	40	37	37	37
H_2 Produktion	5	2	2	5	5	4	2	5	5
H_2 Infrastruktur**		2	0						
Hintergrund	**14**	**7**	**5**	**6**	**5**	**0**	**0**	**5**	**5**
Strom	9	2	0	1	0	0	0	0	0
Hilfsmaterialien	5	5	5	5	5	0	0	5	5
Gesamtergebnis	**4807**	**826**	**-737**	**269**	**-686**	**-688**	**-693**	**-1053**	**-1241**

GWP_{100} ohne EoL (kg CO_2-eq./FE)	**S10**	**S11**	**S12**	**S13**	**S14**	**S15**	**S16**	**S17**	**S18**
CCU-Prozess	**41**	**139**	**139**	**187**	**187**	**179**	**179**	**117**	**117**
CCU Strom	2	1	1	10	10	10	10	4	4
CCU Produktion	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CCU Katalysator	5	0	0	20	20	19	19	13	13
CCU Infrastruktur	34	137	137	157	157	151	151	100	100
CO_2-Abscheidung	**-1204**	**-2302**	**-2734**	**-1455**	**-2755**	**-1522**	**-2771**	**-2366**	**-3196**
Wärme	163	288		1451	362	1394	348	868	173
CO_2 Strom	0	11		17	0	16	0	11	0
CO_2 Produktion	8	149	16	219	24	211	23	140	15
CO_2 Infrastruktur*	0		0		0		0		0
CO_2 Anrechnung	-1375	-2750	-2750	-3142	-3142	-3142	-3142	-3385	-3385
Elektrolyse	**42**	**105**	**104**	**127**	**127**	**122**	**122**	**81**	**81**
H_2 Strom	37	93	92	113	113	108	108	72	72
H_2 Produktion	5	12	12	15	15	14	14	9	9
H_2 Infrastruktur**									
Hintergrund	**5**	**11**	**11**	**14**	**14**	**13**	**13**	**9**	**9**
Strom	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Hilfsmaterialien	5	11	11	14	14	13	13	9	9
Gesamtergebnis	**-1116**	**-2047**	**-2480**	**-1127**	**-2428**	**-1206**	**-2456**	**-2160**	**-2990**

*) Für DAC in CO_2 Produktion enthalten. **) In H_2 Produktion enthalten.

Tabelle 15: GWP_{100} mit EoL-Emissionen der Szenarien S1–S18.

GWP_{100} mit EoL (kg CO_2-eq./FE)	**S1**	**S2**	**S3**	**S4**	**S5**	**S6**	**S7**	**S8**	**S9**
CCU-Prozess	**289**	**115**	**48**	**69**	**41**	**41**	**41**	**41**	**41**
CCU Strom	222	76	9	30	2	2	2	2	2
CCU Produktion	28	0	0	0	0	0	0	0	0
CCU Katalysator	5	5	5	5	5	5	5	5	5
CCU Infrastruktur	34	34	34	34	34	34	34	34	34
CO_2-Abscheidung	**1273**	**576**	**425**	**691**	**602**	**602**	**602**	**234**	**46**
Wärme	524	361	361	524	524	524	524		
CO_2 Strom	677	132	16	94	5	5	5		
CO_2 Produktion	73	83	49	73	73	73	73	234	46
CO_2 Infrastruktur*									0
Elektrolyse	**4606**	**1503**	**160**	**878**	**42**	**44**	**39**	**42**	**42**
H_2 Strom	4601	1499	157	873	37	40	37	37	37
H_2 Produktion	5	2	2	5	5	4	2	5	5
H_2 Infrastruktur**		2	0						
Hintergrund	**14**	**7**	**5**	**6**	**5**	**0**	**0**	**5**	**5**
Strom	9	2	0	1	0	0	0	0	0
Hilfsmaterialien	5	5	5	5	5	0	0	5	5
Gesamtergebnis	**6182**	**2201**	**638**	**1644**	**689**	**687**	**682**	**322**	**134**

GWP_{100} mit EoL (kg CO_2-eq./FE)	**S10**	**S11**	**S12**	**S13**	**S14**	**S15**	**S16**	**S17**	**S18**
CCU-Prozess	**41**	**139**	**139**	**187**	**187**	**179**	**179**	**117**	**117**
CCU Strom	2	1	1	10	10	10	10	4	4
CCU Produktion	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CCU Katalysator	5	0	0	20	20	19	19	13	13
CCU Infrastruktur	34	137	137	157	157	151	151	100	100
CO_2-Abscheidung	**171**	**448**	**16**	**1687**	**387**	**1620**	**371**	**1019**	**189**
Wärme	163	288		1451	362	1394	348	868	173
CO_2 Strom	0	11		17	0	16	0	11	0
CO_2 Produktion	8	149	16	219	24	211	23	140	15
CO_2 Infrastruktur*	0		0		0		0		0
Elektrolyse	**42**	**105**	**104**	**127**	**127**	**122**	**122**	**81**	**81**
H_2 Strom	37	93	92	113	113	108	108	72	72
H_2 Produktion	5	12	12	15	15	14	14	9	9
H_2 Infrastruktur**									
Hintergrund	**5**	**11**	**11**	**14**	**14**	**13**	**13**	**9**	**9**
Strom	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Hilfsmaterialien	5	11	11	14	14	13	13	9	9
Gesamtergebnis	**259**	**703**	**270**	**2015**	**714**	**1936**	**686**	**1225**	**395**

*) Für DAC in CO_2 Produktion enthalten. **) In H_2 Produktion enthalten.

Tabelle 16: AP der Szenarien S1–S18.

AP (kg SO_2-eq./FE)	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9
CCU-Prozess	**1,37**	**1,01**	**0,80**	**0,83**	**0,65**	**0,65**	**0,65**	**0,65**	**0,65**
CCU Strom	0,74	0,38	0,17	0,19	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
CCU Katalysator	0,32	0,32	0,32	0,32	0,32	0,32	0,32	0,32	0,32
CCU Infrastruktur	0,31	0,31	0,31	0,31	0,31	0,31	0,31	0,31	0,31
CO_2-Abscheidung	**3,16**	**1,47**	**0,94**	**1,52**	**0,95**	**0,95**	**0,95**	**0,93**	**0,59**
Wärme	0,54	0,37	0,37	0,54	0,54	0,54	0,54		
CO_2 Strom	2,25	0,66	0,29	0,61	0,04	0,04	0,04		
CO_2 Produktion	0,37	0,43	0,28	0,37	0,37	0,37	0,37	0,93	0,59
CO_2 Infrastruktur*									0,00
Elektrolyse	**15,70**	**7,87**	**3,27**	**6,27**	**0,66**	**0,38**	**0,38**	**0,66**	**0,66**
H_2 Strom	15,31	7,49	2,90	5,89	0,27	0,29	0,27	0,27	0,27
H_2 Produktion	0,38	0,37	0,37	0,38	0,38	0,09	0,11	0,38	0,38
H_2 Infrastruktur**		0,01	0,00						
Hintergrund	**0,05**	**0,03**	**0,02**	**0,03**	**0,02**	**0,00**	**0,00**	**0,02**	**0,02**
Strom	0,03	0,01	0,00	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Hilfsmaterialien	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,00	0,00	0,02	0,02
Gesamtergebnis	**20,28**	**10,38**	**5,04**	**8,64**	**2,27**	**1,98**	**1,98**	**2,25**	**1,91**

AP (kg SO_2-eq./FE)	S10	S11	S12	S13	S14	S15	S16	S17	S18
CCU-Prozess	**0,65**	**1,31**	**1,31**	**2,51**	**2,51**	**2,41**	**2,41**	**1,58**	**1,58**
CCU Strom	0,01	0,01	0,01	0,07	0,07	0,07	0,07	0,03	0,03
CCU Katalysator	0,32	0,05	0,05	1,00	1,00	0,96	0,96	0,64	0,64
CCU Infrastruktur	0,31	1,25	1,25	1,43	1,43	1,38	1,38	0,92	0,92
CO_2-Abscheidung	**0,29**	**1,13**	**0,26**	**2,73**	**0,76**	**2,63**	**0,73**	**1,68**	**0,42**
Wärme	0,17	0,30		1,50	0,37	1,44	0,36	0,90	0,18
CO_2 Strom	0,00	0,08		0,12	0,00	0,12	0,00	0,08	0,00
CO_2 Produktion	0,13	0,75	0,26	1,11	0,38	1,07	0,36	0,71	0,24
CO_2 Infrastruktur*	0,00		0,00		0,00		0,00		0,00
Elektrolyse	**0,66**	**1,64**	**1,63**	**1,98**	**1,98**	**1,90**	**1,90**	**1,26**	**1,26**
H_2 Strom	0,27	0,68	0,67	0,83	0,83	0,79	0,79	0,53	0,53
H_2 Produktion	0,38	0,95	0,95	1,16	1,16	1,11	1,11	0,74	0,74
H_2 Infrastruktur**									
Hintergrund	**0,02**	**0,05**	**0,05**	**0,06**	**0,06**	**0,06**	**0,06**	**0,04**	**0,04**
Strom	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Hilfsmaterialien	0,02	0,05	0,05	0,06	0,06	0,06	0,06	0,04	0,04
Gesamtergebnis	**1,62**	**4,13**	**3,24**	**7,28**	**5,30**	**7,00**	**5,09**	**4,57**	**3,31**

*) Für DAC in CO_2 Produktion enthalten. **) In H_2 Produktion enthalten.

Tabelle 17: EP der Szenarien S1–S18.

EP (kg PO_4-eq./FE)	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9
CCU-Prozess	**1,50**	**0,74**	**0,52**	**0,56**	**0,48**	**0,48**	**0,48**	**0,48**	**0,48**
CCU Strom	1,02	0,27	0,04	0,08	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
CCU Katalysator	0,26	0,26	0,26	0,26	0,26	0,26	0,26	0,26	0,26
CCU Infrastruktur	0,22	0,22	0,22	0,22	0,22	0,22	0,22	0,22	0,22
CO_2-Abscheidung	**3,33**	**0,69**	**0,19**	**0,52**	**0,23**	**0,23**	**0,23**	**0,28**	**0,12**
Wärme	0,06	0,04	0,04	0,06	0,06	0,06	0,06		
CO_2 Strom	3,13	0,47	0,08	0,32	0,02	0,02	0,02		
CO_2 Produktion	0,14	0,17	0,06	0,14	0,14	0,14	0,14	0,28	0,12
CO_2 Infrastruktur*									0,00
Elektrolyse	**21,29**	**5,41**	**0,80**	**7,62**	**0,19**	**0,19**	**0,17**	**0,19**	**0,19**
H_2 Strom	21,26	5,38	0,78	7,59	0,16	0,17	0,16	0,16	0,16
H_2 Produktion	0,03	0,02	0,02	0,03	0,03	0,02	0,01	0,03	0,03
H_2 Infrastruktur**		0,01	0,00						
Hintergrund	**0,06**	**0,02**	**0,02**	**0,02**	**0,01**	**0,00**	**0,00**	**0,02**	**0,02**
Strom	0,04	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Hilfsmaterialien	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,00	0,00	0,02	0,02
Gesamtergebnis	**26,18**	**6,87**	**1,52**	**8,72**	**0,91**	**0,89**	**0,88**	**0,97**	**0,81**

EP (kg PO_4-eq./FE)	S10	S11	S12	S13	S14	S15	S16	S17	S18
CCU-Prozess	**0,48**	**0,88**	**0,88**	**1,82**	**1,82**	**1,75**	**1,75**	**1,15**	**1,15**
CCU Strom	0,01	0,01	0,01	0,04	0,04	0,04	0,04	0,02	0,02
CCU Katalysator	0,26	0,00	0,00	0,78	0,78	0,75	0,75	0,50	0,50
CCU Infrastruktur	0,22	0,87	0,87	1,00	1,00	0,96	0,96	0,64	0,64
CO_2-Abscheidung	**0,06**	**0,37**	**0,08**	**0,67**	**0,16**	**0,64**	**0,16**	**0,42**	**0,10**
Wärme	0,02	0,03		0,18	0,04	0,17	0,04	0,11	0,02
CO_2 Strom	0,00	0,05		0,07	0,00	0,07	0,00	0,05	0,00
CO_2 Produktion	0,04	0,28	0,08	0,42	0,12	0,40	0,11	0,27	0,08
CO_2 Infrastruktur*	0,00		0,00		0,00		0,00		0,00
Elektrolyse	**0,19**	**0,48**	**0,47**	**0,58**	**0,58**	**0,56**	**0,56**	**0,37**	**0,37**
H_2 Strom	0,16	0,40	0,40	0,48	0,48	0,47	0,47	0,31	0,31
H_2 Produktion	0,03	0,08	0,08	0,09	0,09	0,09	0,09	0,06	0,06
H_2 Infrastruktur**									
Hintergrund	**0,01**	**0,04**	**0,04**	**0,04**	**0,04**	**0,04**	**0,04**	**0,03**	**0,03**
Strom	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Hilfsmaterialien	0,01	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,03	0,03
Gesamtergebnis	**0,75**	**1,76**	**1,47**	**3,11**	**2,61**	**2,99**	**2,51**	**1,97**	**1,65**

*) Für DAC in CO_2 Produktion enthalten. **) In H_2 Produktion enthalten.

Tabelle 18: KEA der Szenarien S1–S18.

KEA (GJ/FE)	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9
CCU-Prozess	**3,99**	**1,76**	**1,15**	**2,21**	**1,85**	**1,85**	**1,85**	**1,85**	**1,85**
CCU Strom	3,44	1,20	0,60	1,66	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30
CCU Katalysator	0,07	0,07	0,07	0,07	0,07	0,07	0,07	0,07	0,07
CCU Infrastruktur	0,48	0,48	0,48	0,48	0,48	0,48	0,48	0,48	0,48
CO_2-Abscheidung	**19,90**	**8,97**	**7,52**	**14,48**	**13,37**	**13,37**	**13,37**	**4,03**	**0,16**
Wärme	8,39	5,78	5,78	8,39	8,39	8,39	8,39		
CO_2 Strom	10,51	2,10	1,05	5,09	3,98	3,98	3,98		
CO_2 Produktion	1,00	1,09	0,68	1,00	1,00	1,00	1,00	4,03	0,16
CO_2 Infrastruktur*									0,00
Elektrolyse	**71,52**	**23,88**	**10,59**	**37,25**	**27,09**	**29,01**	**26,99**	**27,09**	**27,09**
H_2 Strom	71,46	23,82	10,56	37,19	27,03	28,96	26,97	27,03	27,03
H_2 Produktion	0,06	0,03	0,03	0,06	0,06	0,05	0,02	0,06	0,06
H_2 Infrastruktur**		0,03	0,01						
Hintergrund	**0,23**	**0,12**	**0,11**	**0,16**	**0,14**	**0,06**	**0,06**	**0,10**	**0,10**
Strom	0,14	0,03	0,02	0,07	0,05	0,05	0,05	0,00	0,00
Hilfsmaterialien	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09	0,01	0,01	0,10	0,10
Gesamtergebnis	**95,65**	**34,74**	**19,37**	**54,10**	**42,45**	**44,29**	**42,28**	**33,07**	**29,20**

KEA (GJ/FE)	S10	S11	S12	S13	S14	S15	S16	S17	S18
CCU-Prozess	**1,85**	**2,90**	**2,90**	**9,74**	**9,74**	**9,35**	**9,35**	**4,49**	**4,49**
CCU Strom	1,30	0,95	0,95	7,24	7,24	6,95	6,95	2,90	2,90
CCU Katalysator	0,07	0,00	0,00	0,26	0,26	0,25	0,25	0,17	0,17
CCU Infrastruktur	0,48	1,95	1,95	2,24	2,24	2,15	2,15	1,43	1,43
CO_2-Abscheidung	**2,89**	**14,79**	**0,40**	**38,27**	**6,64**	**36,76**	**6,37**	**23,49**	**3,30**
Wärme	2,61	4,61		23,25	5,80	22,33	5,57	13,91	2,77
CO_2 Strom	0,08	8,13		12,00	0,25	11,53	0,24	7,66	0,16
CO_2 Produktion	0,19	2,04	0,40	3,02	0,58	2,90	0,56	1,93	0,37
CO_2 Infrastruktur*	0,00		0,00		0,00		0,00		0,00
Elektrolyse	**27,09**	**67,54**	**66,75**	**81,77**	**81,77**	**78,55**	**78,55**	**52,18**	**52,18**
H_2 Strom	27,03	67,39	66,60	81,59	81,59	78,37	78,37	52,07	52,07
H_2 Produktion	0,06	0,15	0,15	0,18	0,18	0,17	0,17	0,12	0,12
H_2 Infrastruktur**									
Hintergrund	**0,11**	**0,25**	**0,23**	**0,42**	**0,31**	**0,40**	**0,30**	**0,26**	**0,19**
Strom	0,02	0,03	0,00	0,15	0,04	0,14	0,04	0,09	0,02
Hilfsmaterialien	0,09	0,22	0,22	0,27	0,27	0,26	0,26	0,17	0,17
Gesamtergebnis	**31,94**	**85,48**	**70,27**	**130,20**	**98,46**	**125,06**	**94,57**	**80,43**	**60,17**

*) Für DAC in CO_2 Produktion enthalten. **) In H_2 Produktion enthalten.

Tabelle 19: ODP der Szenarien S1–S18.

ODP (g CFC11-eq./FE)	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9
CCU-Prozess	**0,24**	**0,11**	**0,07**	**0,07**	**0,04**	**0,04**	**0,04**	**0,04**	**0,04**
CCU Strom	0,20	0,07	0,02	0,02	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CCU Katalysator	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
CCU Infrastruktur	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03
CO_2-Abscheidung	**1,71**	**1,18**	**1,08**	**1,18**	**1,11**	**1,11**	**1,11**	**1,33**	**0,01**
Wärme	0,16	0,11	0,11	0,16	0,16	0,16	0,16		
CO_2 Strom	0,60	0,12	0,04	0,08	0,00	0,00	0,00		
CO_2 Produktion	0,94	0,95	0,93	0,94	0,94	0,94	0,94	1,33	0,01
CO_2 Infrastruktur*									0,00
Elektrolyse	**4,12**	**1,37**	**0,40**	**1,34**	**0,04**	**0,04**	**0,03**	**0,04**	**0,04**
H_2 Strom	4,11	1,37	0,39	1,34	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03
H_2 Produktion	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,00	0,01	0,01
H_2 Infrastruktur**		0,00	0,00						
Hintergrund	**0,01**	**0,00**	**0,00**	**0,00**	**0,00**	**0,00**	**0,00**	**0,00**	**0,00**
Strom	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Hilfsmaterialien	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Gesamtergebnis	**6,08**	**2,67**	**1,55**	**2,59**	**1,19**	**1,19**	**1,18**	**1,41**	**0,09**

ODP (g CFC11-eq./FE)	S10	S11	S12	S13	S14	S15	S16	S17	S18
CCU-Prozess	**0,04**	**0,12**	**0,12**	**0,19**	**0,19**	**0,18**	**0,18**	**0,12**	**0,12**
CCU Strom	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,01	0,01	0,00	0,00
CCU Katalysator	0,01	0,00	0,00	0,05	0,05	0,05	0,05	0,03	0,03
CCU Infrastruktur	0,03	0,11	0,11	0,13	0,13	0,13	0,13	0,08	0,08
CO2-Abscheidung	**0,05**	**2,03**	**0,01**	**3,31**	**0,12**	**3,17**	**0,11**	**2,09**	**0,06**
Wärme	0,05	0,09		0,45	0,11	0,43	0,11	0,27	0,05
CO_2 Strom	0,00	0,01		0,01	0,00	0,01	0,00	0,01	0,00
CO_2 Produktion	0,00	1,93	0,01	2,85	0,01	2,73	0,01	1,82	0,01
CO_2 Infrastruktur*	0,00		0,00		0,00		0,00		0,00
Elektrolyse	**0,04**	**0,09**	**0,09**	**0,11**	**0,11**	**0,10**	**0,10**	**0,07**	**0,07**
H_2 Strom	0,03	0,07	0,07	0,09	0,09	0,08	0,08	0,06	0,06
H_2 Produktion	0,01	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,01	0,01
H_2 Infrastruktur**									
Hintergrund	**0,00**	**0,01**	**0,01**	**0,01**	**0,01**	**0,01**	**0,01**	**0,01**	**0,01**
Strom	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Hilfsmaterialien	0,00	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
Gesamtergebnis	**0,14**	**2,24**	**0,22**	**3,61**	**0,42**	**3,47**	**0,41**	**2,28**	**0,25**

*) Für DAC in CO_2 Produktion enthalten. **) In H_2 Produktion enthalten.

Tabelle 20: $PM_{2.5}$ der Szenarien S1–S18.

$PM_{2.5}$ (g $PM_{2.5}$-eq./FE)	**S1**	**S2**	**S3**	**S4**	**S5**	**S6**	**S7**	**S8**	**S9**
CCU-Prozess	**857**	**667**	**537**	**621**	**468**	**468**	**468**	**468**	**468**
CCU Strom	400	211	81	164	11	11	11	11	11
CCU Katalysator	206	206	206	206	206	206	206	206	206
CCU Infrastruktur	251	251	251	251	251	251	251	251	251
CO_2-Abscheidung	**2103**	**1098**	**736**	**1398**	**915**	**915**	**915**	**866**	**226**
Wärme	525	362	362	525	525	525	525		
CO_2 Strom	1222	368	141	517	34	34	34		
CO_2 Produktion	356	369	233	356	356	356	356	866	226
CO_2 Infrastruktur*									0
Elektrolyse	**8528**	**4388**	**1629**	**5192**	**451**	**305**	**295**	**451**	**451**
H_2 Strom	8308	4169	1421	4971	231	247	230	231	231
H_2 Produktion	220	205	205	220	220	59	65	220	220
H_2 Infrastruktur**		14	4						
Hintergrund	**32**	**21**	**18**	**22**	**16**	**2**	**2**	**17**	**17**
Strom	16	6	2	7	0	0	0	0	0
Hilfsmaterialien	15	15	15	15	15	1	1	17	17
Gesamtergebnis	**11520**	**6175**	**2921**	**7232**	**1849**	**1690**	**1680**	**1801**	**1161**

$PM_{2.5}$ (g $PM_{2.5}$-eq./FE)	**S10**	**S11**	**S12**	**S13**	**S14**	**S15**	**S16**	**S17**	**S18**
CCU-Prozess	**468**	**1043**	**1043**	**1862**	**1862**	**1789**	**1789**	**1174**	**1174**
CCU Strom	11	8	8	62	62	59	59	25	25
CCU Katalysator	206	25	25	642	642	617	617	410	410
CCU Infrastruktur	251	1010	1010	1159	1159	1113	1113	739	739
CO_2-Abscheidung	**221**	**1086**	**116**	**2632**	**536**	**2528**	**515**	**1621**	**284**
Wärme	163	289		1454	363	1397	348	870	173
CO_2 Strom	1	69		102	2	98	2	65	1
CO_2 Produktion	57	729	116	1076	171	1033	164	686	109
CO_2 Infrastruktur*	0		0		0		0		0
Elektrolyse	**451**	**1124**	**1117**	**1360**	**1360**	**1307**	**1307**	**868**	**868**
H_2 Strom	231	575	568	696	696	668	668	444	444
H_2 Produktion	220	549	549	665	665	638	638	424	424
H_2 Infrastruktur**									
Hintergrund	**16**	**39**	**38**	**48**	**47**	**46**	**45**	**30**	**30**
Strom	0	0	0	1	0	1	0	1	0
Hilfsmaterialien	15	38	38	47	47	45	45	30	30
Gesamtergebnis	**1155**	**3292**	**2315**	**5902**	**3806**	**5669**	**3656**	**3694**	**2356**

*) Für DAC in CO_2 Produktion enthalten. **) In H_2 Produktion enthalten.

Tabelle 21: LU der Szenarien S1–S18.

LU (m²/FE)	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9
CCU-Prozess	**7,55**	**4,53**	**4,77**	**18,26**	**3,77**	**3,77**	**3,77**	**3,77**	**3,77**
CCU Strom	3,83	0,81	1,06	14,55	0,06	0,06	0,06	0,06	0,06
CCU Katalysator	0,44	0,44	0,44	0,44	0,44	0,44	0,44	0,44	0,44
CCU Infrastruktur	3,27	3,27	3,27	3,27	3,27	3,27	3,27	3,27	3,27
CO_2-Abscheidung	**13,60**	**3,10**	**3,56**	**46,39**	**2,06**	**2,06**	**2,06**	**6,56**	**0,07**
Wärme	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
CO_2 Strom	11,71	1,42	1,84	44,50	0,18	0,18	0,18		
CO_2 Produktion	1,88	1,68	1,72	1,88	1,88	1,88	1,88	6,56	0,06
CO_2 Infrastruktur*									0,00
Elektrolyse	**79,75**	**16,25**	**18,64**	**308,20**	**1,36**	**1,41**	**1,28**	**1,36**	**1,36**
H_2 Strom	79,61	16,10	18,52	308,05	1,22	1,30	1,21	1,22	1,22
H_2 Produktion	0,14	0,08	0,08	0,14	0,14	0,10	0,06	0,14	0,14
H_2 Infrastruktur**		0,06	0,04						
Hintergrund	**0,17**	**0,04**	**0,05**	**0,61**	**0,02**	**0,00**	**0,00**	**0,02**	**0,02**
Strom	0,16	0,02	0,03	0,60	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Hilfsmaterialien	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,00	0,00	0,02	0,02
Gesamtergebnis	**101,07**	**23,91**	**27,02**	**373,46**	**7,22**	**7,25**	**7,12**	**11,71**	**5,22**

LU (m²/FE)	S10	S11	S12	S13	S14	S15	S16	S17	S18
CCU-Prozess	**3,77**	**13,23**	**13,23**	**16,88**	**16,88**	**16,21**	**16,21**	**10,69**	**10,69**
CCU Strom	0,06	0,04	0,04	0,33	0,33	0,31	0,31	0,13	0,13
CCU Katalysator	0,44	0,01	0,01	1,43	1,43	1,38	1,38	0,91	0,91
CCU Infrastruktur	3,27	13,18	13,18	15,12	15,12	14,52	14,52	9,65	9,65
CO_2-Abscheidung	**0,09**	**4,22**	**0,18**	**6,23**	**0,28**	**5,99**	**0,27**	**3,98**	**0,18**
Wärme	0,00	0,00		0,01	0,00	0,01	0,00	0,01	0,00
CO_2 Strom	0,00	0,37		0,54	0,01	0,52	0,01	0,34	0,01
CO_2 Produktion	0,09	3,85	0,18	5,68	0,26	5,46	0,25	3,62	0,17
CO_2 Infrastruktur*	0,00		0,00		0,00		0,00		0,00
Elektrolyse	**1,36**	**3,39**	**3,36**	**4,11**	**4,11**	**3,95**	**3,95**	**2,62**	**2,62**
H_2 Strom	1,22	3,03	3,00	3,67	3,67	3,53	3,53	2,34	2,34
H_2 Produktion	0,14	0,36	0,36	0,44	0,44	0,42	0,42	0,28	0,28
H_2 Infrastruktur**									
Hintergrund	**0,02**	**0,04**	**0,04**	**0,05**	**0,05**	**0,05**	**0,05**	**0,03**	**0,03**
Strom	0,00	0,00	0,00	0,01	0,00	0,01	0,00	0,00	0,00
Hilfsmaterialien	0,01	0,04	0,04	0,05	0,05	0,04	0,04	0,03	0,03
Gesamtergebnis	**5,24**	**20,88**	**16,80**	**27,27**	**21,31**	**26,19**	**20,47**	**17,32**	**13,52**

*) Für DAC in CO_2 Produktion enthalten. **) In H_2 Produktion enthalten.

Tabelle 22: WU der Szenarien S1–S18.

WU (m³/FE)	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9
CCU-Prozess	**1177**	**1225**	**972**	**616**	**386**	**386**	**386**	**386**	**386**
CCU Strom	802	850	597	241	11	11	11	11	11
CCU Katalysator	75	75	75	75	75	75	75	75	75
CCU Infrastruktur	300	300	300	300	300	300	300	300	300
CO_2-Abscheidung	**3234**	**1889**	**1240**	**1533**	**819**	**819**	**819**	**306**	**19**
Wärme	0	0	0	0	0	0	0		
CO_2 Strom	2449	1484	1041	747	33	33	33		
CO_2 Produktion	785	405	198	785	785	785	785	306	18
CO_2 Infrastruktur*									1
Elektrolyse	**16707**	**16863**	**10515**	**6248**	**286**	**286**	**267**	**286**	**286**
H_2 Strom	16648	16811	10474	6189	228	244	227	228	228
H_2 Produktion	58	38	38	58	58	42	40	58	58
H_2 Infrastruktur**		14	2						
Hintergrund	**101**	**72**	**64**	**78**	**68**	**68**	**68**	**3**	**2**
Strom	33	24	17	10	0	0	0	0	0
Hilfsmaterialien	68	47	47	68	68	67	67	3	2
Gesamtergebnis	**21219**	**20049**	**12791**	**8474**	**1560**	**1559**	**1540**	**981**	**693**

WU (m³/FE)	S10	S11	S12	S13	S14	S15	S16	S17	S18
CCU-Prozess	**386**	**1220**	**1220**	**1690**	**1690**	**1624**	**1624**	**1064**	**1064**
CCU Strom	11	8	8	61	61	59	59	24	24
CCU Katalysator	75	4	4	244	244	235	235	156	156
CCU Infrastruktur	300	1207	1207	1385	1385	1330	1330	884	884
CO_2-Abscheidung	**26**	**1674**	**51**	**2472**	**77**	**2374**	**74**	**1577**	**49**
Wärme	0	0		0	0	0	0	0	0
CO_2 Strom	1	68		101	2	97	2	65	1
CO_2 Produktion	24	1606	50	2371	73	2277	70	1513	47
CO_2 Infrastruktur*	1		1		2		2		1
Elektrolyse	**286**	**713**	**707**	**864**	**864**	**830**	**830**	**551**	**551**
H_2 Strom	228	568	561	687	687	660	660	439	439
H_2 Produktion	58	146	146	177	177	170	170	113	113
H_2 Infrastruktur**									
Hintergrund	**22**	**41**	**5**	**190**	**51**	**182**	**49**	**114**	**25**
Strom	0	0	0	1	0	1	0	1	0
Hilfsmaterialien	22	41	5	188	51	181	49	113	25
Gesamtergebnis	**721**	**3648**	**1982**	**5216**	**2683**	**5010**	**2577**	**3306**	**1690**

*) Für DAC in CO_2 Produktion enthalten. **) In H_2 Produktion enthalten.