

# Langfassung Schlussbericht

## zum Verbundvorhaben

Thema:

**Entwicklung eines praktikablen Multikriterien-Systems zur Evaluierung der Chemikalienproduktion (EvaChem), um die vorteilhaftesten Kombinationen aus Rohstoff (fossile Ressourcen, CO<sub>2</sub>, erste und zweite Generation Biomasse), Syntheseweg und Zielmolekül effizient zu identifizieren**

Zuwendungsempfänger:

**Teilvorhaben 1: nova-Institut für politische und ökologische Innovation GmbH**

**Teilvorhaben 2: DECHEMA Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V.**

**Teilvorhaben 3: Leuphana Universität Lüneburg**

Förderkennzeichen:

**Teilvorhaben 1: 22031218**

**Teilvorhaben 2: 2219NR285**

**Teilvorhaben 3: 2219NR297**

Laufzeit:

**01.10.2019 bis 31.05.2021**

Monat der Erstellung:

**07/2021**

Druck:

**01.10.2021**

Gefördert durch:



**Bundesministerium  
für Ernährung  
und Landwirtschaft**

aufgrund eines Beschlusses  
des Deutschen Bundestages

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages mit Mitteln des Bundesministeriums für Ernährung und Landwirtschaft (BMEL) über die Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e.V. (FNR) als Projektträger des BMEL für das Förderprogramm Nachwachsende Rohstoffe unterstützt. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor.



**EvaChem** 



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>8</b>
<b>2</b>	<b>Hintergrund</b>	<b>10</b>
2.1	Nutzung verschiedener Rohstoffe für die Produktion organischer Chemikalien	10
2.1.1	Nutzung von fossilen Ressourcen – Petrochemie	10
2.1.2	Nutzung von CO <sub>2</sub> – <i>Carbon Capture and Utilisation</i> (CCU)	10
2.1.3	Nutzung von Biomasse erster und zweiter Generation – Bioraffinerien	11
2.2	<i>State-of-the-Art</i> zur Evaluierung der Chemikalienproduktion	12
2.3	Ziel des Projekts	16
2.4	Vorgehen im Projekt	18
<b>3</b>	<b>Etablierung und Bewertung des Multikriterien-Systems – Teilvorhaben 1 und 3</b>	<b>20</b>
3.1	Etablierung des Multikriterien-Systems – Teilvorhaben 1	20
3.1.1	Definitionen – Kriterien, Indikatoren und Metriken	22
3.1.2	Sammlung und Klassifizierung bekannter Indikatoren und Metriken	24
3.1.3	Ausschluss bekannter Indikatoren und Metriken gemäß festgelegter Systemkriterien	31
3.1.4	Vorläufiges Multikriterien-System	35
3.2	Optimierung, Bewertung und Finalisierung des Multikriterien-Systems	44
3.2.1	Optimierung des Multikriterien-Systems	44
3.2.2	Bewertung des Multikriterien-Systems – Teilvorhaben 3	48
3.2.3	Finalisierung des Multikriterien-System	55
<b>4</b>	<b>Anwendung des Multikriterien-Systems – Teilvorhaben 2</b>	<b>60</b>
4.1	Anwendung der finalen Kriterien, Metriken und Indikatoren auf Beispiele	60
4.1.1	Ergebnisse des finalen Multikriterien-Systems für Ethylen	63
4.1.2	Ergebnisse des finalen Multikriterien-Systems für Monoethylenglykol (MEG)	65
4.1.3	Ergebnisse des finalen Multikriterien-Systems für Acrylsäure	67
4.1.4	Schlussfolgerungen zur Anwendung des finalen Multikriterien-Systems	69
<b>5</b>	<b>Ergebnisse der Stakeholder-Workshops</b>	<b>71</b>
5.1	Ergebnisse des ersten Stakeholder-Workshops	71
5.2	Ergebnisse des zweiten Stakeholder-Workshops	74
<b>6</b>	<b>Verwertung</b>	<b>78</b>

<b>7 Zusammenfassung der Ergebnisse .....</b>	<b>80</b>
<b>8 Ausblick und weiteres Vorgehen .....</b>	<b>82</b>
<b>9 Veröffentlichungen .....</b>	<b>84</b>
<b>10 Literaturverzeichnis .....</b>	<b>85</b>
<b>11 Abkürzungsverzeichnis.....</b>	<b>87</b>

## Abbildungsverzeichnis

<b>Abbildung 1:</b> Übersicht der unterschiedlichen Definitionen von Kriterien im EvaChem-Projekt. ....	24
<b>Abbildung 2:</b> Rohstoff- und Produkt-basierte Indikatoren und Metriken.....	25
<b>Abbildung 3:</b> Prozess-basierte, Stöchiometrie-basierte System- und Bewertungskriterien und die dazugehörigen Metriken. ....	26
<b>Abbildung 4:</b> Prozess-basierte System- und Bewertungskriterien I und die dazugehörigen Indikatoren und Metriken. ....	26
<b>Abbildung 5:</b> Prozess-basierte System- und Bewertungskriterien II und die dazugehörigen Indikatoren und Metriken. ....	27
<b>Abbildung 6:</b> Prozess-basierte System- und Bewertungskriterien III und die dazugehörigen Indikatoren und Metriken. ....	28
<b>Abbildung 7:</b> Prozess-basierte System- und Bewertungskriterien IV und die dazugehörigen Indikatoren und Metriken. ....	29
<b>Abbildung 8:</b> Prozess-basierte System- und Bewertungskriterien V und die dazugehörigen Indikatoren und Metriken. ....	30
<b>Abbildung 9:</b> Prozess-basierte System- und Bewertungskriterien VI und die dazugehörigen Indikatoren und Metriken. ....	31
<b>Abbildung 10:</b> Ausschlussverfahren 1: System- und Bewertungskriterien dessen Datenerhebung ein zu hoher Aufwand darstellt. ....	32
<b>Abbildung 11:</b> Ausschlussverfahren 2: System- und Bewertungskriterien die irrelevant für die Zielsetzung des Projekts sind.....	33
<b>Abbildung 12:</b> Kriterien, Indikatoren und Metriken die in Ausschlussverfahren 3 auf ihre Redundanz hin überprüft werden. ....	34
<b>Abbildung 13:</b> Vorläufig ausgewählte Kriterien, Indikatoren und Metriken.....	36
<b>Abbildung 14:</b> Prozesswege zur Herstellung von Ethylen. ....	38
<b>Abbildung 15:</b> Prozesswege zur Herstellung von Monoethylenglykol (MEG).....	39
<b>Abbildung 16:</b> Prozesswege zur Herstellung von Acrylsäure.....	39
<b>Abbildung 17:</b> Übersicht Metriken und Indikatoren des optimierten Multikriterien-Systems.....	45
<b>Abbildung 18:</b> Vergleich des optimierten und finalen Systems zur Bezeichnung und Abgrenzung einzelner Prozessschritte .....	49
<b>Abbildung 19:</b> Bisherige Systemdifferenzierung am Beispiel von Ethylen .....	49
<b>Abbildung 20:</b> Überarbeitete, finale Systemdifferenzierung am Beispiel von Ethylen.....	50
<b>Abbildung 21:</b> Anwendungsrelevante Systemgrenzen des Multikriterien-Systems am Beispiel von Ethylen .....	52
<b>Abbildung 22:</b> Bewertungsrelevante Systemgrenzen des Multikriterien-Systems am Beispiel von Ethylen .....	53
<b>Abbildung 23:</b> Bewertungssysteme für die Rohstoffnutzung am Beispiel von Biomasse und die Bedeutung von EvaChem .....	54
<b>Abbildung 24:</b> Übersicht Metriken und Indikatoren des finalen Multikriterien-Systems .....	56

<b>Abbildung 25:</b> Farbschema nach errechnetem prozentualen Anteil zur Darstellung Masse-bezogener Metriken .....	63
<b>Abbildung 26:</b> Übersicht der Prozessrouten für die Herstellung von Ethylen basierend auf der überarbeiteten, finalen Systemdifferenzierung.....	64
<b>Abbildung 27:</b> Übersicht der Prozessrouten für die Herstellung von Monoethylenglykol basierend auf der überarbeiteten, finalen Systemdifferenzierung.....	66
<b>Abbildung 28:</b> Übersicht der Prozessrouten für die Herstellung von Acrylsäure basierend auf der überarbeiteten, finalen Systemdifferenzierung.....	68
<b>Abbildung 29:</b> Zugehörigkeit der Workshopteilnehmer .....	71
<b>Abbildung 30:</b> Umfrage 1: Welche Werkzeuge oder Methoden zur Evaluation der Chemikalienproduktion nutzen Sie bereits? .....	72
<b>Abbildung 31:</b> Umfrage 2: Wie groß ist aus Ihrer Sicht der Bedarf für ein praktikables Multikriterien-System wie EvaChem? .....	72
<b>Abbildung 32:</b> Umfrage 3: Ist die vorgeschlagene Vereinfachung in EvaChem zielführend und sind die Ergebnisse aussagekräftig? .....	73
<b>Abbildung 33:</b> Umfrage 4: Die Darstellung der EvaChem-Ergebnisse ist .....	74
<b>Abbildung 34:</b> Umfrage 5: Sind diese Ergebnisse ausreichend um einzelne Routen zu selektieren und gezielt weiterzuverfolgen? .....	74
<b>Abbildung 35:</b> Umfrage 1: Wurden alle relevanten Prozessrouten zur Ethylen-Produktion abgedeckt? ..	75
<b>Abbildung 36:</b> Umfrage 2: Die gewählten Beispiele geben einen guten Einblick in die Möglichkeiten des Multikriterien-Systems.....	75
<b>Abbildung 37:</b> Umfrage 3: Mir sind die Unterschiede und die Vor-/Nachteile einer Berechnung mit/ohne Prozessdaten klar? .....	75
<b>Abbildung 38:</b> Umfrage 4: Sind die Systemgrenzen und der Anwendungsbereich von EvaChem verständlich definiert? .....	76
<b>Abbildung 39:</b> Umfrage 5: Wie würden Sie ein Tool wie EvaChem am liebsten nutzen?.....	76

# Tabellenverzeichnis

<b>Tabelle 1:</b> Zusammenfassung der Vor- und Nachteile von existierenden Methoden zur Evaluierung der Chemikalienproduktion .....	15
<b>Tabelle 2:</b> Übersicht der bereits für die Projektidee identifizierten Kriterien, Indikatoren und Metriken....	21
<b>Tabelle 3:</b> Allgemeine und EvaChem-spezifische Definitionen von Kriterium, Indikator und Metrik .....	23
<b>Tabelle 4:</b> Vor- und Nachteile des vorläufigen Multikriterien-Systems.....	40
<b>Tabelle 5:</b> Definitionen und Vor- und Nachteile des optimierten Multikriterien-Systems .....	45
<b>Tabelle 6:</b> Definitionen der einzelnen Bezeichnungen im Multikriterien-System.....	51
<b>Tabelle 7:</b> Definitionen und Vor- und Nachteile des finalen Multikriterien-Systems.....	57
<b>Tabelle 8:</b> Übersicht über benötigte Input-Daten zur Berechnung der Indikatoren und Metriken im finalen Multikriterien-System.....	61
<b>Tabelle 9:</b> Formeln zur Berechnung und beispielhafte graphische Darstellung der verwendeten Indikatoren und Metriken. ....	62
<b>Tabelle 10:</b> Ergebnisübersicht Ethylen.....	64
<b>Tabelle 11:</b> Ergebnisübersicht Monoethylenglykol (MEG).....	66
<b>Tabelle 12:</b> Ergebnisübersicht Acrylsäure .....	68
<b>Tabelle 13:</b> Verwertungsplan des EvaChem Multikriterien-Systems.....	78



# 1 Einleitung

Kleine und mittelständische Unternehmen (KMUs) und auch Wissenschaftler haben oft Schwierigkeiten, das Potenzial, das hinter ihrer Chemikalienproduktion in Bezug auf mögliche Kombinationen aus Rohstoff, Syntheseweg und Zielmolekül liegt, hinreichend zu evaluieren. Was sind die stoff- und prozessbezogen vorteilhaftesten Kombinationen? Wann sind Biomasse erster und zweiter Generation oder CO<sub>2</sub> am vorteilhaftesten, für welche Synthesewege und Zielmoleküle bleiben fossile Rohstoffe im Vorteil?

Der Aufwand ist in der Regel hoch, entsprechende einfache Werkzeuge fehlen. Dies erschwert Entwicklungs- und Investitionsentscheidungen, hemmt Innovationen in den Unternehmen und erschwert die Fokussierung der Forschung. Das in EvaChem entwickelte Multikriterien-System geht diese Herausforderung gezielt an.

Es unterscheidet sich von den bestehenden Evaluations-Systemen dadurch, dass es gegenüber bereits existierenden, komplexen Methoden – die meist nur durch Experten und mit einem hohen Aufwand durchgeführt werden können – leicht in der Praxis anwendbar ist, aber gleichzeitig eine im Vergleich zu bekannten, vereinfachten Methoden deutlich höhere Aussagekraft besitzt.

Dies ermöglicht es insbesondere KMUs ihre Chemikalienproduktion eigenständig und mit geringem finanziellem Aufwand, in einer Art *Screening*, zu evaluieren.

Die Evaluation im EvaChem Multikriterien-System erfolgt nach folgenden Aspekten:

- Identifizierung der vorteilhaftesten **stoff- und prozessbezogenen** Kombinationen aus Rohstoff, Syntheseweg und Zielmolekül
- Fokus auf Moleküle und Prozesswege die aus chemischer Sicht vielversprechend sind
- Herstellung von **ressourcen- und energieeffizienten** Produkten
- Das Multikriterien-System muss **wissenschaftlich korrekt** aber auch **praktikabel** und einfach **anwendbar** sein

Nachhaltigkeits- und Wirtschaftsindikatoren mit hohem Datenbedarf liegen **außerhalb** des Untersuchungsrahmens und werden im zu entwickelnden Multikriterien-System nicht betrachtet, dennoch wird es mit EvaChem möglich sein Prozesswege und Kombinationen zu identifizieren die ökologisch und ökonomisch potenziell vorteilhaft sind.

Trotz der Simplizität in der Anwendbarkeit besitzen die Ergebnisse eine hohe Aussagekraft und die Unternehmen können darauf basierend strategische Entscheidungen treffen. Daneben erlaubt der transparente Charakter des Multikriterien-Systems, dass die Analysen jederzeit nachvollziehbar und überprüfbar und die Bewertungsergebnisse vergleichbar sind. Diese Kombination von Leistungsmerkmalen besitzen bisherige Werkzeuge nicht.

Das Ziel des EvaChem-Projekts ist die Entwicklung eines Prototyps eines praktikablen Multikriterien-Systems zur Evaluierung der Chemikalienproduktion (EvaChem), um die stoff- und prozessbezogenen vorteilhaftesten Kombinationen aus Rohstoff (fossile Ressourcen, CO<sub>2</sub>, erste und zweite Generation Biomasse), Syntheseweg und Zielmolekül effizient zu identifizieren.

Auf dieser Basis können z. B. die Zielmoleküle und Prozesswege gefunden werden, für die Biomasse erster und zweiter Generation besonders vielversprechend sind. Hier können sich weitere Entwicklungen und Investitionen lohnen. Ebenso wird deutlich, bei welchen Molekülen der petrochemische Weg vorteilhaft bleibt.

Zielgruppe von EvaChem sind KMUs vor allem aus den Bereichen der Agrar- / Forstwirtschaft und der chemischen Industrie, die eine Hilfestellung für Entwicklungs- und Investitionsentscheidungen erhalten sollen. Die zweite Gruppe sind Wissenschaftler, die dabei unterstützt werden sollen, die Ausrichtung ihrer bio-basierten Forschungs- und Entwicklungsprojekte optimal zu fokussieren. Darüber hinaus können auch weitere Interessierte von diesem Ansatz profitieren.

Das in EvaChem entwickelte Multikriterien-System soll eine Überprüfung von chemischen Prozessen ermöglichen, die so einfach wie möglich und breit anwendbar bleibt, aber die Schwachstellen der derzeitigen Bewertungssysteme überwindet und somit eine bessere und umfassendere Bewertung ermöglicht.

Zu diesem und ähnlichen Zwecken wurde bis heute eine erhebliche Anzahl an Metriken, Methoden und Werkzeugen entwickelt. Teilweise unterscheiden sich diese in ihrem Ziel und Umfang und sind für spezielle Anwendungen optimiert. Einige der Auswertungsmethoden sind leicht anwendbar, haben aber nur eine begrenzte Aussagekraft. Andere sind sehr komplex (Multikriterien-Matrices) und aufgrund des hohen Datenbedarfs in der Praxis kaum anwendbar. Demzufolge ist das Problem also weniger das Fehlen von Metriken, Methoden und Werkzeugen, sondern, dass die häufig angewandten, einfachen Methoden zu wenig Aussagekraft besitzen und die komplexen Bewertungen aufgrund des Aufwandes kaum zum Einsatz kommen – insbesondere nicht bei KMUs.

EvaChem wird hier einen besseren Kompromiss finden: Eine möglichst gute Aussagekraft bei einem möglichst geringen Aufwand sowie einer hohen Nachvollzieh- und Kommunizierbarkeit.

Die erfolgreiche Umsetzung dieser Aspekte wird durch zwei Stakeholder-Workshops, mit Teilnehmern aus der oben genannten Zielgruppe, im Verlauf des Projekts überprüft. Die Ergebnisse aus den Diskussionen und dem Feedback der Stakeholder werden in die iterative Optimierung, Bewertung und Finalisierung des praktikablen Multikriterien-Systems EvaChem einfließen.

## 2 Hintergrund

### 2.1 Nutzung verschiedener Rohstoffe für die Produktion organischer Chemikalien

#### 2.1.1 Nutzung von fossilen Ressourcen – Petrochemie

Zur Produktion organischer Chemikalien wird bisher vor allem Erdöl und im geringeren Umfang Erdgas verwendet. Darüber hinaus sind seit Jahrzehnten Prozesse bekannt, die Kohle als Ausgangsmaterial für die Synthese organischer Stoffe nutzen (z. B. das Fischer-Tropsch-Verfahren), teilweise in Kombination mit anderen Reaktionen. Die meisten in Produkten enthaltenen organischen Moleküle sind von mittlerer Polarität. Die Bestandteile des Erdöls sind kaum funktionalisiert und unpolar, da Erdöl im Wesentlichen aus unsubstituierten Kohlenwasserstoffen besteht und entsprechend kaum funktionelle Gruppen aufweist. Diese Moleküle haben einen niedrigen Oxidationsgrad und sind aufgrund ihrer Kohlenwasserstoffstrukturen (weitgehend Alkane) reaktionsträge. Für ihre Nutzung müssen sie daher meistens aufwändig gezielt oxidiert und weiter funktionalisiert werden.

Da in der Vergangenheit hauptsächlich fossile Quellen (Kohle, Erdöl, Erdgas) genutzt wurden, gehen insbesondere die großtechnisch etablierten Synthesewege von Alkanen und den bei der Aufbereitung entstehenden ungesättigten Kohlenwasserstoffen vom Erdöl aus, insbesondere in Kombination mit Prozessen der Kraftstoffherstellung. Dies geschieht durch großtechnische Prozesse wie *Reforming* und *Cracking* nach der Erdöldestillation. Beim *Reforming* werden Alkane und Cycloalkane aus Naphtha verschiedener Herkunft in aromatische Verbindungen und verzweigte Alkane konvertiert. Das flüssige Hauptprodukt, das so genannte Reformat, besteht vorwiegend aus Benzen, Toluol, Xylen, C<sub>9</sub>- und C<sub>10</sub>/C<sub>11</sub>-Aromaten sowie linearen und verzweigten Alkanen. Der weitaus größte Teil des Erdöls wird in Form verzweigter Alkane als Kraftstoff verwendet (Benzin), wie auch einige höher siedende Anteile (Diesel). Durch *Cracking* werden daneben die gasförmigen Kohlenwasserstoffe Methan, Ethan, Propan und Butan erzeugt. Insbesondere diese niedrig siedenden Anteile und die Aromaten sind wichtige Ausgangsstoffe für die chemische Industrie. Die energetische Nutzung (neben Kraftstoffen auch Heizöl) macht im Vergleich zur stofflichen Nutzung volumenmäßig den weitaus größten Teil der Nutzung von Erdöl aus – bezogen auf die Wertschöpfung liegt die stoffliche Nutzung in der Chemie dagegen weit höher. Innerhalb der stofflichen Nutzung bilden wiederum Kunststoffe den Hauptanteil.

Die im Projekt im Mittelpunkt stehende Frage lautet: Welche petrochemischen Pfade sollten durch Biomasse oder direkter CO<sub>2</sub>-Nutzung substituiert werden, weil sie stoff- und prozessbezogen vorteilhafter sind?

#### 2.1.2 Nutzung von CO<sub>2</sub> – *Carbon Capture and Utilisation (CCU)*

Durch Umsetzung von CO<sub>2</sub> mit Wasserstoff (auf Basis erneuerbarer Energien, z. B. erneuerbarer Überschussenergie) lässt sich Methan synthetisieren. Andere Syntheserouten führen zu Methanol. Beide sind wichtige Grundstoffe der organischen industriellen Chemie, gleichzeitig steht die Freisetzung von CO<sub>2</sub>, z. B. bei der energetischen Nutzung fossiler Ressourcen etwa in Kohlekraftwerken, aber auch anderen technologischen Prozessen wie z. B. der Eisen- und Stahlherstellung, wegen ihres Beitrags zum Klimawandel im Zentrum vieler Diskussionen. Dies führt

zu Überlegungen zur Nutzung von CO<sub>2</sub> als C-Quelle für einfache organische Moleküle (*Carbon Capture and Utilisation* (CCU)) oder deren Nutzung als Kraftstoffe („*Power-to-Fuels*-Ansätze“), auf denen aufbauend wie in der Erdölchemie einfache Kohlenwasserstoffe als Ausgangsstoffe für die organische Synthese dienen können. Zum Aufbau komplexerer Moleküle sind jedoch häufig mehrere aufwändige Reaktionsschritte notwendig. Generell besitzt CO<sub>2</sub> keinen hohen Energiegehalt und benötigt deswegen einen Reaktionspartner mit hohem Energiegehalt wie z.B. Wasserstoff (H<sub>2</sub>) um in chemischen Reaktionen genutzt und umgewandelt werden zu können. Der benötigte Wasserstoff wird durch Elektrolyse erzeugt. Wenn anstelle von Chemie biotechnologische Umwandlungsprozesse genutzt werden, muss kein zusätzlicher Reaktionspartner hinzugefügt werden, da Mikroorganismen die Energie über ihren Stoffwechsel bereitstellen. Bei der Energiezufuhr zur CO<sub>2</sub>-Nutzung ist es absolut notwendig, dass diese aus erneuerbaren Energiequellen stammt, um die Umwelt- und Klimavorteile der CO<sub>2</sub>-basierten Chemikalien zu erhalten.

Derzeit gibt es vielfältige Forschungen zur möglichen Nutzung von CO<sub>2</sub> als Rohstoff für die Methan- und Methanolsynthese sowie weitere Produkte. Andere Nutzungswege führen über das Fischer-Tropsch-Verfahren (FT). Hier können aus Synthesegas (CO<sub>2</sub>, CO und H<sub>2</sub>) synthetisches Kerosin, Benzin, Diesel (DME, OME), Naphtha und langkettige Wachse hergestellt werden.

Über biotechnologische Prozesse mit Archaeen, Cyanobakterien, Bakterien, Pilzen und Algen können schließlich direkt aus CO<sub>2</sub> hochkomplexe Biomoleküle wie Alkohole, organische Säuren oder auch Biopolymere synthetisiert werden.

### 2.1.3 Nutzung von Biomasse erster und zweiter Generation – Bioraffinerien

In den letzten Jahren rückte die Nutzung unterschiedlicher Arten von Biomasse für die Gewinnung organischer Moleküle verstärkt in den Blickpunkt des allgemeinen Interesses. Biomasse enthält eine Vielzahl organischer Verbindungen, die oft hoch funktionalisiert und oxidiert und daher polarer und oft gut wasserlöslich sind. Zum Teil sind diese Moleküle per se als Naturstoffe von Interesse, müssen also nur isoliert und nicht synthetisiert werden. Viele Produkte der organischen Chemie sind eher von mittlerer Polarität. Um Moleküle aus Bioressourcen für viele der bestehenden Anwendungen organischer Stoffe nutzen zu können, müssen sie daher teilweise reduziert und auch bzgl. ihrer chemischen Struktur oft in einfachere Moleküle überführt werden. Dies bedingt teilweise andere Syntheserouten und -prozesse als in der Erdölchemie und bei der Weiterverarbeitung der einfachen Moleküle aus CO<sub>2</sub> (Reduktion anstatt Oxidation), um die für viele Anwendungen nur zu einem gewissen Grad funktionalisierten, zum Teil anders funktionalisierten Moleküle, erhalten zu können. Deshalb können diese Moleküle nicht direkt als Plattformmoleküle in die existierenden Syntheserouten der derzeit vorherrschenden, von Kohlenwasserstoffen ausgehenden Verfahren der technischen Chemie und Verbundproduktion eingespeist werden. Sie müssen dafür in ihrer Komplexität ggf. weiter reduziert werden. Andererseits bedeutet diese Vorgehensweise, wertvolle und von der Natur zu Verfügung gestellte, oft komplexere, molekulare Strukturen (Art und Anzahl funktioneller Gruppen, Grundkörper) zu verlieren, die chemisch-synthetisch nur mit großem Aufwand verfügbar sind (z. B. Zucker und ihre Derivate, Polyphenole, Heterozyklen u.a.). Zudem kann die Stereochemie bzw. Enantiomerenreinheit für die praktische Anwendung von Bedeutung sein, z. B. für die Wirksamkeit oder Nebenwirkungen von Pharmazeutika. Im Rahmen der *Green Chemistry* und der Diskussion über fossile Ressourcen erfährt die Nutzung von Bioressourcen als Quelle für organische Moleküle zunehmend Aufmerksamkeit.

Aber für welche Moleküle und Pfade eignet sich Biomasse erster oder zweiter Generation besonders? Bei einigen Molekülen ist die Entscheidung offensichtlich – so ist Holz bzw. Lignozellulose der Rohstoff der Wahl für die Zelluloseherstellung. Doch für die meisten organischen Chemikalien ist die Antwort weniger eindeutig. Besonders angesichts der Vielzahl möglicher Technologien, die für die Synthese aus erster und zweiter Generation Biomasse, CO<sub>2</sub> oder fossilen Ressourcen jeweils zur Verfügung stehen, und der Vielzahl möglicher Zielmoleküle ist die Frage nach der Wahl der geeignetsten Rohstoffe und Syntheserouten wie auch der zur Bewertung herangezogenen Kriterien äußerst komplex – und die Auswahl wird zukünftig eher noch größer werden, wenn beispielsweise die Nutzung von Abgasen aus der Stahl- oder Zementindustrie sowie diverse weitere Abfallströme hinzukommen.

## 2.2 *State-of-the-Art* zur Evaluierung der Chemikalienproduktion

Zur Evaluierung der Chemikalienproduktion und ähnlichen Zwecken wurden bis heute eine erhebliche Anzahl entsprechender Kriterien und damit verbundener Indikatoren und Metriken entwickelt und in verschiedenen Methoden und Werkzeugen zusammengefasst:

- Metriken zur Ressourcenintensität / -effizienz
- Methodiken basierend auf dem *Life Cycle Assessment*
- Integrierte Methoden
- Hybridmethoden
- Sonstige Werkzeuge

### **Metriken zur Ressourcenintensität / -effizienz**

Zu den Ansätzen, um die Effizienz von chemischen Prozessen zu messen, gehören die Metriken, die sich mit der Frage der Ressourcenintensitäten / -effizienzen (vor allem Masse- und Energieflüsse) befassen, nämlich unter anderen die Atomökonomie (Trost 1991), die *Reaction Mass Efficiency* (Curzons et al. 2001), die *Mass Intensity* (Constable et al. 2002), der *E-Factor* (Sheldon 2017), die *Carbon Efficiency* (Constable et al. 2002) und die *Biomass Utilisation Efficiency* (BUE) (Iffland et al. 2015). Während sich die *Carbon Efficiency* nur auf die Überführung der C-Atome vom Edukt ins Produkt bezieht, betrachten Atomökonomie, *Reaction Mass Efficiency* und die *Biomass Utilisation Efficiency*, C-, O-, H- und andere Atome (S, N etc). Diese Indikatoren sind vergleichsweise einfach zu berechnen. Sie geben aber nur einen begrenzten Teilüberblick, da Prozesse außerhalb der chemischen Umwandlung oder der chemischen Anlage nicht berücksichtigt werden. Außerdem wird nicht zwischen erneuerbaren und nicht erneuerbaren Quellen unterschieden. Darüber hinaus wird die Tatsache, dass es keine ökonomischen oder ökologischen Betrachtungen und Komponenten in diesen Systemen gibt, als eine wesentliche Einschränkung dieser Metriken angesehen. Was die Methodik der *Carbon Efficiency* in der Biokraftstoffproduktion anbelangt so wurde kürzlich herausgefunden, dass neben der *Carbon Efficiency* auch der Bedarf an Prozessenergie innerhalb der Bioraffinerie und die anschließende Biokraftstoffeffizienz für die Effizienz des Gesamtprozesses von Maisstroh zum Biokraftstoff wichtig sind (Fasahati and Maravelias 2018). So sollten sowohl die Atomökonomie als auch die Energieökonomie bei der Betrachtung der Ressourceneffizienz von Prozessen berücksichtigt werden.

### **Methodik basierend auf dem *Life Cycle Assessment***

Die am häufigsten verwendete Methode für eine Betrachtung der ökologischen Nachhaltigkeit ist das *Life Cycle Assessment* (LCA), dt. die Ökobilanz. Die inzwischen gut etablierten LCA-Methodenvarianten und Untermethoden (*Cumulative Energy Demand*, CED; *Carbon Footprint*, CF; *Water Footprint*, WF; *Material Input Per Service*, MIPS) ebenso wie andere, weniger gut etablierte, Lebenszyklusmethoden (*Material Ecological Footprint*, EF; *Environmental Life Cycle Costing*, E-LCC; *Exergetic LCA*, E-LCA; *Energy analysis*, EA; *Social LCA*, S-LCA) weisen eine hohe Komplexität und damit einhergehend einen hohen Bedarf an entsprechend ausgebildetem Personal auf. Die meisten LCA-basierten Werkzeuge (z. B.: GaBi, OpenLCA, SimaPro, TEAM, Umberto, SULCA, CMLCA, RangeLCA, EASETECH, Brightway2) haben den Nachteil, dass ihre Anwendung sehr aufwändig und zeitintensiv ist, sie meist sehr komplex sind und die Ergebnisse oft nur schwer zu interpretieren sind (O'Rourke 2014; Saurat et al. 2015). Insbesondere das Auffinden konsistenter und transparenter Daten für den *Life-Cycle-Inventory*-Schritt gehört zu den aufwändigsten Phasen einer Ökobilanzierung (Morales-Mendoza and Azzaro-Pantel 2017). All diese Faktoren machen den Einsatz der LCA für viele Unternehmen (insbesondere KMUs) – auch in Bezug auf entstehende Kosten – oft impraktikabel. Zwar wurden in der Vergangenheit auch vereinfachte LCA-Tools (z. B.: CCalC, Eco-it, Ecolizer, InstantLCA, EcoFly, BilanP), die eine geringere Komplexität aufweisen, entwickelt (Saurat et al. 2015), doch auch Simplified LCA-Tools stoßen – wie auch Full LCA-Tools – z. B. beim Schließen von Datenlücken schnell an ihre Grenzen (Canals et al. 2011; Saurat et al. 2015). Auch wird die mangelnde Transparenz in Bezug auf die Entstehung von Ergebnissen immer wieder kritisiert. Dies ist z. B. der Nutzung vorberechneter *Life Cycle Impact Assessment*-(LCIA)-Indikatoren zuzuschreiben (Saurat et al. 2015). Ferner lassen sich nicht alle Auswirkungen quantifizieren und die Ergebnisse können aufgrund inkonsistenter Regeln und Vorgehen durch verschiedene Anwender variieren und zu widersprüchlichen Schlussfolgerungen führen. Die Werkzeuge sind zudem wegen ihrer Abhängigkeit von Branchen-Durchschnittsdaten oft nicht spezifisch genug (O'Rourke 2014).

### **Integrierte Methoden**

Ebenfalls existiert eine Fülle von „integrierten Methoden“, die bestehende Methoden der Nachhaltigkeitsbewertung – meist Lebenszyklusmethoden – miteinander oder mit anderen, zum Teil neueren Methodenansätzen (z. B.: *Green Chemistry Metrics* (GCM); (DeVierno Kreuder et al. 2017), kombinieren, um die Entscheidungsfindung im Hinblick auf ökologische, ökonomische und soziale Effizienz zu unterstützen. Unter diesen Methoden sind vor allem ECoD (Karlsson and Luttrupp 2006) und POEMS (de Bakker et al. 2002; van Berkel et al. 1999) sowie die *Eco-Efficiency Analysis* (EEA) ([Link](#)) und SEEBALANCE ([Link](#)) etabliert. Erstere integrieren Lebenszyklusmethoden in standardisierte Umweltmanagementsysteme, die wiederum in das strategische Management von Unternehmen integriert sind, und letztere stellen Schlüsselindikatoren bereit, die mindestens die ökologischen und die ökonomischen Bereiche abdecken. Sie unterscheiden sich in den verwendeten Teilmethoden und dem Ansatz zur Berechnung der Gewichtungen von Teilindikatoren und Indizes. Die meisten Werkzeuge dieser Art verwenden Multikriterien-Analysen, die auch subjektive Parameter zulassen. Eine quantitative Erfassung entlang des gesamten Lebensweges ist bei diesen Werkzeugen möglich, solange soziale Parameter nicht mit einbezogen werden. Auch diese Werkzeuge haben oft den Nachteil, dass sie nur von gut ausgebildetem Personal mit hohem Aufwand angewendet werden können. Aufgrund ihrer zugrunde liegenden Methoden besitzen sie teilweise eine

nur eingeschränkte Flexibilität. Ein weiterer Nachteil dieser Werkzeuge ist, dass sie nicht frei zugänglich sind (Saurat et al. 2015).

### **Hybridmethoden**

Im Unterschied zu den „integrierten Methoden“, welche die Teilmethoden parallel oder hintereinander ablaufen lassen und eine Gewichtung und Zusammenführung der einzelnen Ergebnisse erfordern, können die Teilmethoden von „Hybridmethoden“ zusammen in einem konsistenten Modell berechnet werden. Dies sind z. B. *Hybrid environmentally extended input-output analysis and LCA* (EE-IOA / LCA), *Hybrid LCA and Partial Equilibrium Model* (LCA / PEM), *Hybrid EE-IOA / LCA and General Equilibrium Model* (EE-IOA / LCA / GEM), *Life Cycle Optimisation* (LCO) sowie *Life Cycle Activity Analysis* (LCAA). Allen Werkzeugen gemein ist, dass sie traditionelle Lebenszyklusanalysen integrieren. Die Komplexität dieser Methoden ist sehr hoch – auch weil es teilweise umfangreicher Programmierungskennntnisse bedarf, um die Methoden zu nutzen. Öffentlich zugängliche Werkzeuge die diese Methoden implementieren, existieren nicht (Saurat et al. 2015).

### **Sonstige Werkzeuge**

Neben den oben beschriebenen meist LCA-basierten Methoden wurden weitere Werkzeuge speziell für die chemische Industrie entwickelt (EATOS, EcoScale, EcoSolvent, iSustain, PBT profiler, WAR, ChemSTEER, GC Alt. Purch. Wiz., Solvent Selec. Guides, PMIC, GCA) (Saurat et al. 2015). Diese Werkzeuge haben oft den Nachteil, dass die Erstellung der Datensätze aufwändig ist und einiges an Erfahrung seitens des Anwenders erfordert oder dass die Ergebnisse so allgemein gehalten sind, dass für Entscheider wichtige Informationen entfallen und die Interpretation damit erschwert wird (Tobiszewski et al. 2015).

Viele der oben beschriebenen Werkzeuge benötigen zudem spezielle oder proprietäre Datensätze, die nicht immer frei zugänglich sind. Auch ist aufgrund der Komplexität die Kommunikation der Bewertungsergebnisse über die verschiedenen Ebenen und Fachrichtungen sowie nach außen (Gesellschaft, Kunden, Politik) oft schwierig (DeVierno Kreuder et al. 2017; Saurat et al. 2015).

In der Vergangenheit wurden bereits einige Werkzeuge und Ansätze entwickelt, die insbesondere die Reduktion des Arbeitsaufwands bzw. Vereinfachung des gesamten Bewertungsprozesses zum Ziel hatten. Allerdings weisen auch diese Ansätze Nachteile hinsichtlich einer ganzheitlichen Nachhaltigkeitsbewertung von Prozessen auf. So handelt es sich z.T. um z. B. *Gate-to-Gate*-Analysen die nicht den gesamten Lebenszyklus betrachten und sich nicht / nur eingeschränkt für die Frühphasen-Bewertung eignen (Phan et al. 2015), um Ansätze, die sich hauptsächlich auf die Bewertung bestimmter Bereiche konzentrieren (z. B. Chemikaliensicherheit / Toxizität, GreenScreen, [Link](#)) oder um Werkzeuge, die nicht oder nur eingeschränkt zu nutzen sind, wenn Datenlücken existieren (z. B. *Simplified LCA Tools*; (Canals et al. 2011)).

Teilweise unterscheiden sie sich in ihrem Ziel und Umfang und sind für spezielle Anwendungen optimiert. Einige der Auswertungsmethoden sind leicht anwendbar, haben aber nur eine sehr begrenzte Aussagekraft. Einige andere sind sehr komplex (Multikriterien) und aufgrund des hohen Datenbedarfs in der Praxis kaum anwendbar.

Demzufolge ist das Problem also nicht das Fehlen von Methoden und Werkzeugen zur Evaluierung der Chemikalienproduktion, sondern, dass die häufig angewandten, einfachen Methoden zu wenig Aussagekraft besitzen und die komplexen Bewertungen aufgrund des Aufwandes kaum zum Einsatz kommen – insbesondere nicht bei KMUs oder Förderinstitutionen.

**Tabelle 1:** Zusammenfassung der Vor- und Nachteile von existierenden Methoden zur Evaluierung der Chemikalienproduktion

	Vorteile	Nachteile
<b>Metriken zur Ressourcenintensität / -effizienz</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Einfach zu berechnen</li> <li>• Einfache und nützliche Metrik für schnelle Bewertungen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Prozesse außerhalb der chemischen Umwandlung oder der chemischen Anlage sind nicht berücksichtigt</li> <li>• Unterscheiden nicht zwischen erneuerbaren und nicht erneuerbaren Quellen</li> <li>• Keine ökonomischen oder ökologischen Betrachtungen</li> </ul>
<b>Methodik basierend auf dem <i>Life Cycle Assessment</i></b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Multikriterien-Ansatz (sehr detaillierte Analyse)</li> <li>• Quantitative Erfassung entlang des gesamten Lebensweges möglich</li> <li>• Gut etablierten LCA-Methodenvarianten</li> <li>• Ermöglicht die Bewertung der Unsicherheit</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Sehr aufwändige und zeitintensive Anwendung</li> <li>• Hohe Komplexität</li> <li>• Ergebnisse oft schwer zu interpretieren</li> </ul>
<b>Integrierte Methoden</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Multikriterien-Analyse</li> <li>• Quantitative Erfassung entlang des gesamten Lebensweges möglich</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Enthält subjektive Parameter (besonders bei der Betrachtung der sozialen Dimension der Nachhaltigkeit)</li> <li>• Eingeschränkte Flexibilität</li> <li>• Nicht frei zugänglich</li> </ul>
<b>Hybridmethoden</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Multikriterien-Analyse</li> <li>• Erforderliche Gewichtung und Konsolidierung der Einzelergebnisse</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Hohe Komplexität</li> </ul>
<b>Sonstige Werkzeuge</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Speziell für die chemische Industrie entwickelt</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Erstellung der Datensätze ist aufwändig</li> <li>• Erfahrung des Anwenders nötig</li> <li>• Ergebnisse teilweise sehr allgemein und somit erschwerte Interpretation</li> </ul>

Tabelle 1 zeigt eine Zusammenfassung von Vor- und Nachteilen der oben im Detail beschriebenen existierenden Methoden zur Evaluierung der Chemikalienproduktion.

Um die Effizienz von chemischen Prozessen zu messen, werden Metriken verwendet, die sich mit der Frage der Ressourcenintensitäten / -effizienzen (vor allem bezogen auf die Masse- und Energieflüsse) befassen. Vorteil dieser Metriken ist ihre vergleichsweise einfache Bestimmung, aber sie geben nur einen begrenzten Teilüberblick, da Prozesse außerhalb der chemischen Umwandlung nicht berücksichtigt werden.

Die am weitesten verbreiteten Metriken sind der e-Faktor und die Atomökonomie sowie in den letzten Jahren die *Biomass Utilisation Efficiency* (BUE). Der signifikante Nachteil dieser Systeme ist allerdings, dass hier weder ökonomische, toxikologische oder umweltbezogene Komponenten noch die Prozessenergie berücksichtigt werden und / oder sie nur für bestimmte Ressourcen verwendbar sind.

Die am häufigsten verwendete Methode für eine ökologische Bewertung ist die Ökobilanzierung (*Life Cycle Assessment*, LCA) und ihre gut etablierten Methodenvarianten. Trotz der häufigen Anwendung und der etablierten Methodik gibt es auch hier relevante Nachteile, wie der Aufwand und die Kosten einer Ökobilanz gerade in Bezug auf die Erhebung der Inventardaten, denn die Ökobilanzierung sowie ähnliche Ansätze benötigen nicht nur eine Vielzahl von Daten, sondern die Daten müssen auch von hoher Qualität sein. Dies verhindert einen Einsatz dieser Methode zum *Screening* von Chemieoptionen. Ein weiterer Nachteil ist, dass die Ergebnisse oft sehr stark von den gemachten Annahmen und den Systemgrenzen der Bilanzierung bestimmt werden (Die methodischen Herausforderungen und der hohe Aufwand wurden vom nova-Institut für die FNR bereits im Projekt „Durchführung und Umsetzung von Ökobilanzen für die stoffliche Nutzung von Biomasse“ (FKZ 22007014) umfassend dargestellt).

Darüber hinaus gibt es zwar eine Vielzahl von „integrierten Methoden“ und „hybriden Methoden“, die bestehenden Methoden der Nachhaltigkeitsbewertung (meist Ökobilanz) mit anderen Indikatoren kombinieren, aber auch diese Methoden haben Nachteile durch hohe Datenanforderungen, die die Anwendung in der Frühphase einer Prozessentwicklung einschränken.

## 2.3 Ziel des Projekts

Durch die Entwicklung von EvaChem, einem neuen, ganzheitlichen praktikablen Multikriterien-System sollen die Vorteile (z. B. hohe Aussagekraft) der *State-of-the-Art*-Methoden (Kapitel 2.2) kombiniert und Nachteile (z. B. Vielzahl von Daten) umgangen werden. Somit wird mit diesem System eine maximale Aussagekraft bei einem vorzugsweisen geringen Aufwand sowie eine hohe Nachvollzieh- und Kommunizierbarkeit ermöglicht.

Dazu soll das zu entwickelnde System vielversprechende Ansätze aus der Vergangenheit aufgreifen, kombinieren und weiterentwickeln. Die in der Vergangenheit gemachten Empfehlungen zur Entwicklung optimaler Werkzeuge zur Nachhaltigkeitsbewertung neuer Prozesse sollen im Rahmen des EvaChem-Projekts beachtet und die Nachteile existierender Werkzeuge und Methoden gezielt identifiziert und vermieden werden.

Der Fokus für die Etablierung und Anwendung dieses praktikablen Multikriterien-Systems zur Evaluierung der Chemikalienproduktion, um die vorteilhaftesten Kombinationen aus Rohstoff (fossile Ressourcen, CO<sub>2</sub>, erste und zweite Generation Biomasse), Syntheseweg und Zielmolekül effizient zu identifizieren, liegt dabei auf folgenden Aspekten:

- Identifizierung der vorteilhaftesten **stoff- und prozessbezogenen** Kombinationen aus Rohstoff, Syntheseweg und Zielmolekül

- Fokus auf Moleküle und Prozesswege die aus chemischer Sicht vielversprechend sind
- Herstellung von **ressourcen- und energieeffizienten** Produkten
- Das Multikriterien-System muss **wissenschaftlich korrekt** aber auch **praktikabel** und einfach **anwendbar** sein

Nachhaltigkeits- und Wirtschaftsindikatoren mit hohem Datenbedarf liegen **außerhalb** des Untersuchungsrahmens und werden im zu entwickelnden Multikriterien-System nicht betrachtet, dennoch wird es mit EvaChem möglich sein Prozesswege und Kombinationen zu identifizieren, die ökologisch und ökonomisch potenziell vorteilhaft sind.

Im Zeitalter der Innovationen kann ein solches Multikriterien-System, als eine Art *Screening* zu Beginn des Innovationsprozess äußerst hilfreich sein um eine Vorauswahl geeigneter Ressourcen und Prozesswege zu identifizieren. Etwa als frühe Unterstützung ist es geeignet, um den **Labor-Maßstab-Status** effektiv durch die effizienteste Route zu überbrücken und um die *value proposition* des bio-basierten Produkts zu prüfen. Im **Pilot- und Demonstrations-Maßstab** bietet das System die Möglichkeit den Prozess iterativ zu optimieren und um erste Prozessdaten zu ermitteln. Generell könnte dieses System zum Erreichen eines höheren „Innovations-Speeds“, also kürzeren Innovationszyklen, dienen was zur monetären und materiellen Ressourcenschonung führen kann.

Die **Zielgruppe** von EvaChem sind KMUs vor allem aus den Bereichen der Agrar-/ Forstwirtschaft und der chemischen Industrie, die Hilfestellung bei Entwicklungs- und Investitionsentscheidungen erhalten sollen. Die zweite Zielgruppe sind Wissenschaftler, die dabei unterstützt werden sollen, die Ausrichtung ihrer bio-basierten Forschungs- und Entwicklungsprojekte optimal zu fokussieren.

Im Rahmen des Projekts wird es nicht möglich sein, alle dargestellten Fragen umfassend und für eine Vielzahl von Prozessrouten und Chemikalien zu beantworten. Das Projekt soll vielmehr dazu dienen, ein praktikables Multikriterien-System zu entwickeln, um zukünftige Forschungs- und Entwicklungsanstrengungen zur bio-basierten nachhaltigen Wirtschaft auf ressourceneffiziente und erfolgsversprechende Syntheserouten konzentrieren zu können. Gleichzeitig sollen methodische Unzulänglichkeiten identifiziert und neue methodische Ansätze erprobt sowie Kenntnislücken identifiziert, bewertet und soweit möglich geschlossen werden. Verbleibende Lücken in methodischer und inhaltlicher Hinsicht sollen klar benannt und beschrieben werden. Deswegen beginnt das EvaChem-Projekt mit einem *proof-of-concept* für dieses Multikriterien-System. So sollen Kriterien und Kennzahlen festgelegt und in einer Arbeitsmatrix zu einem Multikriterien-System verbunden (Teilvorhaben 1) werden. Dieses System wird anschließend, zunächst unter zu Hilfenahme eines Beispielmoleküls (z. B. Ethylen) und bei Bedarf anhand eines oder zwei weiteren Moleküls/en (z. B. Monoethylenglykol und/oder Acrylsäure) kritisch auf eine handhabbare Umsetzung mit geeigneten Verknüpfungslogiken und -regeln hin überprüft (Teilvorhaben 2). Die Bewertung des Multikriterien-Systems (Teilvorhaben 3) gewährleistet dann die zukünftige Akzeptanz und Anwenderfreundlichkeit durch eine dezidierte Auswahl der Kriterien, Indikatoren und Metriken.

Als Ergebnis des EvaChem-Projekts liegen ein Multikriterien-System und ein Vorschlag zur Vorgehensweise vor, welche die umfassende Anwendung und Weiterentwicklung dieses Systems auf weitere, verschiedene chemische Zielmoleküle und deren Syntheserouten, sowie die Transformation in einen *Tool*-Prototypen in einem anschließenden Nachfolgeprojekt erlaubt.

Konkret bedeutet dies, dass der erfolgreiche Abschluss dieses Projekts die Basis für ein Nachfolgeprojekt sein kann in dem das Multikriterien-System zum einen umfassend an weiteren, komplexeren chemischen Zielmolekülen und Syntheserouten getestet und weiterentwickelt werden

kann und zum anderen, dass die Ergebnisse insgesamt als Basis dienen können, um die Vorgehensweise und das entwickelte System für die unternehmerische Praxis in einer Art *EvaChem-Tool* für die zielgerechte Nutzung der genannten Ressourcen zur Herstellung organischer Moleküle, besser anwendbar zu machen. Durch die Transformation des entwickelten Multikriterien-Systems in ein *Tool* kann es für die betriebliche praxistaugliche Bewertung bereitgestellt werden und die Anwendung hinsichtlich der oben gestellten Fragen in der Alltagspraxis von Unternehmen, KMUs und Wissenschaftlern ermöglicht werden.

Zusammenfassend dient das EvaChem Multikriterien-System der effizienten Evaluation der Herstellung von Chemikalien aus verschiedenen Rohstoffen (fossile Ressourcen, CO<sub>2</sub>, erste und zweite Generation Biomasse) anhand verschiedener Kriterien und somit die Identifizierung und den Vergleich der jeweils vielversprechendste Syntheseroute für spezifische Moleküle auf verschiedenen Rohstoffbasen.

## 2.4 Vorgehen im Projekt

Das Projekt gliederte sich in drei aufeinanderfolgende und zeitlich stark vernetzte Teilvorhaben. Zunächst wurde analysiert, welche Kriterien, Indikatoren und Metriken sich für die Evaluierung der Herstellung von Chemikalien aus fossilen Ressourcen, CO<sub>2</sub> oder der ersten und zweiten Generation Biomasse eignen (aufbauend auf der bereits durchgeführten Vorevaluierung in 2.2). Die verschiedenen Syntheserouten der ausgewählten Chemikalie wurden anhand einer Reihe geeigneter Kriterien bewertet. Auf dieser Grundlage wurden die geeignetsten Kriterien, Indikatoren und Metriken in einem Werkzeug zur Entscheidungsunterstützung zusammengeführt (Multikriterien-System).

In der restlichen Laufzeit (zweites und drittes Teilvorhaben) konzentrierte sich das Projekt darauf, die Einsatzmöglichkeiten und Anwendbarkeit des entwickelten Systems zu erproben. Die dabei gemachten Erfahrungen flossen in die endgültige Kriterienauswahl und –nutzung ein. Dafür wurden die vielversprechendsten Syntheserouten zunächst für eine und notwendigerweise für zwei weitere, spezifische Chemikalien bzw. Chemikaliengruppen auf Basis des entwickelten Multikriterien-Systems evaluiert.

Die Arbeit teilte sich entsprechend in drei Teilvorhaben auf:

**Teilvorhaben 1:** Etablierung des Multikriterien-Systems; Festlegung und Zusammenführung der Kriterien und Kennzahlen zu einem Werkzeug für ein Multikriterien-System.

**Teilvorhaben 2:** Anwendung des Multikriterien-Systems; Entwicklung eines praktikablen Umsetzungskonzepts des Multikriterien-Systems am Beispiel eines Zielmoleküls.

**Teilvorhaben 3:** Bewertung des Multikriterien-Systems; Kritische Überprüfung des Multikriterien-Systems zur Gewährleistung der Akzeptanz und Anwenderfreundlichkeit.

Durch die Betrachtung und Evaluation bestehender *State-of-the-Art*-Methoden (Kapitel 2.2) und insgesamt 135 Kriterien, Indikatoren und Metriken, den schrittweisen Ausschluss von Indikatoren und Metriken (Kapitel 3) sowie deren iterative Anwendung auf Beispielmoleküle (Kapitel 3.1.4.1, 3.2 und 4) und einer parallel durchgeführten Bewertung des Systems (Kapitel 3.2.2), war es möglich ein praktikables Multikriterien-System zu etablieren und dessen Anwendungsbereich zu definieren. Das entwickelte Multikriterien-System besteht aus insgesamt 11 Indikatoren und Metriken, die sich in drei Klassen von Indikatoren und Metriken unterteilen lassen: Masse-bezogene Metriken, Energie-bezogene Metriken, Andere Metriken und Indikatoren. Innerhalb dieser Klassen gibt es dann die

sogenannten Stöchiometrie-basierten Basis-Indikatoren und Metriken und die Prozessdaten-basierten Erweiterten Indikatoren und Metriken (Kapitel 3.2.3, Tabelle 7).

Die insgesamt fünf Basis-Indikatoren und Metriken, sowie die drei Anderen Metriken und Indikatoren, können stöchiometrisch und somit immer berechnet werden, wenn der Prozess und die involvierten Moleküle bekannt sind. Die drei Erweiterten Metriken können berechnet werden, wenn entsprechende Prozessdaten vorliegen. Allerdings sind diese Prozessdaten oft nicht öffentlich zugänglich oder vorhanden.

Deswegen wurde das Multikriterien-System so entwickelt, dass es auch ohne Prozessdaten aussagekräftige Ergebnisse basierend auf der zugrundeliegenden chemischen Reaktion und leicht zugänglichen, veröffentlichten Daten liefert. Sind Prozessdaten verfügbar, so können die Erweiterten Metriken berechnet werden, welche die Basis-Indikatoren und Metriken teilweise ergänzen oder ersetzen und somit die Aussagekraft des Systems erhöhen. Ein Nachteil der Basis-Indikatoren und Metriken ist, dass sie keine Auskunft über unterschiedliche Prozesswege mit demselben Edukt (Vorläufer- oder Startmolekül), Intermediat und Zielmolekül erlauben, da die chemische Struktur der Moleküle in den verschiedenen Prozessen dieselbe ist.

Dieses Multikriterien-System wurde durch eine detaillierte und ausdifferenzierte Abgrenzung der einzelnen Prozessschritte, sowie ein ausführliches Glossar für die verwendeten Begrifflichkeiten erweitert, um eine verständliche und bedienerfreundliche Anwendung des Systems zu erlauben (Kapitel 3.2.2; Tabelle 6).

Für die Etablierung, Optimierung und Finalisierung des Multikriterien-Systems wurde dieses mit den Molekülen Ethylen, Monoethylenglykol (MEG), sowie Acrylsäure als Anwendungsbeispiele getestet. Diese verschiedenen Anwendungen ermöglichen es die Aussagekraft des Systems an verschiedenen Molekülen zu testen.

Durch die parallel und integrativ, zur Optimierung und Finalisierung, durchgeführte Bewertung des Multikriterien-Systems war es möglich die Möglichkeiten und Grenzen des Anwendungsbereichs sowie die Einbettung des EvaChem Multikriterien-Systems in eine ganzheitliche Betrachtung der Rohstoffnutzung darzustellen und zu definieren (Kapitel 3.2.2).

EvaChem beschreibt die chemische Effizienz vom rohstoffnahen „Vorläufermolekül“ bis zum Zielmolekül. Chemische Effizienz bedeutet hierbei die Effizienz der Umwandlung von Vorläufer- und/oder Startmolekül in das Zielmolekül unter Berücksichtigung der chemischen Struktur, einschließlich deren Ähnlichkeit, Erhalt oder Änderung.

Somit ist die chemische Effizienz eine wichtige Größe für die Bewertung von Rohstoffen im Kontext eines Zielmoleküls.

## **3 Etablierung und Bewertung des Multikriterien-Systems – Teilvorhaben 1 und 3**

### **3.1 Etablierung des Multikriterien-Systems – Teilvorhaben 1**

Im ersten Teilvorhaben wurden zunächst Kriterien identifiziert, die sich zur Bewertung der Prozesskette „Rohstoff – Syntheseroute – Zielmolekül“ eignen. Zum einen wurden aus der Literatur vorhandene Kriterien zusammengestellt und auf Tauglichkeit in diesem Projekt evaluiert, zum anderen wurden auch weitere Kriterien entwickelt. Ein Teil der Kriterien ist anhand von zugehörigen Metriken quantifizierbar, ein anderer Teil (Indikatoren) nur qualitativ. Im zweiten Fall werden Bewertungsraster angegeben mit z. B. 1 bis 9 (z.B. Technologische Reife) oder Ja/Nein Aussagen getätigt.

Damit wurden die Evaluierungen, die im Rahmen der Erstellung der Projektidee begonnen wurden (Kapitel 2.2; Tabelle 2), vertiefend und umfassend fortgesetzt, sowie auch die Stärken und Schwächen bislang eingesetzter Kriterien und Parameter untersucht und präsentiert. Hierzu gehörten die folgenden Aspekte: Welche Syntheserouten werden durch die jeweiligen Kriterien und Parameter systematisch bevorzugt oder benachteiligt? Wie groß ist die jeweilige Aussagekraft in Bezug auf unsere Fragestellung? Wie sind die Kriterien handhabbar? In welchem Umfang werden sie aktuell von Industrie und Forschung eingesetzt? Welche Aspekte fehlen?

Wichtig war dabei ein eher pragmatischer als streng wissenschaftlich umfassender Ansatz: Die Kriterien sollen später für alle Interessenten und auch Experten von NGOs mit überschaubarem Aufwand anwendbar sein. Was sich im Vorfeld herauskristallisiert hat: Umfassende ökonomische Berechnungen oder auch Ökobilanzen scheiden aufgrund des zu hohen Aufwands hier aus, diese Bereiche können nur unvollständig abgebildet werden und ihre Ergebnisse hängen von den gewählten Systemgrenzen ab. Der Fokus wurde daher auf den „stoff- und prozessbezogen im jeweiligen Vergleich von zwei oder mehr Alternativen vorteilhaftesten Kombinationen aus Rohstoff, Syntheseweg und Zielmolekül“ gelegt – mit möglichen Implikationen für Ökonomie und Ökologie. Die geeignetsten Kriterien, Indikatoren und Metriken wurden anschließend zu einer Entscheidungsmatrix (Excel-Tabelle) zusammengeführt und anhand eines Beispielmoleküls angewendet. Somit war es möglich die ausgewählten Kriterien, Indikatoren und Metriken auf ihre Anwendbarkeit und Aussagekraft hin zu überprüfen.

Die Herausforderung bestand darin, aus der Vielzahl an Kriterien, Indikatoren und Metriken eine mit überschaubarem Aufwand handhabbare Multikriterien-Analyse und ein nutzbares System zu entwickeln, das Experten aus Industrie, Verbänden und anderen Interessensgruppen ein systematisches Vorgehen ermöglicht. Dabei ist eine aussagekräftige Darstellung der Ergebnisse des Multikriterien-Systems notwendig, hier wäre es möglich die verschiedenen Indikatoren und Metriken gemäß ihrer Aussagekraft und Priorisierung hervorzuheben. Diese Hervorhebung wurde numerisch und farblich dargestellt. Diese Ergebnisdarstellung erfolgt in einer Übersichtstabelle, die sowohl die farbliche Hervorhebung als auch die tatsächlichen, numerischen Ergebnisse des Multikriterien-Systems mit einander verbindet und übersichtlich darstellt. Dazu wurden die Metriken und Indikatoren zunächst in einer Excel-Tabelle angelegt, die Auswahl geeigneter Formeln und Filter wurde so genutzt um die verschiedenen Kriterien, Indikatoren und Metriken anzuwenden, das Multikriterien-System zu etablieren und im nächsten Teilvorhaben zu prüfen.

Tabelle 2: Übersicht der bereits für die Projektidee identifizierten Kriterien, Indikatoren und Metriken

Indikator/Metrik	Eigenschaften	Wirkungsbereiche
<b>Chemische Strukturen</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Kettenlänge</li> <li>• Anzahl C-Atome</li> <li>• Anzahl O-Atome</li> <li>• Anzahl H-Atome</li> <li>• Art und Anzahl Heteroatome</li> <li>• Ungesättigte Verbindungen</li> <li>• Funktionelle Gruppen</li> <li>• Komplexität</li> <li>• Ähnlichkeiten Rohstoff – Zielmolekül</li> <li>• Stereochemie</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Qualitativ / quantitativ</li> <li>• Ranking</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ressourceneffizienz</li> <li>• Chemisches <i>know-how</i></li> </ul>
<b>e-Faktor, Atomökonomie, Reaction Mass Efficiency, Carbon Efficiency, Mass Productivity</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Quantifizierbar</li> <li>• e-Faktor (Abfallmasse bezogen auf Produktmasse)</li> <li>• Bei der Atomökonomie wird basierend auf der Stöchiometrie das Molekulargewicht des Produkts durch die Summe der Gewichte aller entstehenden Produkte geteilt; so kann über den Grad der sich aus den Ausgangsstoffen im Produkt wiederfindenden Atome der theoretisch zu erwartende Abfall berechnet werden.</li> <li>• Bei der <i>Reaction Mass Efficiency</i> wird neben der Atomökonomie die Ausbeute mit in die Berechnung aufgenommen.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ökonomie</li> <li>• Ressourceneffizienz</li> </ul>
<b>Biomass Utilisation Efficiency (BUE)</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Quantifizierbar</li> <li>• <i>Biomass Utilisation Efficiency</i> (BUE) mit seinen Unterkategorien BUE<sub>S</sub> (Stöchiometrie), BUE<sub>L</sub> und BUE<sub>H</sub> (low and high, realistic yields) und BUEE (bezogen auf Energie) (Iffland et al. 2015); Ausdehnung des BUE auf CO<sub>2</sub></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ökonomie</li> <li>• Ressourceneffizienz</li> <li>• Landnutzung</li> </ul>

	und fossile Ressourcen als Rohstoffe notwendig.	
<b>Toxizität (Hilfs- und Nebenprodukte)</b>		<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ökonomie</li> <li>• Ökologie</li> <li>• Gesundheit</li> <li>• Akzeptanz</li> </ul>
<b>Materialengpässe, Knappheit bei Hilfsmitteln und Katalysatoren</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Kritikalität</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ökonomie</li> <li>• Ökologie</li> <li>• Akzeptanz</li> <li>• Ressourcenverfügbarkeit</li> </ul>
<b>Anzahl der Reaktionsschritte</b>		<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ökonomie</li> <li>• Ressourceneffizienz</li> <li>• Abfälle</li> <li>• Landnutzung</li> </ul>
<b>Freie Enthalpie, Entropie, Gesamtenergiebilanz</b>		<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ökonomie</li> <li>• Energie- und Ressourceneffizienz</li> </ul>
<b>Technologische Reife <i>Technology Readiness Level (TRL) / time-to-market</i></b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 1 bis 9</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Technologisches Risiko</li> </ul>
<b>Skaleneffekte</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Qualitativ</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Technologisches Risiko</li> </ul>

Bevor die in Tabelle 2 bereits zusammengestellten Kriterien, Indikatoren und Metriken auf ihre Vollständigkeit und Aussagekraft hin überprüft wurden, war zunächst eine verständliche und klare Definition der verwendeten Begriffe Kriterium, Indikator und Metrik notwendig. Nur so war es möglich die Vielzahl an vorhandenen Kriterien und Parametern sinnvoll zu klassifizieren und zu verstehen.

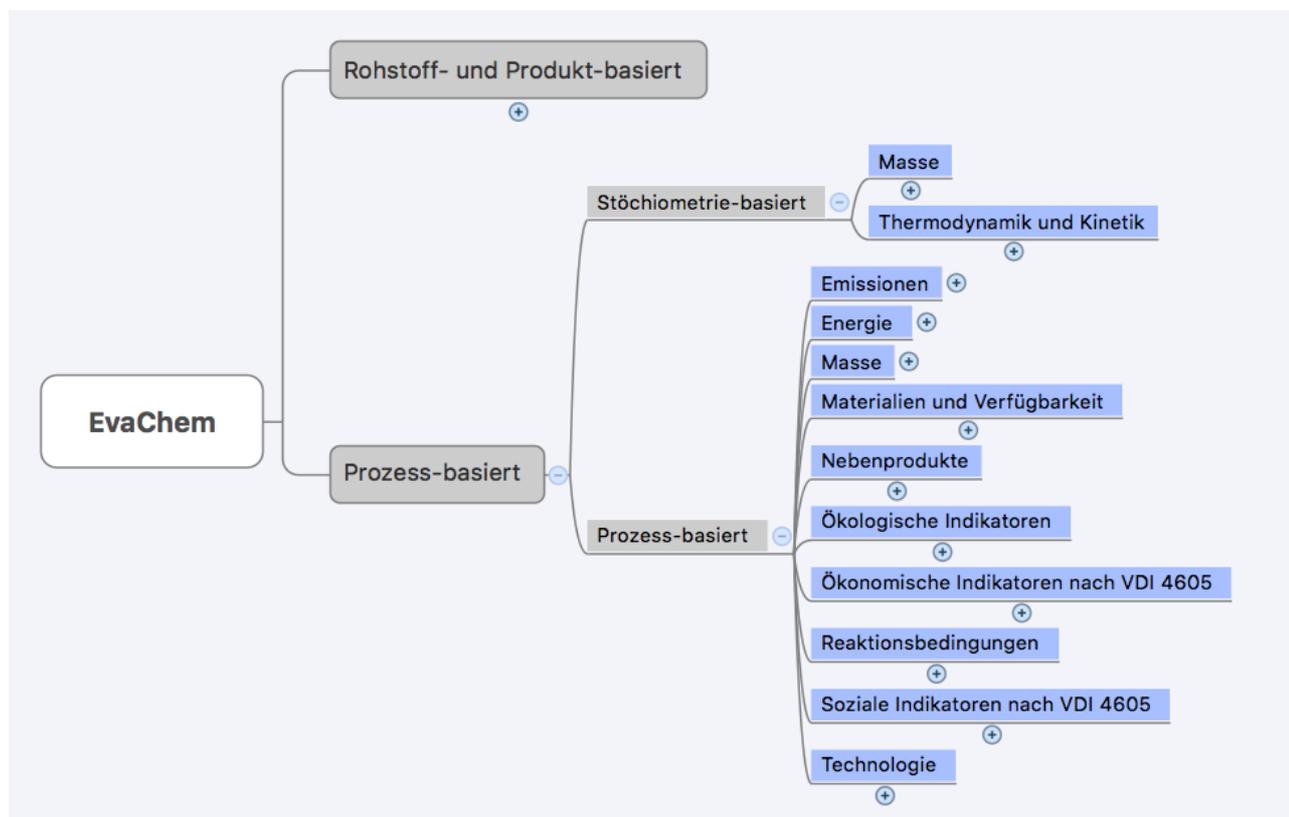
### 3.1.1 Definitionen – Kriterien, Indikatoren und Metriken

Für die Untersuchung, weitere Sammlung und Vervollständigung der in Kapitel 3 Tabelle 2 vorgestellten Kriterien, Indikatoren und Metriken war zunächst eine verständliche und konkrete Definition dieser Begriffe notwendig. Dafür wurden die allgemein üblichen Definitionen gemäß Duden von Kriterium, Indikator und Metrik betrachtet und für das Projekt EvaChem spezifisch angepasst (Tabelle 3).

**Tabelle 3:** Allgemeine und EvaChem-spezifische Definitionen von Kriterium, Indikator und Metrik

	Allgemein	EvaChem-Projekt
<b>Kriterium</b>	ist ein Merkmal, das relevant für eine Unterscheidung, Bewertung oder Entscheidung ist, beispielsweise bei einer Auswahl zwischen Personen, Objekten, Eigenschaften oder Themen.	<b>Klassifizierungs-/Gruppierungskriterium:</b> ein Merkmal, das relevant für die Unterscheidung von Eigenschaften ist. <b>System-/Bewertungskriterium:</b> ein Merkmal, das relevant für die Bewertung von chemischen Herstellungsprozessen ist.
<b>Indikator</b>	ist ein Umstand oder Merkmal, was als (statistisch verwertbares) Anzeichen für eine bestimmte Entwicklung, einen eingetretenen Zustand oder Ähnlichem dient.	ein <u>qualitatives</u> Anzeichen, das einem bestimmten Kriterium zugeordnet werden kann und relevant für die Bewertung von chemischen Herstellungsprozessen ist.
<b>Metrik</b>	ist ein Maß für etwas; ein Mittel zur Ableitung einer quantitativen Messung oder für ansonsten qualitative Phänomene.	ein <u>quantitatives</u> Anzeichen, ein Maß, das einem bestimmten Kriterium zugeordnet werden kann und relevant für die Bewertung von chemischen Herstellungsprozessen ist.

Für die Verwendung des Begriffs Kriterium wurde in diesem Projekt zwischen zwei verschiedenen Definitionen unterschieden. Zum einen das Klassifizierungs- und Gruppierungskriterium welches erlaubt die dazugehörigen Indikatoren und Metriken einer spezifischen Prozess- oder Reaktionseigenschaft des chemischen Herstellungsprozesses zuzuordnen. Zum anderen das System- und Bewertungskriterium welches zur Bewertung der verschiedenen chemischen Herstellungsprozesse verwendet wird. Indikatoren und Metriken sind einem System-/ Bewertungskriterium zugeordnet und ermöglichen somit eine qualitative (Indikator) und eine quantitative (Metrik) Aussage in der Bewertung der verschiedenen Prozesse.



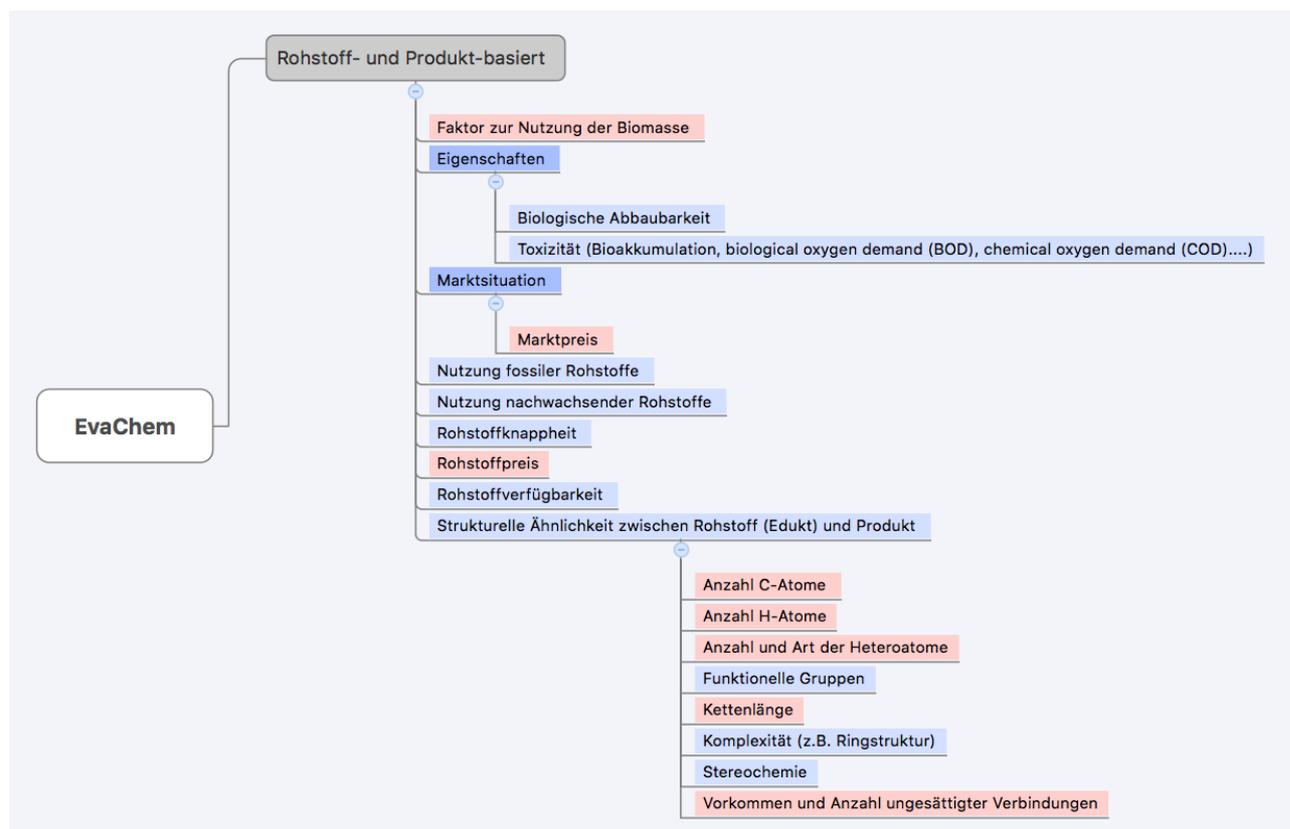
**Abbildung 1:** Übersicht der unterschiedlichen Definitionen von Kriterien im EvaChem-Projekt. Grau: Klassifizierungs-/Gruppierungskriterien, blau: System-/Bewertungskriterium.

Die System- und Bewertungskriterien (Abbildung 1, blau) beziehen sich auf ein für die Bewertung des chemischen Herstellungsprozesses relevantes Merkmal wie z. B. die Energie, Masse oder Materialien und deren Verfügbarkeit. Sie wurden für eine bessere Übersicht Klassifizierungs- und Gruppenkriterien (Abbildung 1, grau) zugeordnet. Bei diesen wurde auf erster Ebene zwischen Kriterien, die auf Rohstoff- und Produkteigenschaften basieren, und Kriterien, die auf Prozesseigenschaften basieren, unterschieden. Auf zweiter Ebene wurden die Prozesseigenschaften in Stöchiometrie-basierte und Prozess-basierte Kriterien unterteilt. Die Stöchiometrie-basierten Kriterien werden hierbei theoretisch aus der Stöchiometrie der dem chemischen Herstellungsprozess zugrundeliegenden Reaktion berechnet, während die Prozess-basierten Kriterien auf verfügbaren Prozessdaten beruhen. Dabei kann ein System- und Bewertungskriterium wie z. B. die Masse auch mehreren Klassifizierungs- und Gruppenkriterien zugeordnet sein, wodurch sich allerdings die Berechnungsgrundlage ändert.

### 3.1.2 Sammlung und Klassifizierung bekannter Indikatoren und Metriken

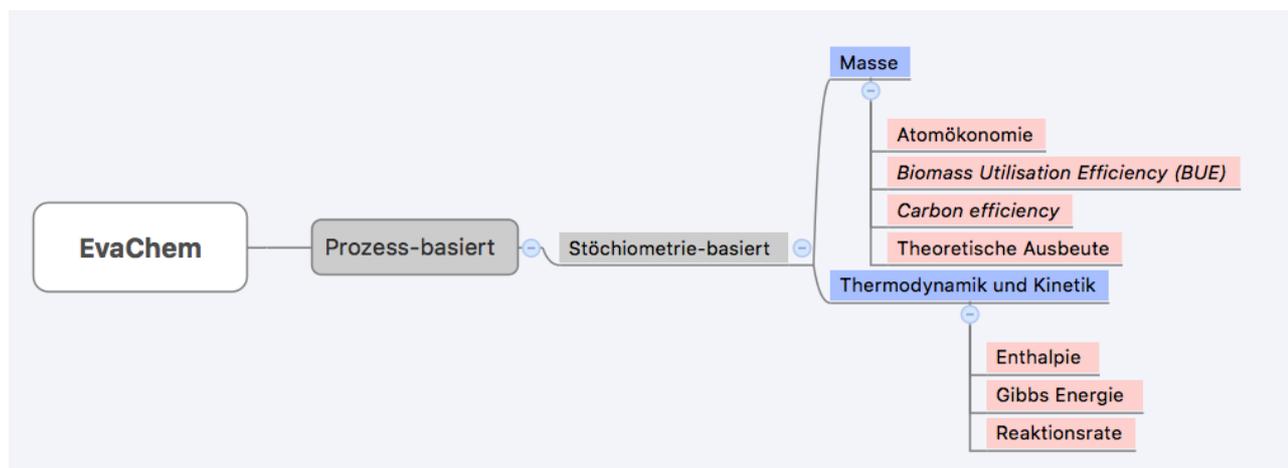
Mit der vorläufigen Auswahl von Kriterien, Indikatoren und Metriken (Kapitel 3; Tabelle 2) und der spezifischen Definition und Erläuterung dieser Begriffe (Kapitel 3.1.1; Tabelle 3; Abbildung 1) wurde im Folgenden eine schrittweise weitere Sammlung von Indikatoren und Metriken sowie deren Klassifizierung vorgenommen. Die im Folgenden genannten System- und Bewertungskriterien sowie die dazugehörigen Indikatoren und Metriken werden nicht im Detail erläutert, sondern nur gruppiert. Der Grund hierfür ist, dass nicht alle Kriterien, Indikatoren und Metriken für die weitere Erstellung des Multikriterien-Systems relevant sind. Es ist lediglich eine Übersicht und Sammlung existierender

Kriterien, Indikatoren und Metriken, die die Vielzahl und Komplexität verschiedener bestehender Methoden hervorhebt und die Wichtigkeit der geeigneten Auswahl für das in EvaChem zu etablierende System unterstreicht. Die Gründe für den Ausschluss bestimmter Kriterien, Indikatoren oder Metriken sowie die darauf aufbauende Auswahl geeigneter Kriterien, Indikatoren und Metriken werden in Kapitel 3.1.3 und 3.1.4 erläutert. Hier werden die ausgewählten Kriterien, Indikatoren und Metriken dann auch im Detail definiert und die Relevanz für das Multikriterien-System beschrieben.



**Abbildung 2:** Rohstoff- und produktbasierte Indikatoren und Metriken.  
Rot: Metrik, blau: Indikator.

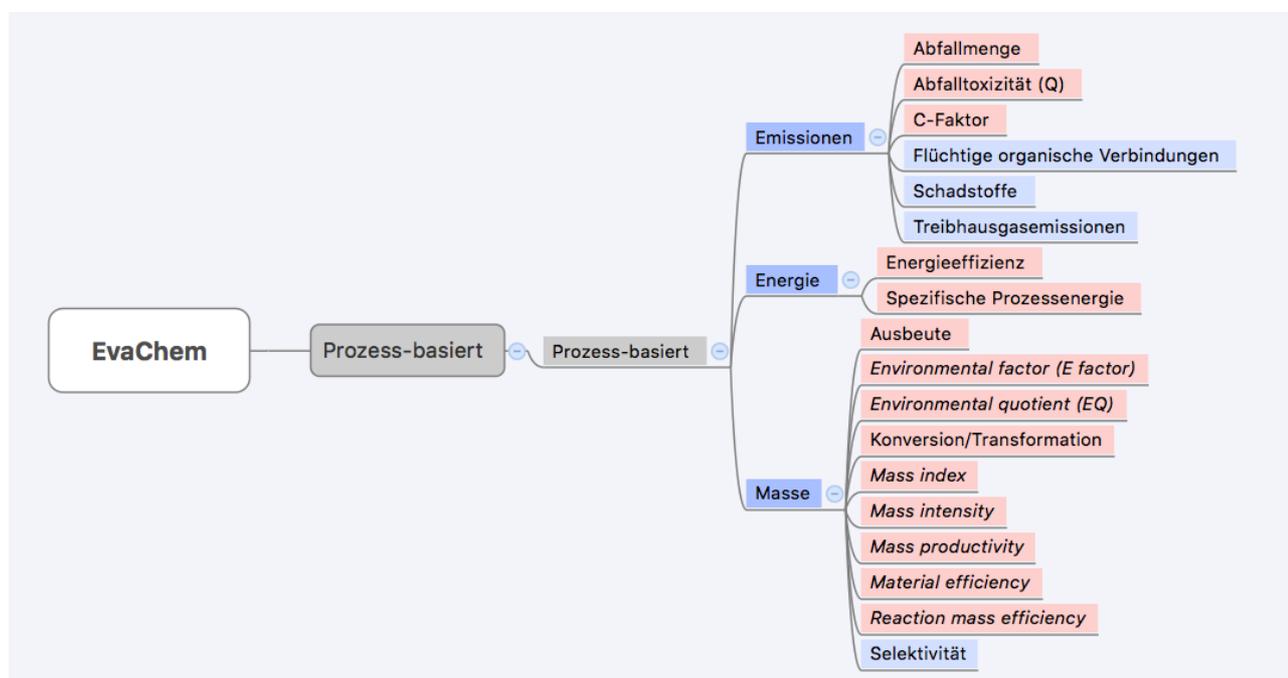
Nicht in jedem Fall ist ein Klassifizierungs- und Gruppierungskriterium nochmal mit einem System- und Bewertungskriterium verknüpft. Das Klassifizierungs- und Gruppierungskriterium Rohstoff- und Produkt-basiert ist zeitlich auch das System- und Bewertungskriterium zu dem Indikatoren und Metriken wie Rohstoffknappheit oder Faktor der Biomassenutzung zugeordnet werden können. Der Indikator strukturelle Ähnlichkeit zwischen Edukt und Produkt beinhaltet z. B. die Anzahl von C-, H- oder Heteroatomen, sowie die Komplexität der Moleküle, wie z.B. ihre funktionellen Gruppen oder die Stereochemie (Abbildung 2).



**Abbildung 3:** Prozess-basierte, Stöchiometrie-basierte System- und Bewertungskriterien und die dazugehörigen Metriken.

Grau: Klassifizierungs-/Gruppierungskriterium, blau: System-/Bewertungskriterium, rot: Metrik.

Den Prozess- und Stöchiometrie-basierten Klassifizierungs- und Gruppierungskriterien wurden die zwei System- und Bewertungskriterien Masse, sowie Thermodynamik und Kinetik zugeordnet (Abbildung 3, blau). Dem Kriterium Masse wurden die Metriken Atomökonomie, *Biomass Utilisation Efficiency* (BUE), *Carbon Efficiency*, und Theoretische Ausbeute zugeordnet (Abbildung 3, rot). Dem Kriterium Thermodynamik und Kinetik wurden Enthalpie, Gibbs Energie und die Reaktionsrate als Metriken zugeordnet (Abbildung 3, rot).

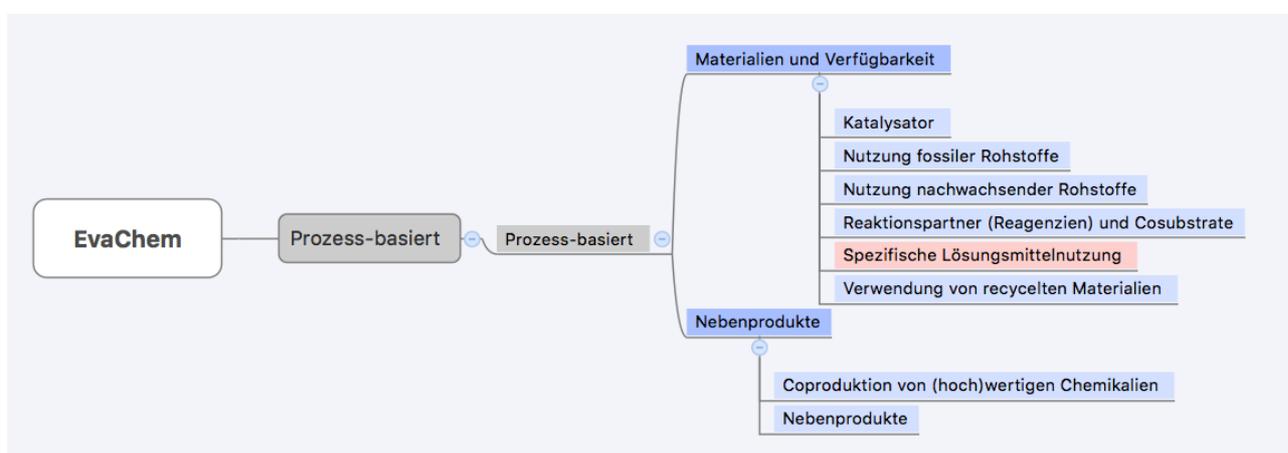


**Abbildung 4:** Prozess-basierte System- und Bewertungskriterien I und die dazugehörigen Indikatoren und Metriken.

Grau: Klassifizierungs-/Gruppierungskriterium, blau: System-/Bewertungskriterium, hellblau: Indikator, rot: Metrik.

Den Prozess-basierten Klassifizierungs- und Gruppierungskriterien wurden eine Vielzahl von System- und Bewertungskriterien und damit verbundene Indikatoren und Metriken zugeordnet. Diese werden im Folgenden für eine genaue Übersicht schrittweise erläutert.

Dem Prozess-basierten Klassifizierungs- und Gruppierungskriterien wurden neben anderen (Abbildung 5; Abbildung 6; Abbildung 7; Abbildung 8; Abbildung 9) die System- und Bewertungskriterien Emissionen, Energie und Masse zugeordnet (Abbildung 4, blau). Dem Kriterium Emissionen wurden die Indikatoren Schadstoffe, Treibhausgasemissionen und flüchtige organische Verbindungen (Abbildung 4, hellblau), sowie die Metriken Abfallmenge, Abfalltoxizität und der C-Faktor zugeordnet (Abbildung 4, rot). Das Kriterium Energie beinhaltet die Metrik Energieeffizienz und Spezifische Prozessenergie. Das Kriterium Masse umfasst die Metriken Ausbeute, e-Faktor, *Environmental Quotient*, Konversion/Transformation, *Mass Index*, *Mass Intensity*, *Mass Productivity*, *Material Efficiency*, *Reaction Mass Efficiency* und Selektivität (Abbildung 4, rot).

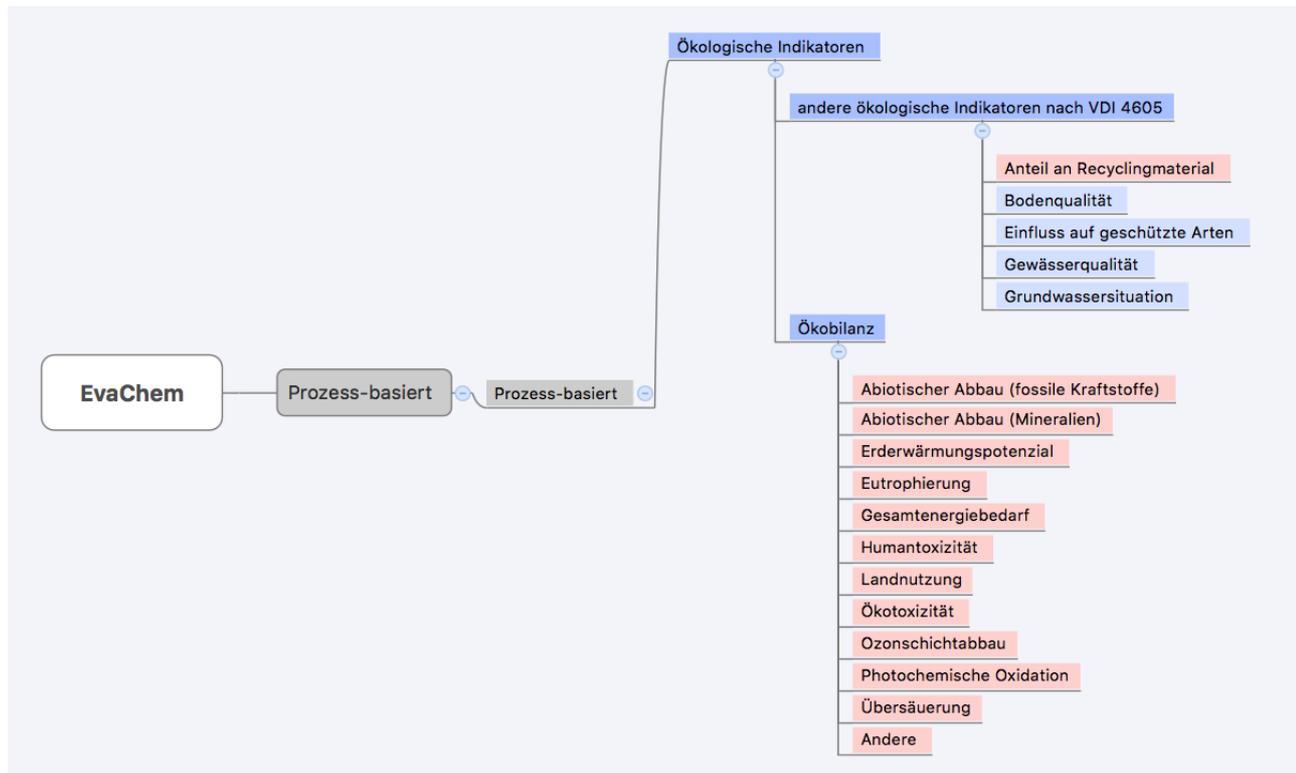


**Abbildung 5:** Prozess-basierte System- und Bewertungskriterien II und die dazugehörigen Indikatoren und Metriken.

Grau: Klassifizierungs-/Gruppierungskriterium, blau: System-/Bewertungskriterium, hellblau: Indikator, rot: Metrik.

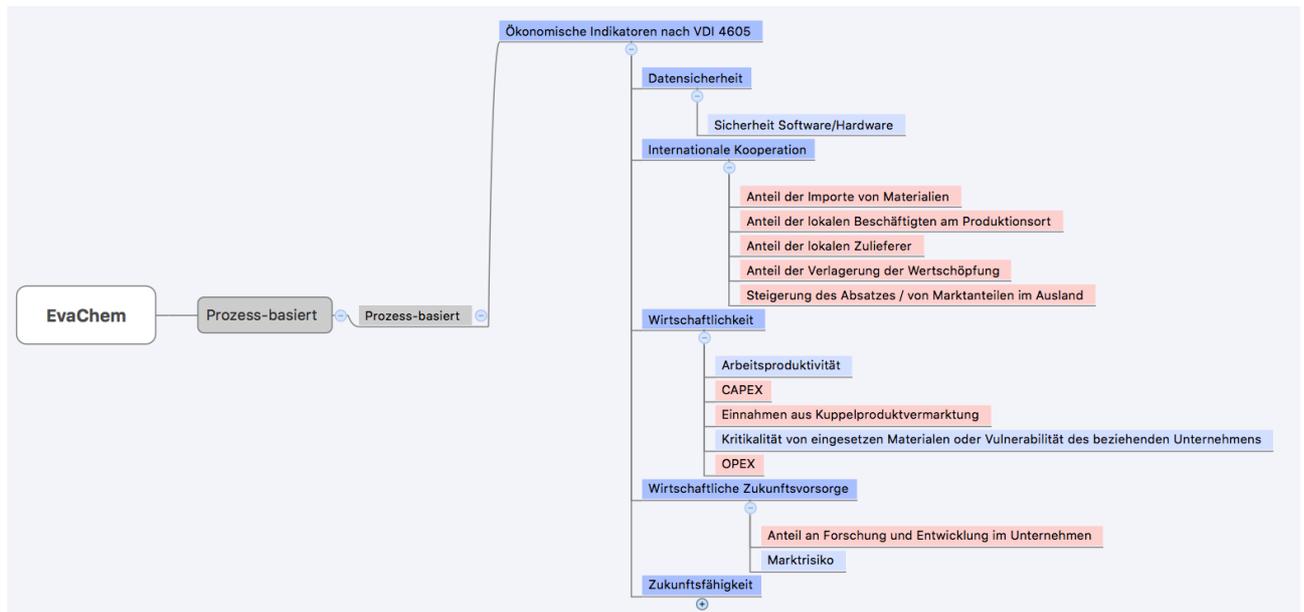
Des Weiteren wurden dem Klassifizierungs- und Gruppierungskriterien die System- und Bewertungskriterien Materialien und Verfügbarkeit, sowie Nebenprodukte zugeordnet (Abbildung 5, blau). Dem Kriterium Materialien und Verfügbarkeit wurden die Indikatoren Katalysator, Nutzung fossiler Rohstoffe, Nutzung nachwachsender Rohstoffe, Reaktionspartner und Cosubstrate und Verwendung von recycelten Materialien (Abbildung 5, hellblau), sowie die Metrik Spezifische Lösungsmittelnutzung zugeordnet (Abbildung 5, rot). Das Kriterium Nebenprodukte beinhaltet die Indikatoren Coproduktion von hochwertigen Chemikalien und allgemeine Nebenprodukte (Abbildung 5, blau).

Wie bereits erwähnt wurden für die Erstellung des Multikriterien-Systems für die Evaluierung der Chemikalienproduktion keine Indikatoren und Metriken für eine umfassende ökologische und ökonomische Betrachtung verwendet. Diese schieden aufgrund des zu hohen Aufwands hier aus, die Bereiche der ökologischen und ökonomischen Betrachtung können nur unvollständig abgebildet werden und ihre Ergebnisse hängen von den gewählten Systemgrenzen ab. Dennoch werden sie aber im Folgenden gelistet und wurden Kriterien zugeordnet, um einen vollständigen Überblick zu gewährleisten und die Komplexität einer umfassenden Bewertung der Chemikalienproduktion und die Notwendigkeit der Vereinfachung zu unterstreichen.



**Abbildung 6:** Prozess-basierte System- und Bewertungskriterien III und die dazugehörigen Indikatoren und Metriken.  
 Grau: Klassifizierungs-/Gruppierungskriterium, blau: System-/Bewertungskriterium, hellblau: Indikator, rot: Metrik.

Als System- und Bewertungskriterium wurden dem Prozess-basierten Klassifizierungs- und Gruppierungskriterien ökologische Aspekte zugeordnet (Abbildung 6, blau). Hierzu zählen eine Vielzahl von Indikatoren und Metriken des *Life Cycle Assessments* (LCA) und der Ökobilanzierung nach VDI 4605 (Abbildung 6, hellblau und rot).

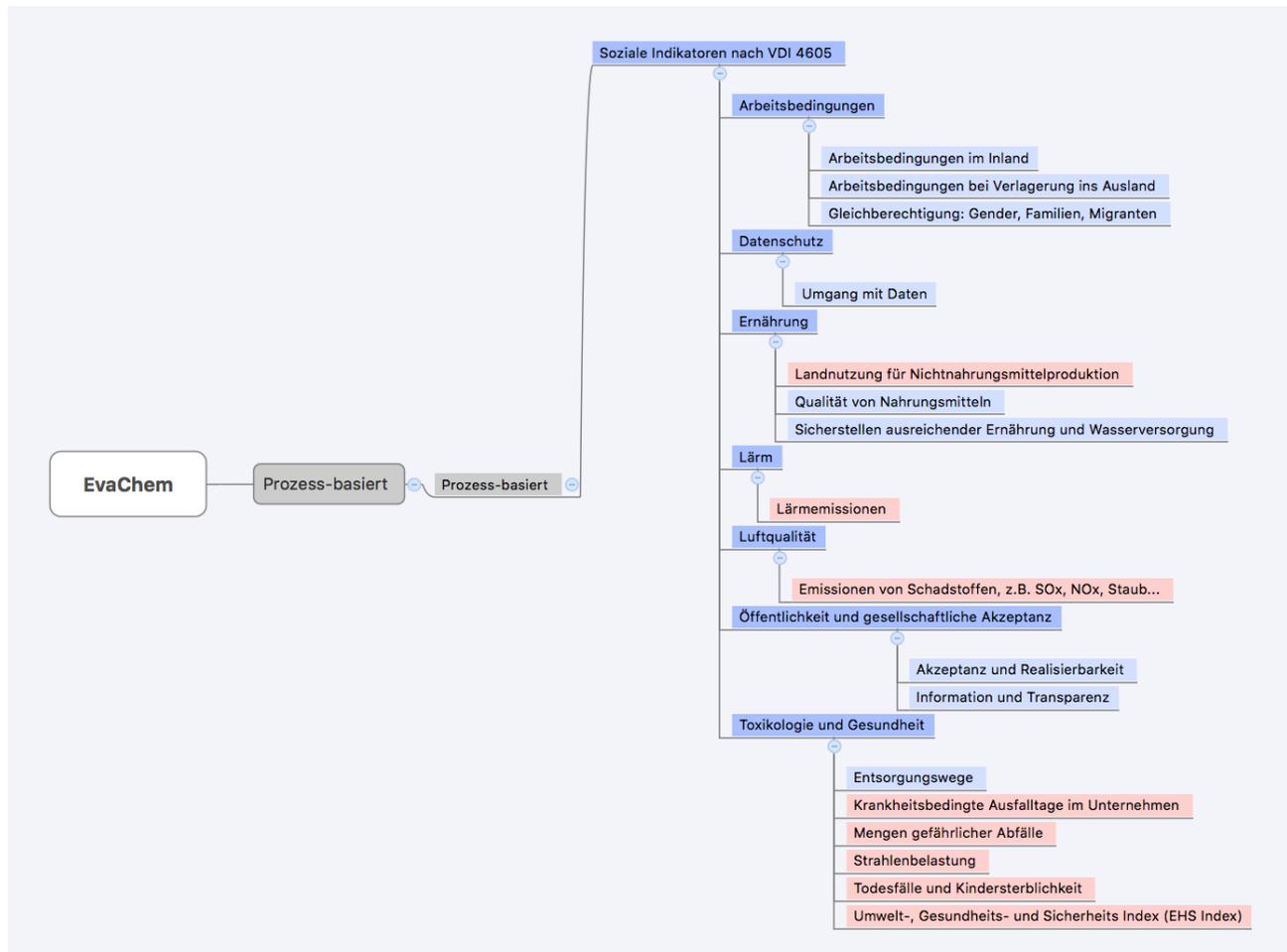


**Abbildung 7:** Prozess-basierte System- und Bewertungskriterien IV und die dazugehörigen Indikatoren und Metriken.

Grau: Klassifizierungs-/Gruppierungskriterium, blau: System-/Bewertungskriterium, hellblau: Indikator, rot: Metrik.

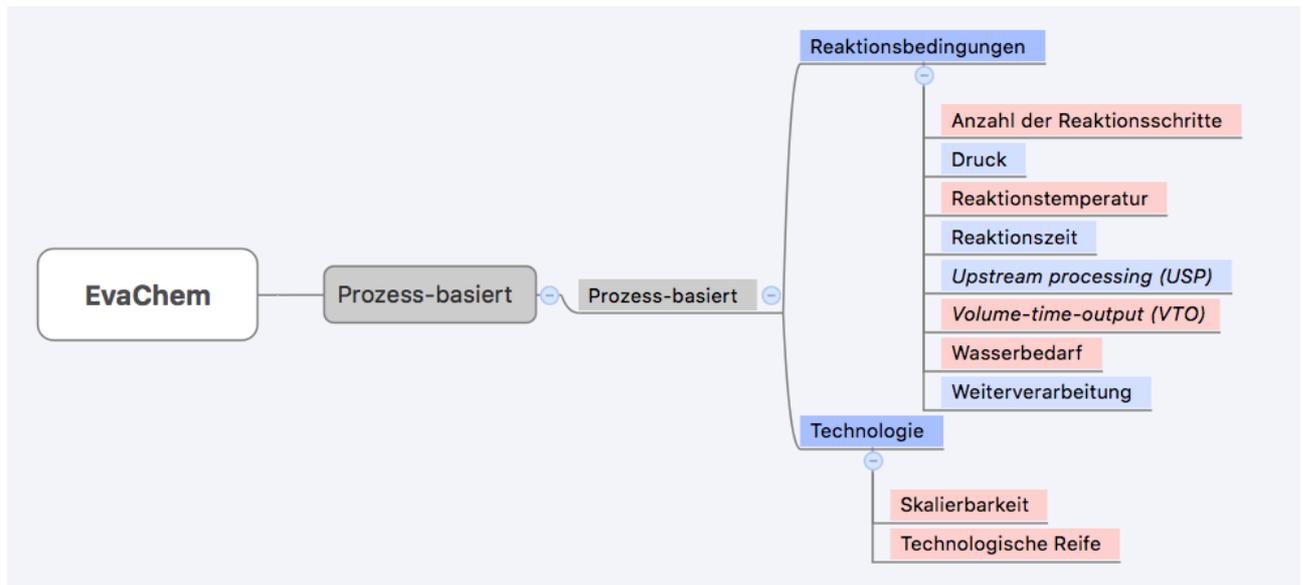
Die ökonomischen Aspekte wurden dem Prozess-basierten Klassifizierungs- und Gruppierungskriterien als System- und Bewertungskriterium zugeordnet (Abbildung 7, blau). Dazu gehören weitere System- und Bewertungskriterien wie Datensicherheit, Internationale Kooperation, Wirtschaftlichkeit, Wirtschaftliche Zukunftsvorsorge und Zukunftsfähigkeit (Abbildung 7, blau). Diesen Kriterien wiederum wurden eine Vielzahl verschiedener Indikatoren und Metriken unterstellt (Abbildung 7, hellblau und rot).

Wie für die ökologischen und ökonomischen Aspekte bereits beschrieben, sind auch die sozialen Aspekte nicht Bestandteil des in diesem Projekt entwickelten Multikriterien-Systems. Denn auch ihre Erhebung und Datenabfrage ist mit einem zu hohen und impraktikablen Aufwand verbunden und nicht Ziel des Multikriterien-Systems. Wie auch die ökonomischen Aspekte, wurden die sozialen Aspekte dem Prozess-basierten Klassifizierungs- und Gruppierungskriterien als System- und Bewertungskriterium zugeordnet (Abbildung 8, blau). Dazu gehören weitere System- und Bewertungskriterien wie Ernährung, Toxikologie und Gesundheit, Luftqualität, Lärm, Arbeitsbedingungen, Öffentlichkeit und gesellschaftliche Akzeptanz sowie Datenschutz (Abbildung 8, blau). Hierzu gehört wiederum eine Vielzahl verschiedener Indikatoren und Metriken (Abbildung 8, hellblau und rot).



**Abbildung 8:** Prozess-basierte System- und Bewertungskriterien V und die dazugehörigen Indikatoren und Metriken.  
 Grau: Klassifizierungs-/Gruppierungskriterium, blau: System-/Bewertungskriterium, hellblau: Indikator, rot: Metrik.

Reaktionsbedingungen und Technologie wurden als System- und Bewertungskriterien dem Prozess-basierten Klassifizierungs- und Gruppierungskriterien zugeordnet (Abbildung 9, blau). Zu den Reaktionsbedingungen gehören Indikatoren wie die Weiterverarbeitung, der verwendete Druck, die Konversion, Reaktionszeit, Selektivität und das *Upstream processing*, sowie die Metriken Anzahl der Reaktionsschritte, Reaktionstemperatur, der *Volume-time-output* und der Wasserbedarf (Abbildung 9, hellblau und rot). Dem System- und Bewertungskriterium Technologie wurden die Metriken Skalierbarkeit und Technologische Reife zugeordnet (Abbildung 9, rot).



**Abbildung 9:** Prozess-basierte System- und Bewertungskriterien VI und die dazugehörigen Indikatoren und Metriken.

Grau: Klassifizierungs-/Gruppierungskriterium, blau: System-/Bewertungskriterium, hellblau: Indikator, rot: Metrik.

Wie bereits beschrieben soll mit EvaChem, ein neues, ganzheitliches und praktikables Multikriterien-System entwickelt werden, welches die Vorteile der oben genannten Kriterien, Indikatoren und Metriken kombiniert (z. B. hohe Aussagekraft) und Nachteile (z. B. Vielzahl von Daten) umgeht. Somit wird mit diesem System eine maximale Aussagekraft bei einem vorzugsweisen geringen Aufwand sowie eine hohe Nachvollzieh- und Kommunizierbarkeit, ermöglicht.

Dazu war es notwendig bestimmte Kriterien, Metriken und Indikatoren auszuschließen und ausgewählte anzupassen oder neu zu definieren.

### 3.1.3 Ausschluss bekannter Indikatoren und Metriken gemäß festgelegter Systemkriterien

Der Fokus für dieses praktikable Multikriterien-System zur Evaluierung der Chemikalienproduktion, um die vorteilhaftesten Kombinationen aus Rohstoff (fossile Ressourcen, CO<sub>2</sub>, erste und zweite Generation Biomasse), Syntheseweg und Zielmolekül effizient zu identifizieren, liegt dabei auf folgenden Aspekten:

- Identifizierung der vorteilhaftesten **stoff- und prozessbezogenen** Kombinationen aus Rohstoff, Syntheseweg und Zielmolekül
- Fokus auf Moleküle und Prozesswege, die aus chemischer Sicht vielversprechend sind
- Herstellung von **ressourcen- und energieeffizienten** Produkten
- Das Multikriterien-System muss **wissenschaftlich korrekt** aber auch **praktikabel** und einfach **anwendbar** sein

Nachhaltigkeits- und Wirtschaftsindikatoren mit hohem Datenbedarf liegen **außerhalb** des Untersuchungsrahmens und wurden im entwickelten Multikriterien-System nicht betrachtet, dennoch wird es mit EvaChem möglich sein Prozesswege und Kombinationen zu identifizieren, die ökologisch und ökonomisch potenziell vorteilhaft sind.

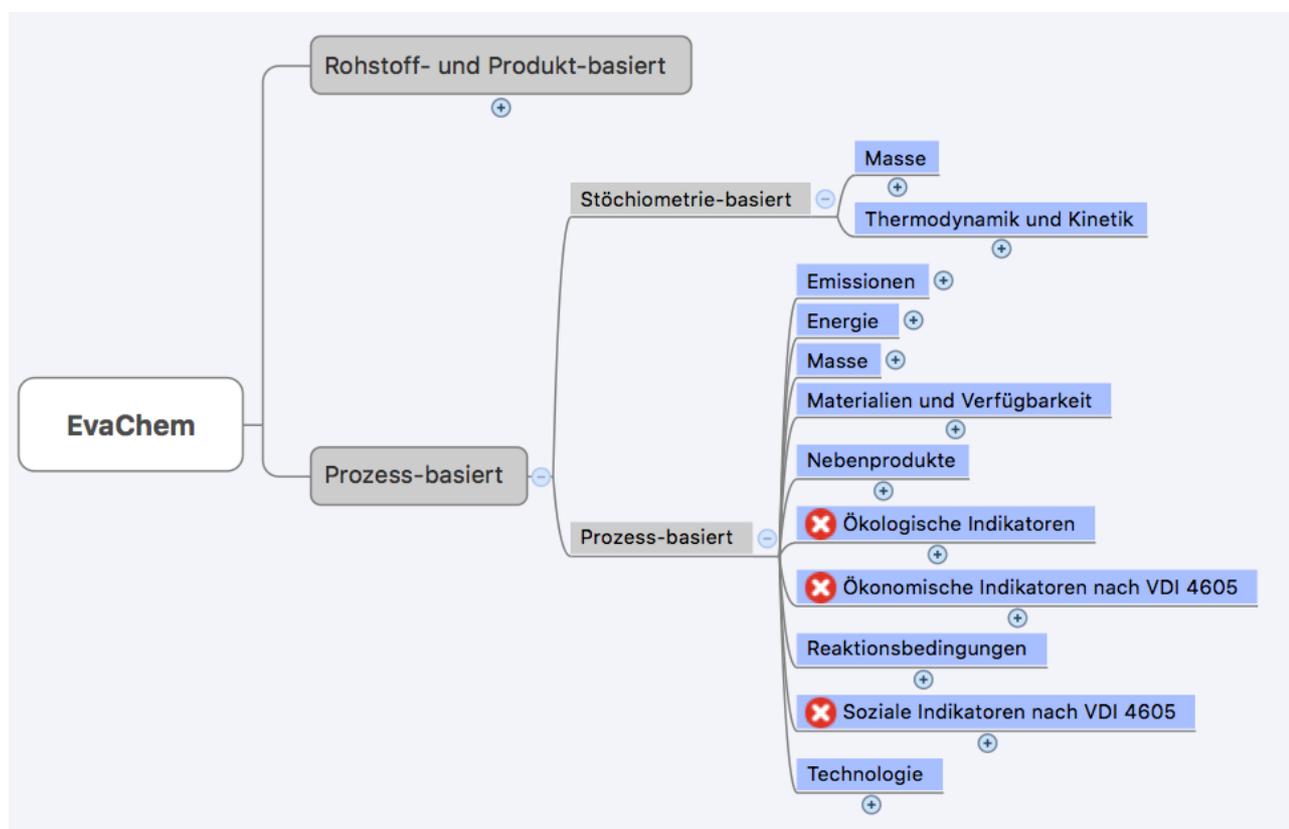
Basierend auf diesen Fokuspunkten wurden die gruppierten Kriterien, Indikatoren und Metriken (Kapitel 3.1.2) evaluiert und schrittweise ausgeschlossen:

Ausschlussverfahren 1: Aufwand der Datenerhebung

Ausschlussverfahren 2: Relevanz für die Zielsetzung

Ausschlussverfahren 3: Redundanz von Kriterien, Indikatoren und Metriken

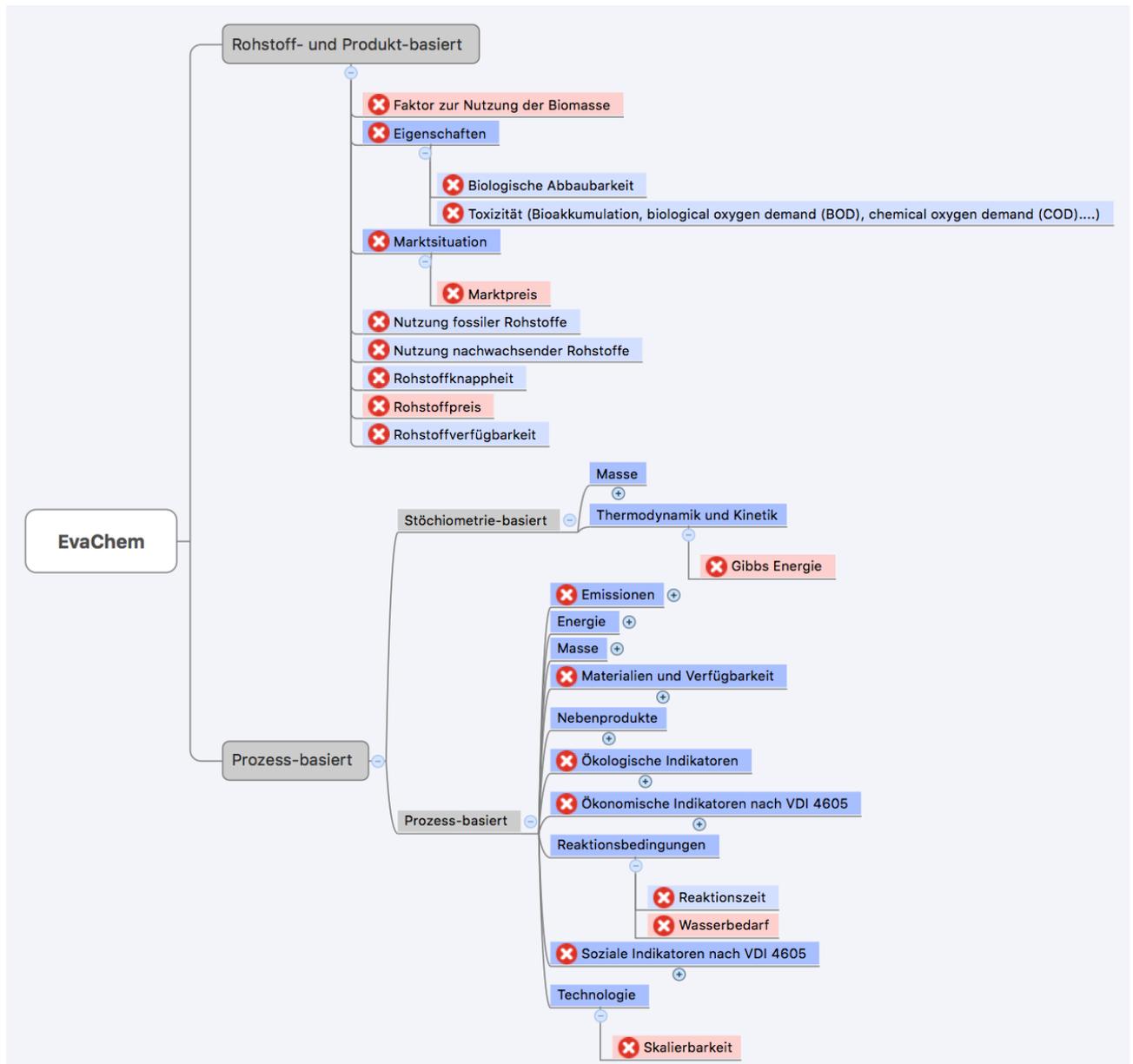
Im Ausschlussverfahren 1 wurden alle zu den System- und Bewertungskriterien „ökologische, ökonomische und soziale Aspekte“ gehörenden Indikatoren und Metriken ausgeschlossen (Abbildung 10).



**Abbildung 10:** Ausschlussverfahren 1: System- und Bewertungskriterien dessen Datenerhebung ein zu hoher Aufwand darstellt.

Grau: Klassifizierungs-/Gruppierungskriterium, blau: System-/Bewertungskriterium, x: ausgeschlossen.

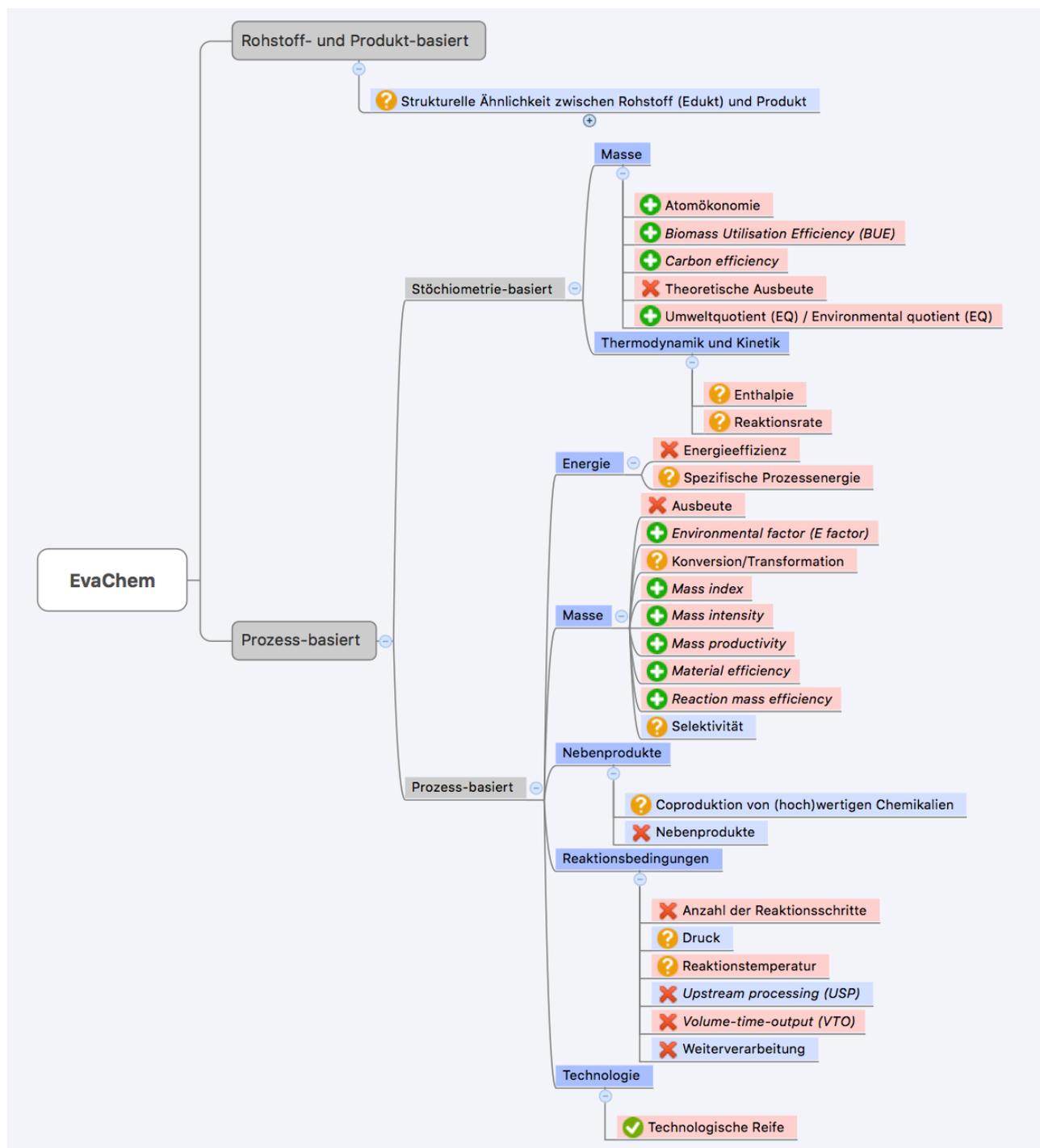
Hier ist zum einen der Aufwand für die Datenerhebung hoch und zusätzlich sind diese Indikatoren und Metriken irrelevant für die Zielsetzung des Projekts. Diese System- und Bewertungskriterien geben entweder keine oder keine einfach praktikabel umzusetzende Auskunft über vorteilhafte stoff- und prozessbezogene Kombinationen von Rohstoff, Syntheseweg und Molekül oder welche Moleküle und Prozesswege aus chemischer Sicht vielversprechend sind.



**Abbildung 11:** Ausschlussverfahren 2: System- und Bewertungskriterien die irrelevant für die Zielsetzung des Projekts sind.

Grau: Klassifizierungs-/Gruppierungskriterium, blau: System-/Bewertungskriterium, hellblau: Indikator, rot: Metrik, x: ausgeschlossen.

Die Zielsetzung des Multikriterien-Systems ist ganz deutlich die Identifizierung der aus chemischer Sicht vorteilhaftesten stoff- und prozessbezogenen Kombinationen aus Rohstoff, Syntheseweg und Zielmolekül und somit liegt der Fokus auf Indikatoren und Metriken die eine Aussage treffen, welche Moleküle und Prozesswege aus chemischer Sicht vielversprechend sind und die ressourcen- und energieeffiziente Herstellung von Produkten ermöglichen. Dafür ist es unter anderem weder notwendig die biologische Abbaubarkeit oder Toxizität des Rohstoffs oder Produkts zu kennen, noch welche Schadstoffe und andere Emissionen in die Umwelt gelangen (Abbildung 11). Die verbleibenden Kriterien, Indikatoren und Metriken wurden dann im Ausschlussverfahren 3 auf ihre mögliche Redundanz hin diskutiert und überprüft (Abbildung 12).



**Abbildung 12:** Kriterien, Indikatoren und Metriken die in Ausschlussverfahren 3 auf ihre Redundanz hin überprüft werden.

Rotes x: in einem anderen Indikator/Metrik enthalten, orangefarbenes ?: in einem anderen Indikator/Metrik enthalten, aber Vollständigkeit und Aussagekraft unsicher, grünes +: wichtiger, aussagekräftiger Indikator/Metrik, muss auf Redundanz hin überprüft werden.

Das beinhaltet zum einen den Punkt, dass verschiedene Indikatoren und Metriken in einem anderen adäquateren Indikator oder einer Metrik direkt oder indirekt enthalten sind (rotes x), dass sie in einem anderen Indikator oder einer Metrik enthalten sind, aber die vollständige Abdeckung und Aussagekraft noch unsicher ist (orangefarbenes ?) oder dass es sich um einen wichtigen,

aussagekräftigen Indikator oder eine Metrik handelt, die noch auf ihre Redundanz hin mit anderen verglichen werden müssen (grünes +). Der Indikator der Strukturellen Ähnlichkeit zwischen Edukt und Produkt beinhaltet z. B. die Anzahl von C-, H- oder Heteroatomen, sowie die Komplexität der Moleküle, ihre funktionellen Gruppen oder die Stereochemie. Es ist allerdings möglich, dass diese Einzelindikatoren mit der Metrik der Atomökonomie oder der *Biomass Utilisation Efficiency* (BUE) in Kombination mit Art und Menge der entstehenden Abfälle, des Energiebedarfs, Anzahl der Syntheseschritte o.ä. abgedeckt werden könnten. Die theoretische Ausbeute kann mit der Atomökonomie oder der *Biomass Utilisation Efficiency* (BUE) abgedeckt werden. Die spezifische Prozessenergie kann eventuell durch die Energieeffizienz oder einen anderen Energieindikator oder Energiemetrik ersetzt werden. Die massespezifischen Metriken, unabhängig ob Stöchiometrie- oder Prozess-basiert sind alle aussagekräftig und zielführend. Hier war es wichtig zu überprüfen, ob mehrere dieser Metriken nicht zu ein und derselben Aussage führen und deswegen redundant sind und ausgeschlossen werden können.

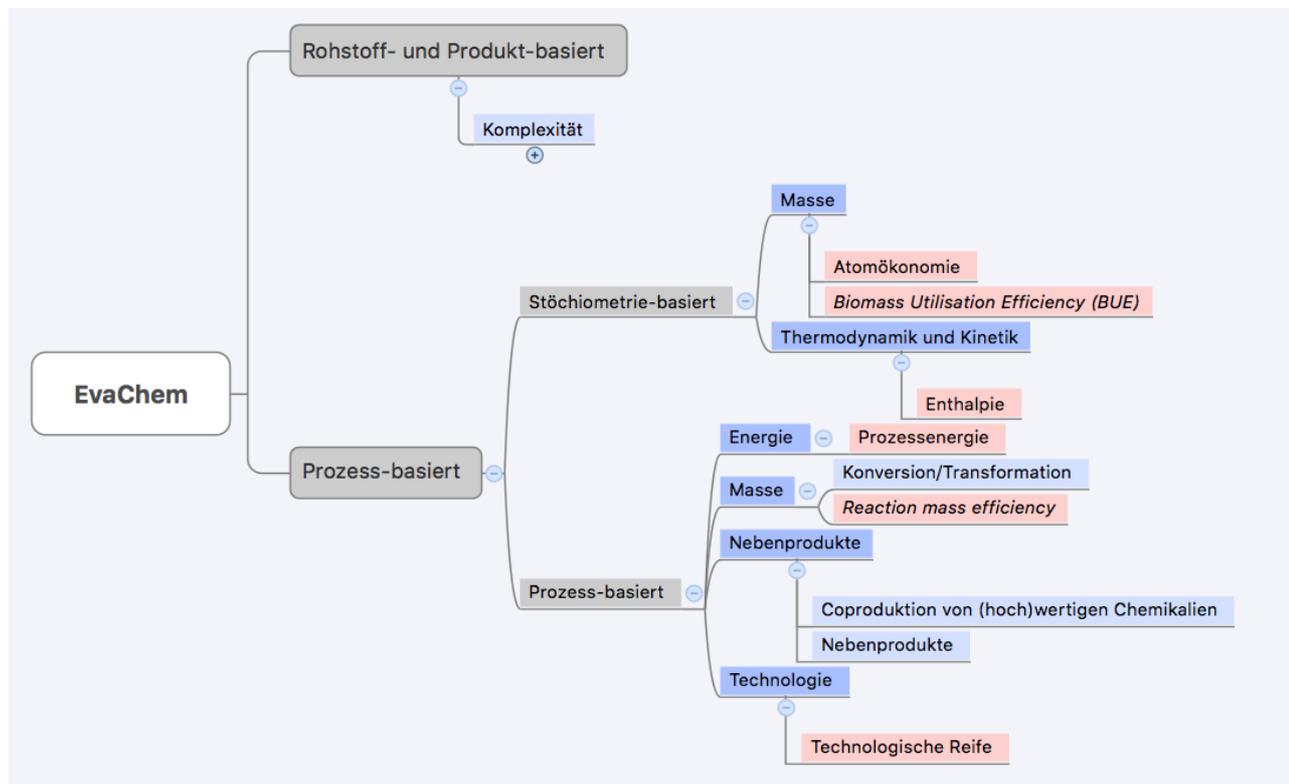
Um die genannten Indikatoren und Metriken auf ihre Redundanz hin zu überprüfen wurden, diese in einer Excel-Tabelle mit verknüpften Formeln zu einem Berechnungssystem zusammengefügt. Damit wurden dann iterativ Beispielrechnungen durchgeführt und die Ergebnisse in Projektteam-internen Diskussionsrunden bewertet, um nur die aussagekräftigsten, einfach umsetzbaren und zielführendsten Indikatoren und Metriken auszuwählen.

### 3.1.4 Vorläufiges Multikriterien-System

Die zuvor beschriebenen iterativen Beispielrechnungen, Diskussionen und Betrachtung der Ziele und Fokuspunkte des Multikriterien-Systems haben zu einer vorläufigen Auswahl von insgesamt zehn Indikatoren und Metriken geführt, die in einer Excel-Tabelle zu einem vorläufigen Multikriterien-System zusammengeführt wurden (Abbildung 13).

Durch die Durchführung von Beispielrechnungen war es nicht nur möglich geeignete Indikatoren und Metriken auszuwählen, sondern auch deren Limitationen in der Aussagekraft und Nachteile in der Datenerhebung zu identifizieren. Bei der *Biomass Utilisation Efficiency* (BUE) war auffällig, dass diese Metrik in ihrer Definition nur Biomasse als Rohstoff berücksichtigt, aber nicht andere Rohstoffe wie fossile oder CO<sub>2</sub>. Eine allgemeinere Benennung, wie zum Beispiel *Feedstock Utilisation Efficiency* (FUE), würde die breitere Anwendbarkeit dieser Metrik ermöglichen; zusätzlich muss hier angemerkt werden, dass sich die Berechnung des BUE eigentlich auf die verwendete Plattformchemikalie bezieht und nicht auf den verwendeten Rohstoff und die zu diesem Zeitpunkt verwendete Benennung somit irreführend war. Die Prozess-basierten Metriken Prozessenergie und *Reaction Mass Efficiency* sind zwar sehr aussagekräftig, aber auch mit Schwierigkeiten in der Datenerhebung verbunden, da die Daten für die Berechnung dieser Metriken nicht immer öffentlich zugänglich und freiverfügbar sind. Diese Metriken wurden daher im Multikriterien-System nicht als grundlegende Metriken verstanden, sondern als zusätzliche, sogenannte Erweiterte Metriken, die, wenn Daten vorhanden sind, das Ergebnis der Bewertung genauer und verlässlicher machen. Im Falle der Indikatoren für die Coproduktion von (hoch)wertigen Chemikalien und Nebenprodukten war die Bedeutung des Ergebnisses und die Ergebnismessung nicht klar. Bei der herkömmlichen Produktion von Ethylen zum Beispiel entstehen auch Propylen und Butadien. Derselbe Prozess wird also für die Herstellung von drei Produkten benutzt, ob diese Tatsache aber aus chemischer und stoff- und prozessbezogener Sicht effizient und sinnvoll ist oder ein anderer z. B. bio-basierter Prozess mit

nur einem Zielprodukt (Ethylen durch die Hydrolyse von Stärke) am vorteilhaftesten ist, kann nur von den späteren Anwendern und deren spezifischen Rahmenbedingungen entschieden werden.



**Abbildung 13:** Vorläufig ausgewählte Kriterien, Indikatoren und Metriken

Unter Konversion/Transformation können zwei Dinge verstanden werden, zum einen die Konversionsrate, die Effizienz und Ausbeute von Rohstoff zur Plattformchemikalie und zum anderen die Gesamtkonversionsrate des chemischen Prozesses, vom Rohstoff zum finalen Produkt. Hierbei ist es für letzteres teilweise auch schwierig valide Daten zu erhalten.

Die oben kurz erläuterten Limitationen und Nachteile der ausgewählten Indikatoren und Metriken wurden durch die Anwendung auf die Beispielmoleküle Ethylen, Monoethylenglykol und Acrylsäure weiterbearbeitet, ergänzt und/oder behoben (Kapitel 3.1.4.1).

### 3.1.4.1 Anwendung des vorläufigen Multikriterien-Systems auf Beispiele

Die Identifikation geeigneter Zielmoleküle und geeigneter Prozessketten wurde aus zwei Blickwinkeln betrachtet: Zum einen wurden aktuell und zukünftig relevante Chemikalien sowie Prozessketten in der Auswahl berücksichtigt. Zum anderen müssen diese relevanten Zielmoleküle und Prozesse bestimmte Voraussetzungen erfüllen, um das entwickelte Multikriterien-System auf seine Anwendbarkeit testen zu können. Was die aktuell und zukünftig relevanten Chemikalien betrifft, sind vor allem Chemikalien für den Einsatz in der zukünftig weiterwachsenden Spezialchemie (Spezialkunststoffe, Wasch-, Reinigungs-, Körperpflegemittel, Duftstoffe, Additive, Farben und Lacke, Schädlingsbekämpfung- und Pflanzenschutzmittel, Arzneimittel u.a.) von großer Bedeutung. Dazu gehören neben essentiellen organischen Plattformchemikalien wie z. B. Ameisensäure, Methanol, Ethanol, Buten oder Acrylsäure auch repräsentative Fein- und

Spezialchemikalien, wie furan-basierte Moleküle oder Arzneimittelwirkstoffe selbst (z. B. Salicylsäure). Prozessketten, die eine Koppel- und / oder Kaskadennutzung z. B. in einer Bioraffinerie durch Nutzung von erster und zweiter Generation Biomasse erlauben, sind derzeit ebenfalls im Fokus universitärer und industrieller Forschung. Hier ist als Beispiel Stroh zu nennen, welches als Nebenprodukt der Getreideerzeugung anfällt und in einem entsprechenden Bioraffinerieprozess energetisch für den Betrieb der Anlage und stofflich für die Herstellung von Xylitol oder Methanol genutzt werden kann. Die Auswahl und Evaluation geeigneter Zielmoleküle und Prozessketten basierend auf diesem groben Überblick erfolgte im Verlauf des Projekts sowohl über eine systematische Auswertung projektrelevanter Literatur (z. B. Fachliteratur, Studien, Publikationen von Interessensvertretern / NGOs, Projektberichte, usw.) als auch über die direkte Kommunikation mit Experten und Anwendern aus der Industrie. Für Letzteres wurden insbesondere die Experten-Netzwerke der Konsortium-Mitglieder genutzt.

Um das entwickelte Multikriterien-System anwenden zu können, müssen das ausgewählte Zielmolekül und die Prozessketten die folgenden Voraussetzungen erfüllen:

- Prozesskette „Rohstoff – Syntheseroute – Zielmolekül“ ist vollständig abgedeckt
- Gewählte Prozessketten finden Anwendung in der Industrie oder sind detailliert beschrieben
- Stärken und Schwächen der Prozessketten sind größtenteils bekannt
- Für das Produkt sind Syntheserouten zur Herstellung aus mindestens zwei der drei Rohstoffe bekannt (fossile Rohstoffe, Biomasse und CO<sub>2</sub>)

Konkret bedeutet dies: Die Zielmoleküle wurden zunächst so ausgewählt, dass sie möglichst aus jedem der drei Rohstoffe hergestellt werden können bzw. hierfür je mindestens eine Syntheseroute bekannt ist und dabei die Prozesskette „Rohstoff – Syntheseroute – Zielmolekül“ umfassend abgebildet wird. Bei vielen Prozessketten sind innerhalb der einzelnen Syntheserouten zudem mehrere parallele Teilschritte möglich (z. B. ein Teil der Syntheseroute ist sowohl über biotechnologische als auch chemische Verfahren möglich; Edukt und Produkt der beiden Verfahren sind aber identisch). Solche Prozessketten wurden bevorzugt in die Auswahl aufgenommen werden. Im Idealfall sollten auch unterschiedliche Prozessketten gefunden, die aber gemeinsame Zwischenprodukte haben und so miteinander verbunden werden könnten.

Die entsprechenden Prozessketten wurden zudem so gewählt, dass die in Teilvorhaben 1 identifizierten Kriterien bzw. Kennzahlen auf diese anwendbar sind. Dies bedeutet z. B., dass die Prozessketten oder der Großteil aller Einzelschritte entweder bereits etabliert und gut charakterisiert sind oder dass die Syntheseschritte zumindest bereits im Labormaßstab bekannt sind. Auf der anderen Seite wurde während der Evaluation der verschiedenen Prozessketten gegebenenfalls auch die Integration weiterer Kriterien, Indikatoren und Metriken für eine optimale Analyse notwendig.

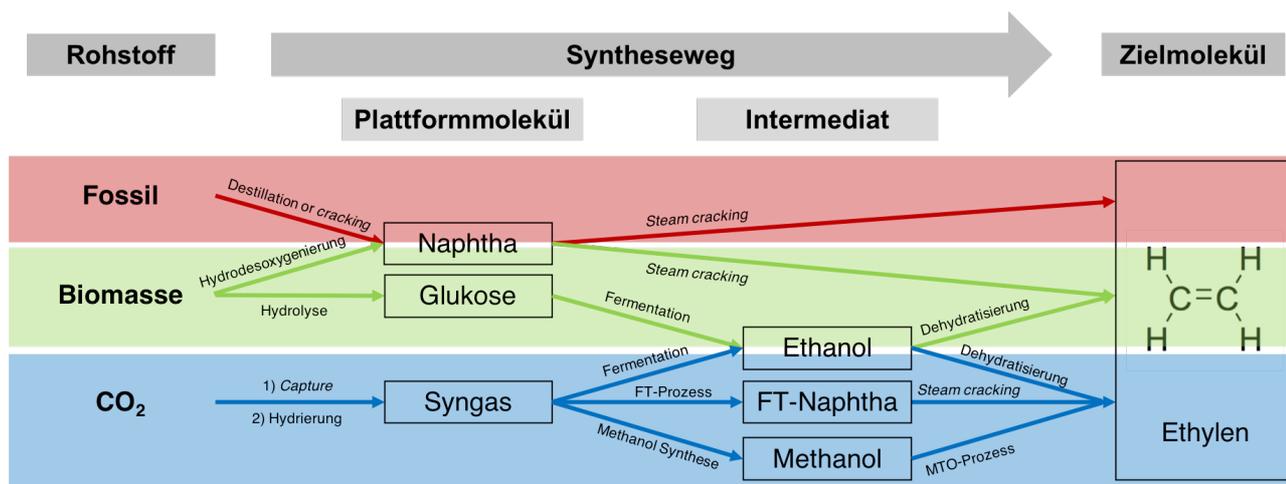
Gemäß Projektplan sollte das Multikriterien-System exemplarisch an einem oder gegebenenfalls einem zweiten Zielmolekül getestet werden. Für eine fundierte und umfangreiche Etablierung, Optimierung und Finalisierung des Multikriterien-Systems war es allerdings notwendig die im System enthaltenen Kriterien, Indikatoren und Metriken an mehreren Molekülen mit verschiedener Komplexität zu testen, von nicht- (Ethylen) über wenig- (MEG) bis hin zu mittel- (Acrylsäure) komplex (Kapitel 3.1.4.1 und 4). Für die Anwendung des vorläufigen Multikriterien-Systems und dessen Optimierung wurden drei Beispielmoleküle ausgewählt: Ethylen, Monoethylenglykol (MEG) und Acrylsäure. Für alle drei Moleküle sind Prozesswege von fossilen Rohstoffen, Biomasse und CO<sub>2</sub> bekannt und etabliert.

Um das Multikriterien-System etablieren zu können, ist es notwendig die vorläufigen Kriterien, Indikatoren und Metriken an Molekülen mit verschiedener Komplexität zu testen, von nicht- (Ethylen) über wenig- (MEG) bis hin zu mittel- (Acrylsäure) komplex.

Ethylen kann konventionell aus dem fossilen Rohstoff Erdöl über den Teilfraktion Naphtha hergestellt werden oder aus Biomasse oder CO<sub>2</sub> (Abbildung 14).

Für die Herstellung aus Biomasse ist die Verwendung erster Generation Biomasse und Fetten und Ölen bekannt. Erste Generation Biomasse wird hydrolysiert und die entstandene Glukose wird als Rohstoff für die mikrobielle Fermentation benutzt, hierbei entsteht Ethanol als Intermediat, welches zu Ethylen dehydratisiert wird. Die Firma Neste beispielsweise nutzt gebrauchtes Speiseöl als Rohstoff, um daraus zunächst bio-basiertes Naphtha herzustellen. Dieses Naphtha kann dann wie fossiles Naphtha genutzt werden (*steam cracking*), um Ethylen herzustellen. Um CO<sub>2</sub> als Rohstoff zu verwenden, ist es in vielen Fällen zunächst nötig Syngas herzustellen, welches dann entweder über einen Fischer-Tropsch Prozess zuerst in Naphtha oder direkt zu Methanol umgewandelt wird, um dann weiter zu Ethylen verarbeitet zu werden.

Eine weitere Möglichkeit ist es CO<sub>2</sub> direkt oder als Bestandteil von industriellen Abgasen wie z. B. Stahlwerkabgasen oder Syngas als Rohstoff für die mikrobielle Gasfermentation zu nutzen.

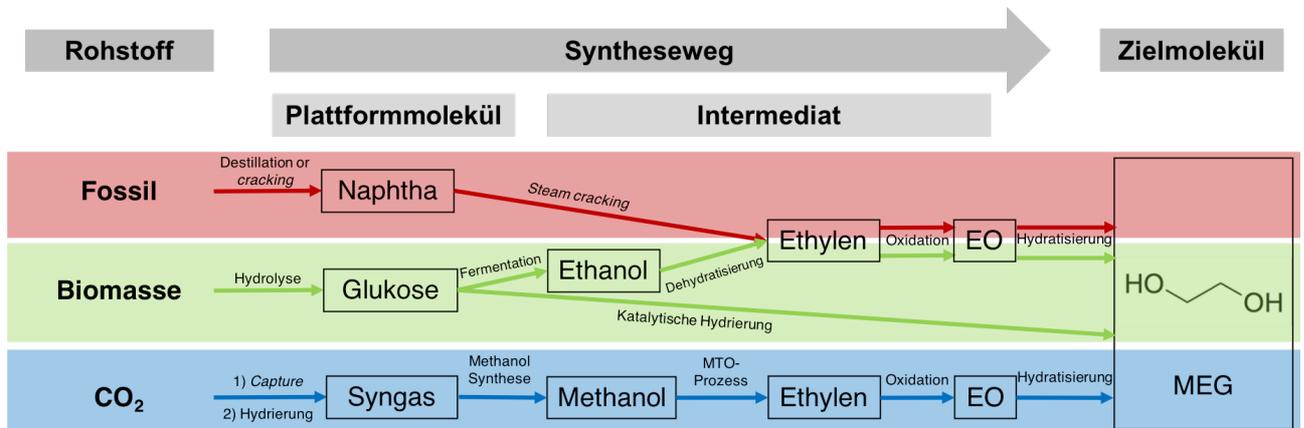


**Abbildung 14:** Prozesswege zur Herstellung von Ethylen.

FT: Fischer-Tropsch, MTO: *Methanol-to-Olefins*.

Die Firma LanzaTech nutzt z. B. Stahlwerkabgase, um Ethanol zu produzieren. Dieses könnte im Anschluss dann zu Ethylen dehydratisiert werden.

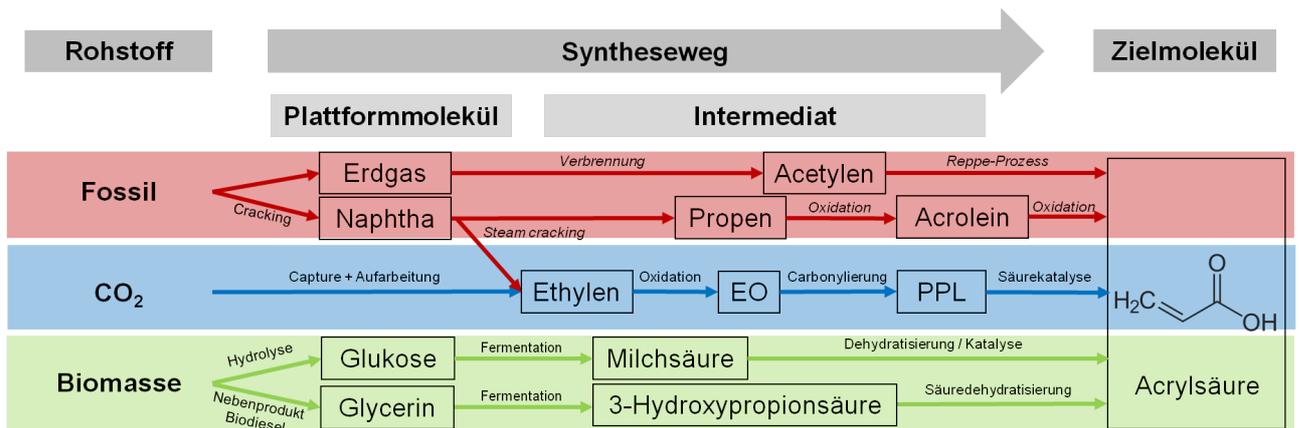
Schon während der Durchführung iterativer Beispielrechnungen mit Ethylen war auffällig, dass die Einfachheit dieses Zielmoleküls und dessen Herstellung auch Limitationen mit sich bringt. Das bedeutet, dass z. B. aufgrund fehlender Reaktionspartner während der Produktion von Ethylen nicht festgelegt werden konnte, ob ein Indikator oder eine Metrik nötig ist, um verschiedene Produktionswege mit verschiedenen Reaktionspartnern miteinander zu vergleichen. Ebenfalls konnten mögliche Limitationen in der Berechnung und Aussagekraft des *Biomass Utilisation Efficiency* (BUE) nur mit der Analyse unterschiedlicher Herstellungsprozesse für Ethylen validiert werden (Tabelle 4).



**Abbildung 15:** Prozesswege zur Herstellung von Monoethylenglykol (MEG).  
EO: Ethylenoxid, MTO: *Methanol-to-Olefins*, MEG: Monoethylenglykol.

Deswegen wurde das vorläufige Multikriterien-System ebenfalls auf Monoethylenglykol (MEG) als Beispielmolekül angewendet. Konventionell wird für die Herstellung von MEG Erdöl als fossiler Rohstoff verwendet, um zunächst einmal Ethylen herzustellen (Abbildung 15). Das Intermediat Ethylen wird dann in einem weiteren Schritt zu Ethylenoxid (EO) oxidiert und anschließend zu MEG hydratisiert.

Als Biomasse kann für die Herstellung von MEG erste Generation Biomasse aber auch zweite Generation Biomasse genutzt werden. Die Firma India Glycols z. B. hydrolysiert den im Zuckerrohr enthaltenen Zucker zu Glukose, welche wiederum zu Ethanol als Intermediat fermentiert wird. Anschließende Dehydratisierung, Oxidation und Hydratisierung führen dann zur Herstellung von MEG. Für die Nutzung von erster und zweiter Generation Biomasse gleichermaßen, hat die Firma Avantium einen Prozess entwickelt, der Zucker erster oder zweiter Generation zunächst zu Glukose hydrolysiert. Diese wird anschließend chemokatalytisch hydriert und es entsteht MEG.



**Abbildung 16:** Prozesswege zur Herstellung von Acrylsäure.  
EO: Ethylenoxid, PPL: Polypropiolacton.

Abschließend wurde das Multikriterien-System für ein Molekül mittlerer Komplexität, der Acrylsäure, angewendet.

Acrylsäure wird konventionell aus fossilen Rohstoffen hergestellt, wobei Erdöl in Naphtha und schließlich in Propen umgewandelt wird, welches in einem ein- oder zweistufigen Verfahren (über Acrolein) zu Acrylsäure oxidiert wird (Abbildung 16). Die industrielle Produktion von Acrylsäure

mittels des Reppe-Prozesses über Acetylen wurde aus ökonomischen und ökologischen Gründen eingestellt und wir daher hier nicht weiter betrachten.

Die Herstellung von Acrylaten aus CO<sub>2</sub> und Ethylen gilt als eine ‚Traumreaktion‘ unter Katalytikern, da sie es ermöglicht Acrylsäure aus einem günstigen, reichlich vorhandenen und nachhaltigen Rohstoff herzustellen. Bisher werden nur wenige Herstellungsrouten industriell genutzt und es wird weiterhin aktiv an neuen Prozessen und Katalysatoren geforscht.

In den letzten Jahren hat die bio-basierte Herstellung von Acrylsäure stark an Aufmerksamkeit gewonnen. Prominente Herstellungsrouten sind, unter anderem, die Fermentation von Glukose aus Biomasse über Milchsäure, sowie die Fermentation aus Glycerin, welches als Nebenprodukt bei der Biodieselproduktion anfällt, und über 3-Hydroxypropionsäure, welche in Acrylsäure umgewandelt werden kann. Seit 2012 arbeiten BASF CE, Cargill und Novozymes S.A. in einem *Joint Venture* an der Produktion von bio-basierter 3-Hydroxypropionsäure, welche in Acrylsäure umgewandelt wird. Da die Herstellung von MEG und Acrylsäure komplexere und mehr Reaktionsschritte enthält als die von Ethylen, war es durch eine Kombination und einen Vergleich der Anwendungsbeispiele möglich die kurz in Kapitel 3.1.4 und im Folgenden im Detail ausgeführten Nachteile des vorläufigen Multikriterien-Systems (Tabelle 4) zu bearbeiten und zu beseitigen.

**Tabelle 4:** Vor- und Nachteile des vorläufigen Multikriterien-Systems

Indikator/Metrik	Beschreibung/Formel	Vorteile	Nachteile
<b>Atomökonomie</b>	Gibt an, wie groß der Anteil aller Reaktionspartner am Produkt ist.  Stöchiometrische Masse der Produkte / Stöchiometrische Masse aller Reaktionspartner.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Bezieht nicht nur den "Haupt"-Rohstoff/Plattformmolekül mit ein sondern auch die Reaktionspartner.</li> <li>• Gibt Auskunft über die Bildung von Nebenprodukten.</li> </ul>	Gibt nur eine stöchiometrische Auskunft, kein Einbezug realer Masseflüsse.
<b>Biomass Utilisation Efficiency (BUE)</b>	Gibt an, wie viel der Biomasse ins Produkt gelangt.	Berechnet, wieviel Biomasse ins Produkt gelangt.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Sollte nicht nur Biomasse als Rohstoff betrachten, sondern auch fossile Rohstoffe und CO<sub>2</sub>.</li> <li>• Bezieht sich in der Rechnung auf das Plattformmolekül und nicht auf die eigentliche Biomasse.</li> </ul>
<b>Coproduktion von hochwertigen Chemikalien / Nebenprodukte</b>	Gibt an, ob verwendbare Coprodukte oder Nebenprodukte entstehen.	Gibt Auskunft darüber, ob der Prozess zielgerichtet auf ein Molekül oder auf	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Keine geeignete direkte oder indirekte Metrik vorhanden, hier wird nur eine Ja/Nein Aussage benötigt.</li> </ul>

		mehrere gewünschte Moleküle gerichtet ist.	<ul style="list-style-type: none"> <li>Betrachtung ist abhängig von der gewünschten Aussage des Anwenders.</li> </ul>
<b>Enthalpie der Reaktion</b>	Gibt die theoretischen Enthalpie der Reaktion an.	<ul style="list-style-type: none"> <li>Wird aus der theoretischen Standardenthalpie berechnet.</li> <li>Ermöglicht den Vergleich verschiedener Prozesse, wenn die unterschiedlichen Enthalpien der verschiedenen prozess-spezifischen Intermediate miteinbezogen und verglichen werden.</li> </ul>	Berechnung erfolgt nur anhand der Stöchiometrie der chemischen Reaktion und bezieht keine tatsächliche Prozessenergie mit ein.
<b>Änderung der Chemische Komplexität</b>	Änderung in der Komplexität von Edukt zu Produkt ( <a href="https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov">https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov</a> )	<ul style="list-style-type: none"> <li>Ermöglicht einen einfachen Vergleich zwischen Rohstoff und Produkt.</li> <li>Gibt indirekt Auskunft über benötigte Reaktionspartner, Reaktionsschritte und damit, benötigte Ressourcen und anfallende Nebenprodukte und Abfälle.</li> </ul>	Welche Darstellung ist aussagekräftig?
<b>Konversionsrate</b>	Gibt an, wieviel Rohstoff in Plattformmolekül umgesetzt wurde oder wie hoch die Konversionsrate des gesamten Prozesses ist.	Ermöglicht die Unterscheidung zwischen verschiedenen Prozessen mit demselben Plattform- und Zielmolekül.	Als alleiniger Indikator aussagekräftig?
<b>Prozessenergie</b>	Im Prozess benötigte Energie pro produziertem kg Produkt.	Ermöglicht die Unterscheidung zwischen verschiedenen Prozessen mit demselben Plattform- und Zielmolekül.	Daten/Informationen für diese Berechnung sind nicht leicht zu bekommen.

<p><b>Reaction Mass Efficiency</b></p>	<p>Masse des isolierten Produkts/Gesamtmasse der eingesetzten Reaktionspartner.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Wie Atomökonomie, nur bezieht sie die tatsächliche, im Prozess genutzte Masse mit ein.</li> <li>• Ermöglicht es, verschiedene Prozesse miteinander zu Vergleichen.</li> <li>• Bezieht nicht nur den "Haupt"-Rohstoff/Plattformmolekül mit ein sondern auch die Reaktionspartner.</li> <li>• Gibt Auskunft über die Bildung von Nebenprodukten.</li> </ul>	<p>Daten/Informationen für diese Berechnung, wie z.B. Masseflüsse innerhalb des gesamten Prozesses, sind nicht immer öffentlich zugänglich und frei verfügbar.</p>
<p><b>Technologische Reife</b></p>	<p>Gibt Auskunft über den Status des Prozesses.</p>	<p>Ermöglicht einen schnellen Überblick, ob die Technologie bereits direkt einsetzbar ist oder noch weitere Entwicklung benötigt.</p>	<p>Einordnung von Prozessen oft subjektiv und teilweise schwierig.</p>

Die Indikatoren und Metriken *Biomass Utilisation Efficiency* (BUE), Coproduktion von hochwertigen Chemikalien und Nebenprodukte, sowie Enthalpie der Reaktion, Änderung der chemischen Komplexität und Konversion zeigten dabei die größten Limitationen, die Optimierungen bedürfen (Tabelle 4).

***Biomass Utilisation Efficiency* (BUE)**

Der BUE gibt an, wieviel von der als Rohstoff verwendeten Biomasse in das Produkt gelangt. Bei der Verwendung dieser Metrik im Multikriterien-System war es wichtig den Rohstoff nicht nur auf Biomasse zu beschränken, sondern auch fossile Rohstoffe und CO<sub>2</sub> zuzulassen. Deswegen wurde die *Biomass Utilisation Efficiency* (BUE) in *Feedstock Utilisation Efficiency* (FUE) umbenannt. Allerdings bezieht die ursprüngliche stöchiometrische Berechnung des BUE nicht den eigentlichen Rohstoff (*Feedstock*) mit ein, sondern das erste Plattformmolekül, welches während des Prozesses entsteht (Iffland et al. 2015). Hier ist eine klare Differenzierung zwischen Rohstoff und Plattformmolekül wichtig, um keine falschen Aussagen zu treffen. Dennoch sollten aber folgende Aussagen mit dieser Metrik getroffen werden können: Wieviel Rohstoff gelangt ins Zielmolekül? und Wieviel Plattformmolekül gelangt ins Zielmolekül?

Dazu wurde neben der ***Primary Feedstock Utilisation Efficiency* (pFUE)** die ***Chemical Feedstock Utilisation Efficiency* (cFUE)** eingeführt. Die cFUE bezieht sich auf die stöchiometrische Berechnung, d.h. wieviel der Plattformchemikalie ins Produkt gelangt. Die pFUE bezieht sich darauf,

wieviel des Rohstoffs ins Produkt gelangt und wird aus dem cFUE zusammen mit der Konversionsrate von Rohstoff zum Plattformmolekül oder, wenn vorhanden, mit der Gesamt-Konversionsrate des gesamten Prozesses berechnet. Somit ist es zusätzlich möglich die stoffliche Effizienz von Prozessen mit demselben Plattform- und Zielmolekül unterscheiden zu können. Bei der Berechnung des cFUE ist es wichtig anzumerken, dass es ab zwei Reaktionsschritten im Produktionsprozess absolut notwendig ist den genauen Reaktionsmechanismus zu kennen, um die Atome im Produkt den jeweiligen Reaktionspartnern zuordnen zu können und somit keine falschen Aussagen zu treffen. Was den pFUE anbelangt, so werden hier zwar Materialflüsse und die chemische Effizienz in der Konversion vom Rohstoff zum Plattformmolekül betrachtet, allerdings gibt dieses numerische Ergebnis keinerlei Auskunft über weitere wichtige Aspekte, die in dieser Hinsicht betrachtet werden müssen, wie z.B. die Herkunft des Rohstoffs also ob es gegebenenfalls ein Abfallprodukt ist, welches so genutzt wird.

### ***Co-Reactant Independency***

Obwohl die Atomökonomie in der Berechnung alle Reaktionspartner des Prozesses mit einbezieht, gibt sie keine direkt ersichtliche Aussage darüber, wieviel von anderen Reaktionspartnern neben der „Haupt“-Plattformchemikalie ins Produkt gelangt. Dazu wurde die Metrik der ***Co-Reactant Independency*** eingeführt. Diese gibt nicht nur an, inwieweit der Prozess ausgehend von einer bestimmten Plattformchemikalie unabhängig von anderen benötigten Reaktionspartnern ist, sondern auch zugleich wie groß der Anteil der Plattformchemikalie im Produkt ist.

### **Konversion**

Für den Einbezug der Effizienz der Konversion wurde entschieden beide Möglichkeiten in die ***Primary Feedstock Utilisation Efficiency (pFUE)*** zu integrieren und es nicht als eigenständigen Indikator zu verwenden. Denn die Konversionsrate ist ein wesentlicher Bestandteil zur Berechnung des pFUE und wäre somit als eigenständige Metrik redundant. So wird in jedem Fall die Konversionsrate vom Rohstoff zur Plattformchemikalie genutzt wird, um den pFUE zu berechnen. Sollte aber die Gesamtkonversionsrate des ganzen Prozesses bekannt sein, so wird diese für die Berechnung des pFUE genutzt, um die Aussage des Multikriterien-Systems genauer zu machen. Somit ist es außerdem möglich die stöchiometrisch erhaltenen Ergebnisse hinsichtlich ihrer Aussage zu bewerten und gegebenenfalls Trends in der Abweichung von theoretischem und tatsächlichem Wert zu erkennen.

### **Coproduktion von hochwertigen Chemikalien und Nebenprodukte**

Für die Coproduktion von hochwertigen Chemikalien und Nebenprodukten war es bis jetzt noch nicht möglich finale Optimierungen vorzunehmen. Es wurde geplant zunächst im System eine Indizierung mit Ja/Nein vorzunehmen und die genaue Gewichtung und Darstellung dieses Indikators mit den Stakeholdern im Stakeholder-Workshop zu diskutieren. Denn sie sind Teil der späteren Anwender und können Argumente und Vorschläge für den Einsatz und die Umsetzung dieses Indikators geben.

Die **Enthalpie der Reaktion** wurde bisher aus den theoretischen Standardenthalpien aller Reaktionspartner und Intermediate berechnet. Es wurde aber geprüft, ob man diese Berechnungen nicht vereinfachen könnte, indem man nur die theoretischen Standardenthalpien von Plattformchemikalie und Produkt berücksichtigt. Somit wäre allerdings keine auf Energie-basierende Unterscheidung zwischen verschiedenen Prozessen mit dem gleichen Start- und Zielmolekül möglich.

### **Änderung der chemischen Komplexität**

Auch die Darstellung der Aussage der **Änderung der chemischen Komplexität** wurde noch nicht final geklärt. Ist eine numerische Aussage hilfreich oder ist eine farbliche Darstellung besser die sich darauf bezieht, ob die Komplexität von Plattformchemikalie zu Zielmolekül abnimmt oder zunimmt. Eine weitere Detaillierung von Indikatoren und ihr Zusammenspiel wurde zu einem späteren Zeitpunkt überprüft, um diesen vielversprechenden Ansatz besser zu verstehen, einordnen und nutzen zu können.

Diese noch offenen Fragen wurden im weiteren Verlauf der Optimierung, Bewertung und Finalisierung des Multikriterien-Systems (Kapitel 3.2) und im Zuge des Stakeholder-Workshops bearbeitet und diskutiert. Die Resonanz der EvaChem-Stakeholder auf die Vorgehensweise im Projekt sowie des etablierten und angewendeten Multikriterien-System war durchweg positiv. Der Großteil der Stakeholder ist an diesem vereinfachten und praktikablen System zur Chemikalienproduktion interessiert und würde dieses für eine Vorauswahl verschiedener Prozesswege anwenden. Somit wurde auch die oben erwähnte Indizierung der Coproduktion von hochwertigen Chemikalien und Nebenprodukte mit Ja/Nein beibehalten. Generell besteht von Seiten der Stakeholder der Wunsch das System noch auf weitere, komplexere Zielmoleküle anzuwenden und zu testen, wie z.B. aromatische oder Stickstoff-enthaltende Moleküle (Kapitel 5).

## **3.2 Optimierung, Bewertung und Finalisierung des Multikriterien-Systems**

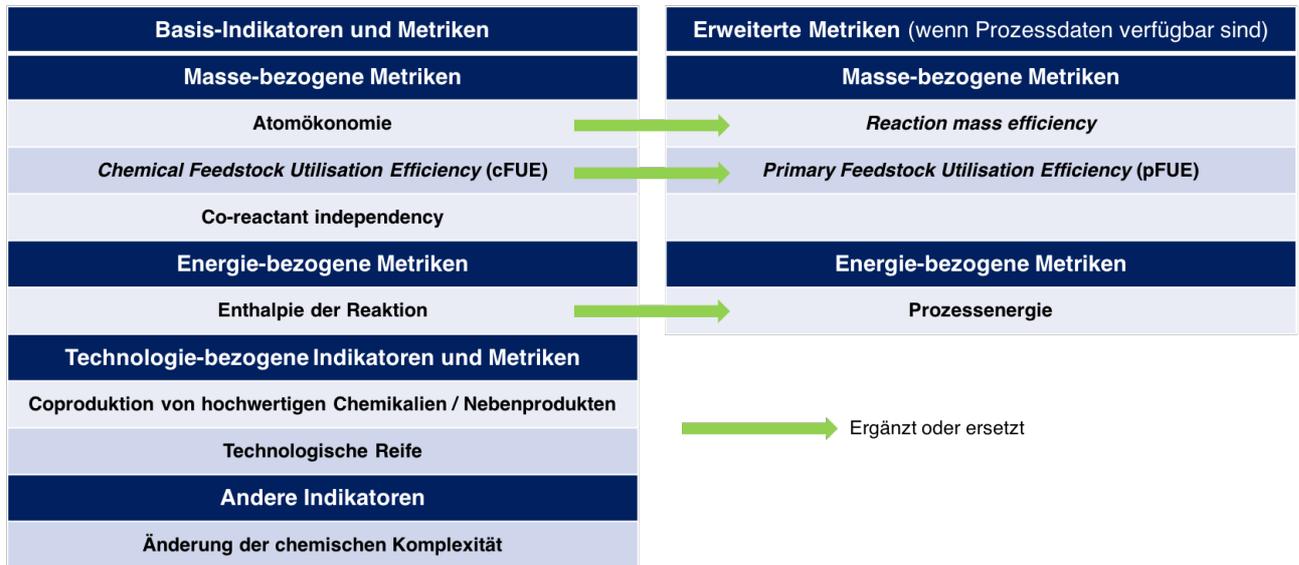
### **3.2.1 Optimierung des Multikriterien-Systems**

Durch die Anwendung des vorläufigen Multikriterien-Systems auf die Beispielmoleküle Ethylen, Monoethylenglykol (MEG) und Acrylsäure (Kapitel 3.1.4.1) war es möglich das System zu optimieren und einen Teil der zuvor identifizierten Nachteile zu umgehen (Kapitel 3.1.4; Tabelle 4). Noch offene Diskussionspunkte in Hinblick auf die Indikatoren und Metriken Coproduktion von hochwertigen Chemikalien und Nebenprodukten, Enthalpie der Reaktion und Änderung der chemischen Komplexität wurden in weiteren Optimierungsschritten und durch Diskussion mit den Stakeholdern im Workshop final geklärt. Darauf aufbauend war es dann möglich aussagekräftige Ergebnisse für die verschiedenen Prozesswege von Ethylen, MEG und Acrylsäure zu generieren.

Die im optimierten Multikriterien-System enthaltenen Indikatoren und Metriken sind in zwei Gruppen unterteilt: Basis-Indikatoren und -Metriken sowie Erweiterte Metriken. Die sogenannten Basis-Indikatoren und -Metriken können aus der chemischen Struktur abgeleitet werden (z. B. Änderung der chemischen Komplexität) oder stöchiometrisch basierend auf der dem Prozess zugrundeliegenden Reaktionsgleichungen.

Da diese Informationen für jeden Prozess verfügbar sind, können diese Indikatoren und Metriken immer bestimmt oder berechnet werden.

Unter die Erweiterten Metriken fallen die *Primary Feedstock Efficiency* (pFUE), *Reaction Mass Efficiency* (RME) und die Prozessenergie, diese Metriken sind prozess-spezifisch und die nötigen Daten hierfür daher nicht immer öffentlich zugänglich oder bekannt. Deswegen können sie nur verwendet werden, wenn die zur Berechnung notwendigen Daten verfügbar sind (Abbildung 17).


**Abbildung 17:** Übersicht Metriken und Indikatoren des optimierten Multikriterien-Systems

Die Verwendung dieser Erweiterten Metriken kann in der späteren Anwendung des Multikriterien-Systems dem jeweiligen Anwender überlassen werden und führt auf der einen Seite für den jeweiligen Anwender zu noch aussagekräftigeren Ergebnissen des Multikriterien-Systems, es kann auf der anderen Seite aber auch bislang stöchiometrisch erhobene Metriken ersetzen. Des Weiteren ist es mit diesen Erweiterten Metriken möglich die stöchiometrisch erhaltenen Ergebnisse hinsichtlich ihrer Aussagekraft zu bewerten und gegebenenfalls Trends in der Abweichung vom theoretischen, stöchiometrisch berechneten, und dem tatsächlichen, Prozessdaten-basierten, Wert zu erkennen. So kann die Atomökonomie mit der *Reaction Mass Efficiency* ergänzt oder ersetzt werden, die *Chemical Feedstock Efficiency (cFUE)* mit der *Primary Feedstock Efficiency (pFUE)* und die Enthalpie der Reaktion mit der Prozessenergie (Abbildung 17).

**Tabelle 5:** Definitionen und Vor- und Nachteile des optimierten Multikriterien-Systems

Indikator/Metrik	Beschreibung/Formel	Vorteile	Nachteile
<b>Basis-Indikatoren und Metriken</b>			
<b>Masse-bezogene Metriken</b>			
<b>Atomökonomie</b>	Gibt an, wie groß der Anteil aller Reaktionspartner am Produkt ist. Stöchiometrische Masse der Produkte / Stöchiometrische Masse der Reaktionspartner.	Bezieht nicht nur den "Haupt"-Rohstoff/Plattformmolekül mit ein sondern auch die Reaktionspartner.	Gibt Auskunft über die Bildung von Nebenprodukten.
<b><i>Chemical Feedstock Utilisation Efficiency (cFUE)</i></b>	Wie viel des Plattformmoleküls gelangt ins Produkt?	Berechnet, wie viel vom Plattformmolekül ins Produkt gelangt.	<ul style="list-style-type: none"> <li>Gibt keine Auskunft über die eventuelle Nutzung und Menge von anderen Reaktionspartnern im Molekül.</li> </ul>

			<ul style="list-style-type: none"> <li>• Keine Auskunft über Nebenprodukte.</li> <li>• Hier ist es notwendig, ab zwei oder mehr Reaktionsschritten die Stöchiometrie aller Prozessschritte mit einzubeziehen.</li> <li>• Es werden durch diesen Parameter auch Unterschiede verschiedener Prozesswege mit demselben Plattformmolekül und Produkt möglich.</li> </ul>
<b>Co-Reactant Independency</b>	Ist der Prozess unabhängig von anderen Reaktionspartnern?	Gibt direkte Auskunft darüber, wie viel des Produkts aus dem Plattformmolekül besteht und somit indirekt Auskunft über den Anteil von Co-Reaktionspartnern im Produkt.	Gibt keine Auskunft über die Bildung von Nebenprodukten.
<b>Energie-bezogene Metriken</b>			
<b>Enthalpie der Reaktion</b>	Wird aus der theoretischen Standardenthalpie berechnet.	Ermöglicht den Vergleich verschiedener Prozesse, wenn die unterschiedlichen Enthalpien der verschiedenen prozess-spezifischen Intermediate miteinbezogen und verglichen werden.	Berechnung erfolgt nur anhand der Stöchiometrie der chemischen Reaktion und bezieht keine tatsächliche Prozessenergie mit ein.
<b>Technologie-bezogene Indikatoren und Metriken</b>			
<b>Coproduktion von hochwertigen Chemikalien / Nebenprodukten</b>	Gibt an, ob verwendbare Coprodukte oder Nebenprodukte entstehen.	Gibt Auskunft darüber, ob der Prozess zielgerichtet auf ein Molekül oder auf mehrere gewünschte Moleküle gerichtet ist.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Keine geeignete direkte oder indirekte Metrik vorhanden, vielleicht wird hier auch nur eine Ja/Nein Aussage benötigt</li> <li>• Betrachtung ist abhängig von der gewünschten Aussage des Anwenders.</li> </ul>
<b>Technologische Reife</b>	Gibt Auskunft über den Status des Prozesses.	Ermöglicht einen schnellen Überblick, ob die Technologie bereits direkt einsetzbar ist oder noch weitere Entwicklung benötigt.	Einordnung von Prozessen oft subjektiv und teilweise schwierig.

Andere Indikatoren			
<b>Änderung der chemischen Komplexität</b>	Änderungen in der Komplexität von Edukt und Produkt ( <a href="https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov">https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov</a> )	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ermöglicht einen einfachen Vergleich zwischen Rohstoff und Produkt.</li> <li>• Gibt indirekt Auskunft über benötigte Reaktionspartner und Nebenprodukte.</li> </ul>	Welche Darstellung ist aussagekräftig?
Erweiterte Metriken (wenn Prozessdaten verfügbar sind)			
Masse-bezogene Metriken			
<b>Primary Feedstock Utilisation Efficiency (pFUE)</b>	Wieviel Rohstoff gelangt ins Produkt?	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Berechnet, wieviel Rohstoff ins Produkt gelangt.</li> <li>• wird berechnet mit dem cFUE und der Konversionsrate vom Rohstoff zum Plattformmolekül oder, wenn vorhanden, mit der Gesamt-Konversionsrate des Prozesses.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Keine Auskunft über Nebenprodukte.</li> <li>• Neben der Konversionsrate vom <i>primary feedstock</i> zum <i>chemical feedstock</i> müssen noch weitere Aspekte, die nicht chemischer Natur sind und nur die Materialflüsse betrachten, einbezogen werden.</li> </ul>
<b>Reaction Mass Efficiency</b>	Masse des isolierten Produkts/Gesamtmasse der eingesetzten Reaktionspartner.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Wie Atomökonomie, nur bezieht es die tatsächliche, im Prozess genutzte Masse mit ein.</li> <li>• Ermöglicht es verschiedene Prozesse miteinander zu vergleichen.</li> <li>• Bezieht nicht nur den "Haupt"-Rohstoff/Plattformmolekül mit ein sondern auch die Reaktionspartner.</li> <li>• Gibt Auskunft über die Bildung von Nebenprodukten.</li> </ul>	Daten/Informationen für diese Berechnung, wie z.B. Masseflüsse innerhalb des gesamten Prozesses, sind oft nicht zugänglich oder nicht vorhanden.
Energie-bezogene Metriken			
<b>Prozessenergie</b>	Im Prozess benötigte Energie pro produziertem kg Produkt.	Ermöglicht die Unterscheidung zwischen verschiedenen	Daten/Informationen für diese Berechnung sind oft nicht zugänglich oder nicht vorhanden.

		Prozessen mit demselben Plattform- und Zielmolekül.	
--	--	---	--

Nach der Optimierung und finalen Auswahl der in Tabelle 5 dargestellten Indikatoren und Metriken des Multikriterien-Systems wurden die Basis-Indikatoren und -Metriken, die lediglich Stöchiometrie-basiert berechnet werden können, noch einmal auf die Moleküle Ethylen und Monoethylenglykol (MEG) angewendet. Diese Vorgehensweise war nötig, um noch vorhandene Lücken in der Berechnung der einzelnen Basis-Metriken während der Optimierungsphase zu schließen und um die vorerst geeignetste Darstellungsweise der Ergebnisse zu ermitteln (Details in der Langfassung des Zwischenberichts zum Verbundprojekt EvaChem, Mai 2020, Kapitel 4.2.1 und 4.2.2). Gemäß Projektplan sollte das Multikriterien-System exemplarisch an einem oder gegebenenfalls einem zweiten Zielmolekül getestet werden. Für eine fundierte und umfangreiche Etablierung und Optimierung des Multikriterien-Systems war es allerdings notwendig die im System enthaltenen Kriterien, Indikatoren und Metriken an mehreren Molekülen mit verschiedener Komplexität zu testen, von nicht- (Ethylen) über wenig- (MEG) bis hin zu mittel- (Acrylsäure) komplex (Kapitel 3.1.4.1 und 4).

### 3.2.2 Bewertung des Multikriterien-Systems – Teilvorhaben 3

Ziel des Teilvorhabens 3 war eine umfassende und kritische Bewertung des etablierten und iterativ optimierten Multikriterien-Systems (Kapitel 3.1 und 3.2.1). Diese kritische Bewertung erfolgte unter verschiedenen Gesichtspunkten: Anwenderverständlichkeit und Anwenderfreundlichkeit, die Möglichkeiten und Grenzen des Anwendungsbereichs sowie die Einbettung des EvaChem Multikriterien-Systems in eine ganzheitliche Betrachtung der Rohstoffnutzung (Kapitel 3.2.2.1 und 3.2.2.2)

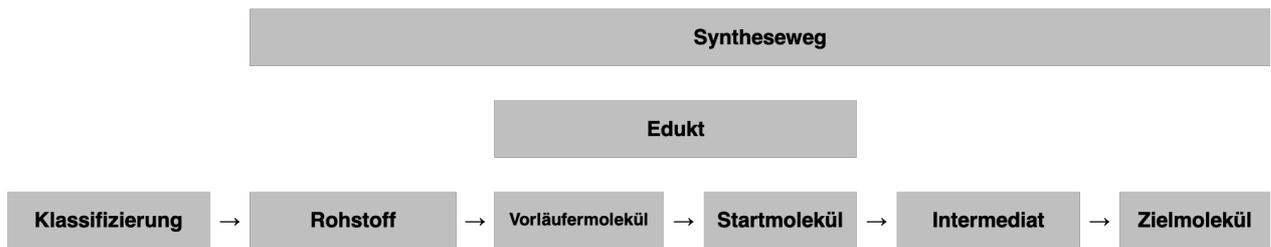
#### 3.2.2.1 Systemdifferenzierung und Definitionen

Die iterative Anwendung des Multikriterien-Systems auf Beispielmoleküle (Kapitel 3.1.4.1) und die integrativ, parallel dazu durchgeführte Bewertung ergab, dass die bisherige Bezeichnung und Abgrenzung der einzelnen Prozessschritte in Rohstoff, Plattformmolekül und Intermediat (Syntheseweg) und Zielmolekül (Abbildung 18 A) nicht eindeutig und differenziert genug sind. Aufgrund dessen wurde die Abgrenzung der einzelnen Prozessschritte und deren Benennung weiter ausdifferenziert und die vorherigen Bezeichnungen Plattformmolekül und Intermediat durch die Bezeichnungen Vorläufermolekül, Startmolekül und Intermediat ersetzt (Abbildung 18 B).

**A Vorläufiges System**

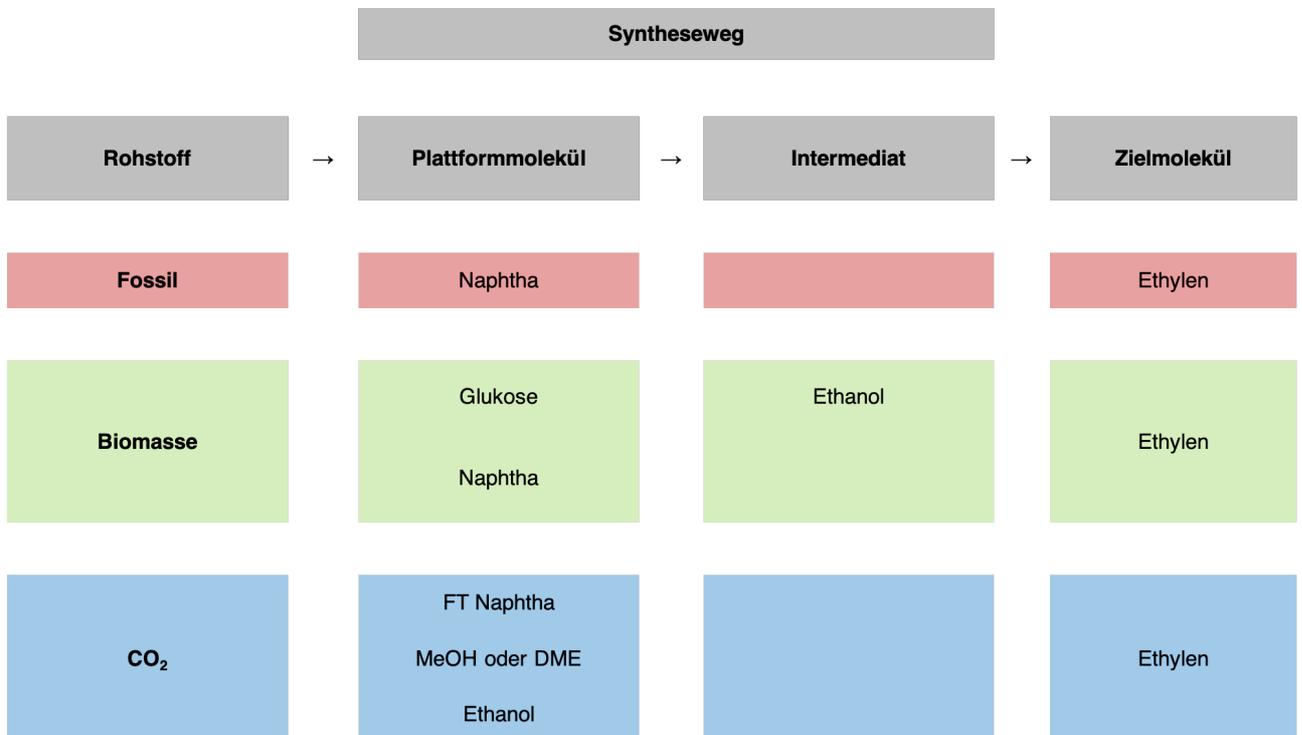


**B Finales System**



**Abbildung 18:** Vergleich des optimierten und finalen Systems zur Bezeichnung und Abgrenzung einzelner Prozessschritte

Die in Abbildung 19 dargestellte bisherige Systemdifferenzierung am Beispiel von Ethylen beinhaltet eine vereinfachte, eher grobe Abgrenzung der einzelnen Prozessschritte. So wurde keine detaillierte Differenzierung der einzelnen Rohstoffe wie zum Beispiel Biomasse angegeben.



**Abbildung 19:** Bisherige Systemdifferenzierung am Beispiel von Ethylen

Ebenfalls wurde nicht deutlich, welche Moleküle oder Stoffgemische als Plattformmolekül klassifiziert werden, oder ob es eventuell noch zu berücksichtigende Vorläufermoleküle gibt, die in die Prozessevaluation mit einbezogen werden können oder sollten. Diese Limitierungen können beim

späteren Anwender des Multikriterien-Systems Missverständnisse begünstigen, welche die Verwendung und richtige Anwendung von EvaChem behindern oder gar verhindern. Daher waren eine deutlichere Abgrenzung und Ausdifferenzierung der einzelnen Prozessschritte, sowie klare Definitionen der einzelnen Bezeichnungen grundlegend notwendig.

Abbildung 20 zeigt das Ergebnis der Verfeinerung und Ausdifferenzierung der einzelnen Prozessschritte. Die Ebene der Rohstoffe wurde klarer definiert und mit den entsprechenden Beispielen für die jeweiligen Prozesswege der Ethylenherstellung versehen. Verschiedene Klassen von Biomasse (1G, 2G oder andere Arten von Biomasse) wurden als solche klassifiziert und benannt.

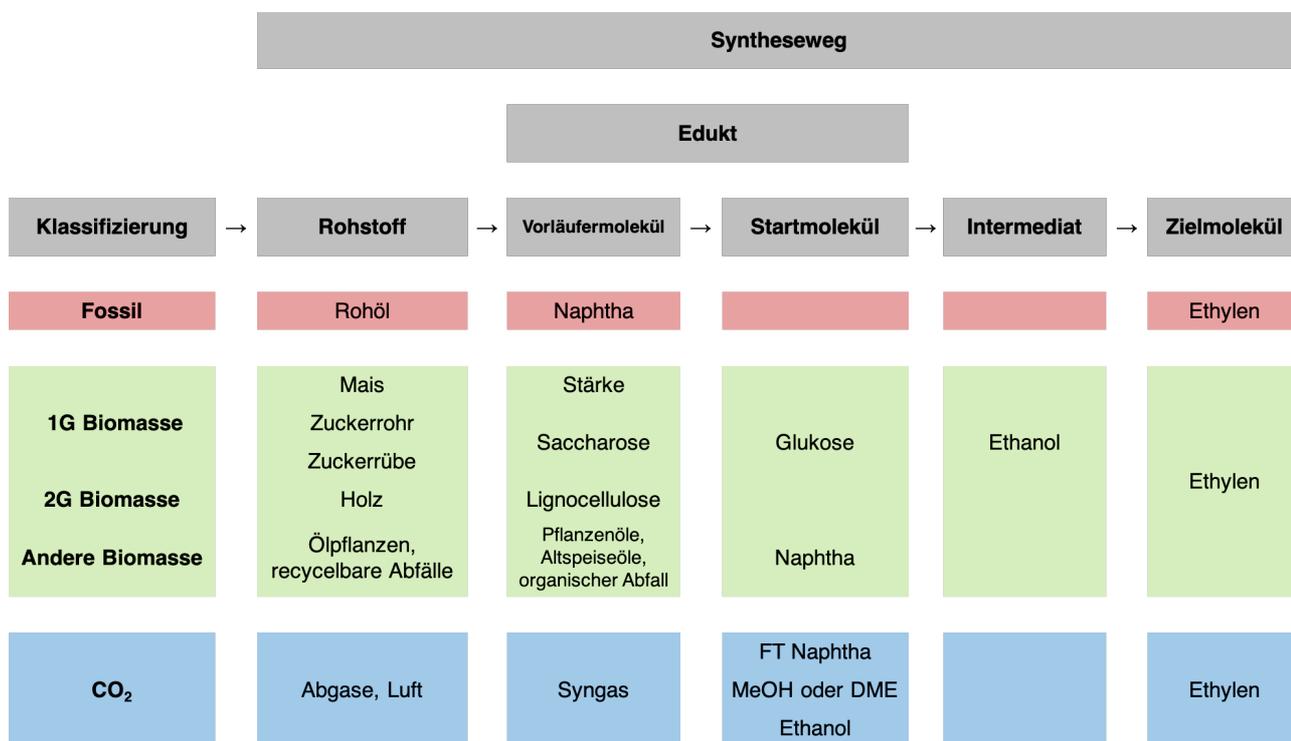


Abbildung 20: Überarbeitete, finale Systemdifferenzierung am Beispiel von Ethylen

Des Weiteren wurden aus den vorherigen zwei Bezeichnungen Plattformmolekül und Intermediat, drei Bezeichnungen: Vorläufermolekül, Startmolekül und Intermediat. Wobei das Vorläufer- und Startmolekül hier als Edukt zusammengefasst werden können. Somit ergibt sich ein Spielraum, der eine flexiblere Zuordnung der einzelnen prozessspezifischen Moleküle erlaubt. Naphtha zum Beispiel ist dann, abhängig von Rohstoff und Prozessweg, entweder Vorläufermolekül oder Startmolekül, aber immer das Ausgangsprodukt (Edukt).

Diese aktualisierte, detaillierte Darstellung zusammen mit den in Tabelle 6 aufgeführten Definitionen macht das Multikriterien-System für den Anwender verständlicher und erhöht somit die Bedienerfreundlichkeit.

**Tabelle 6:** Definitionen der einzelnen Bezeichnungen im Multikriterien-System

Bezeichnung	Allgemeine Definition	Definition im Rahmen des EvaChem-Projekts
<b>Klassifizierung<sup>1</sup></b>	Zusammenfassen von Objekten zu Klassen, Mengen, Kategorien.	Zusammenfassung verschiedener Rohstoffe zu den Kategorien Fossil, Biomasse und CO <sub>2</sub> .
<b>Rohstoff<sup>2</sup></b>	Für eine industrielle Be-, Verarbeitung geeigneter oder bestimmter Stoff, den die Natur liefert. Dieser kann tierischer, pflanzlicher oder mineralischer Herkunft sein.	Ist der Ursprung des Edukts (Vorläufermolekül, Startmolekül).
<b>Vorläufermolekül</b>	Ist ein Molekül das als ein Ausgangsprodukt für weitere Synthese-/Umsetzungsschritte dient.	Dient als Ausgangsprodukt für eine chemische Umsetzung zum Startmolekül. Kann ein definiertes Molekül oder ein Molekülgemisch sein (z.B. Naphtha).
<b>Startmolekül</b>	Ist in der Chemie das eingesetzte Ausgangsmolekül für die chemischen Synthese eines Zielmoleküls.	Kann ein Zucker, eine Grund-/oder Plattformchemikalie sein, die entweder durch chemische Umsetzung eines Vorläufermoleküls entsteht oder direkt aus dem Rohstoff gewonnen wird.
<b>Intermediat<sup>3</sup></b>	Ist ein Zwischenprodukt das aus chemischen, technischen oder wirtschaftlichen Gründen nicht isoliert, sondern weiter umgesetzt wird.	Ist ein Zwischenprodukt im Syntheseweg vom Startmolekül zum Zielmolekül.
<b>Zielmolekül<sup>4</sup></b>	Ist in der Chemie das gewünschte Endprodukt einer chemischen Synthese.	Ist das gewünschte Endprodukt des Herstellungsprozesses. Das Zielmolekül eines Herstellungsprozesses kann das Startmolekül eines anderen Prozesses sein. Des Weiteren kann es entweder ein definiertes Molekül oder ein Molekülgemisch sein (z.B. BTX).

<sup>1</sup> [www.duden.de](http://www.duden.de)<sup>2</sup> [www.umweltdatenbank.de](http://www.umweltdatenbank.de); [www.duden.de](http://www.duden.de)<sup>3</sup> [www.spektrum.de/lexikon/chemie](http://www.spektrum.de/lexikon/chemie)<sup>4</sup> Beyer, H. und Walter, W. 1984: Organische Chemie. S. Hirzel Verlag, Stuttgart, Deutschland.

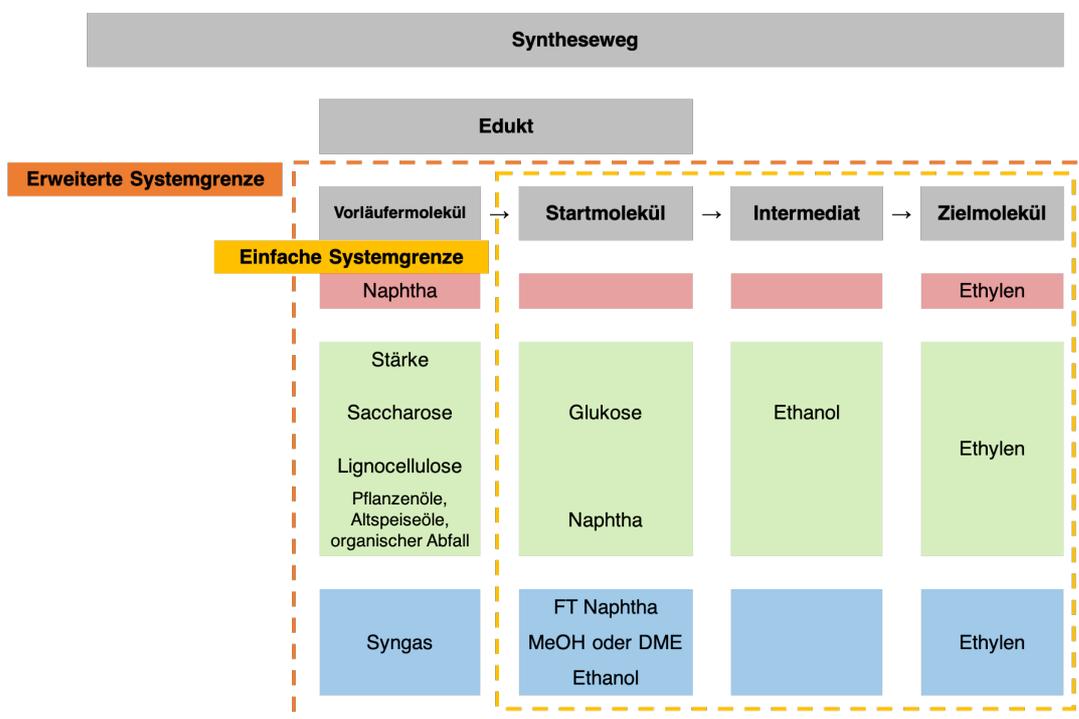
### 3.2.2.2 Systemgrenzen und Anwendungsbereich des Multikriterien-Systems

Basierend auf der vorgenommenen klaren Differenzierung des Systems und der damit verbundenen Definitionen der einzelnen Prozessschritte und deren Bezeichnungen (Kapitel 3.2.2.1), war es möglich die anwendungsrelevanten und bewertungsrelevanten Fragestellungen, resultierende Systemgrenzen und somit den Anwendungsbereich des Multikriterien-System EvaChem festzulegen und zu bewerten.

#### Anwendungsrelevante Fragestellungen und Systemgrenzen

Der Fokus der anwendungsrelevanten Fragestellungen liegt auf anwendungsspezifischen Bedingungen, die vor der An- und Verwendung des Multikriterien-Systems durch den Anwender beantwortet werden sollten. Hierzu zählt zum einen die Frage nach der Verfügbarkeit von Prozessdaten und zum anderen die Frage, ob die Prozessevaluation mit dem Vorläufermolekül oder Startmolekül beginnt.

Sind Prozessdaten vorhanden, kann die Evaluation unter Verwendung der Erweiterten Metriken durchgeführt werden. Sind diese nicht vorhanden, werden die Basis-Indikatoren und -Metriken die auf Stöchiometrie basieren verwendet (Kapitel 3.2.3, Abbildung 24, Tabelle 7). Der Vorteil der Verwendung der Erweiterten Metriken ist, dass sie zu noch aussagekräftigeren Ergebnissen des Multikriterien-Systems führen und die stöchiometrisch erhobenen Metriken ersetzen können. Darüber hinaus ist es mit diesen Erweiterten Metriken möglich die stöchiometrisch erhaltenen Ergebnisse hinsichtlich ihrer Aussagekraft zu bewerten und gegebenenfalls Trends in der Abweichung vom theoretischen (Stöchiometrie-basiert) und tatsächlichen Wert (Prozessdaten-basiert) zu erkennen.



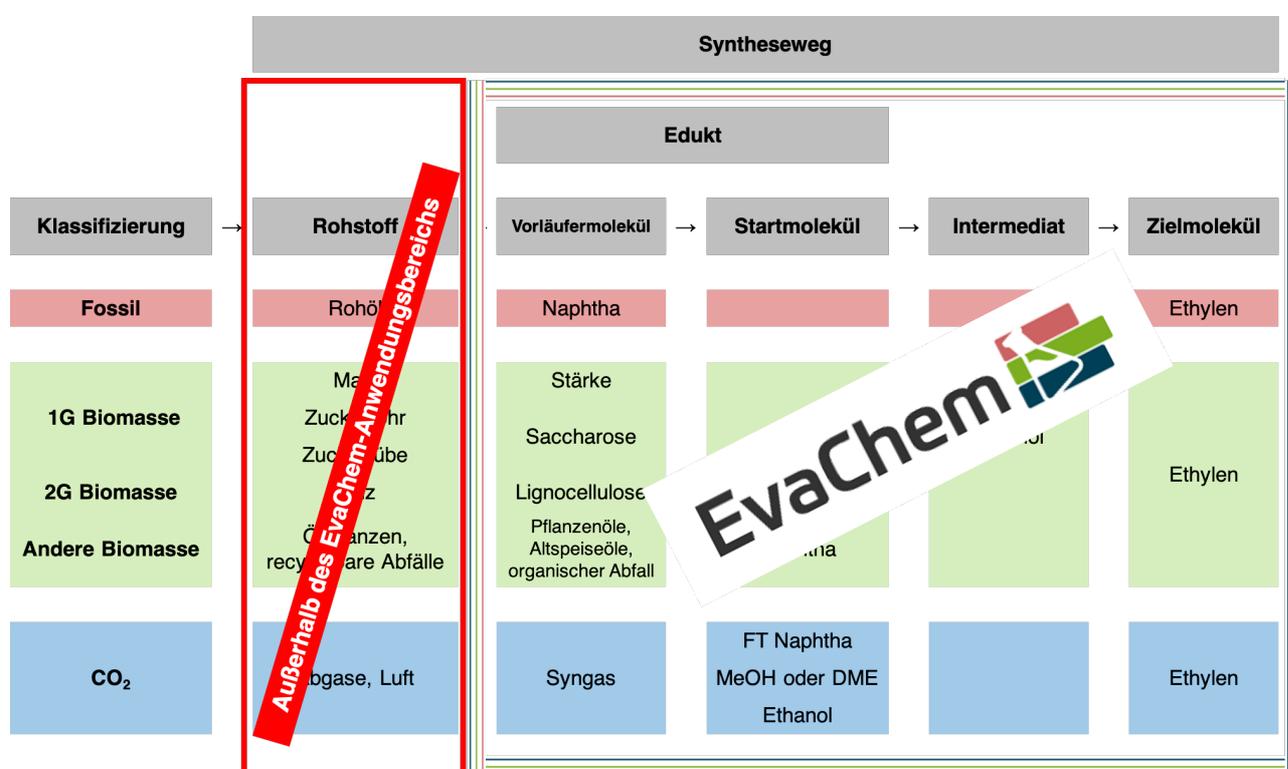
**Abbildung 21:** Anwendungsrelevante Systemgrenzen des Multikriterien-Systems am Beispiel von Ethylen

Durch die vorgenommene Differenzierung in Vorläufermolekül, Startmolekül und Intermediat ergibt sich ein Spielraum, der eine flexiblere Zuordnung der einzelnen prozessspezifischen Moleküle

erlaubt. Denn diese Flexibilität ermöglicht es dem Anwender selbst zu entscheiden, ob er die Berechnungen zur Prozessevaluation mit dem Vorläufermolekül (Erweiterte Systemgrenze) oder mit dem Startmolekül (Einfache Systemgrenze) beginnt, basierend auf der verfügbaren Datenlage oder Präferenz des Anwenders (Abbildung 21).

### Anwendungsbereich und bewertungsrelevante Fragestellungen und Systemgrenzen

Der Anwendungsbereich des Multikriterien-Systems EvaChem sowie bewertungsrelevante Fragestellungen und Systemgrenzen waren notwendigerweise und grundlegend klar zu erläutern, damit der Anwender weiß, welche Aussagen und Ergebnisse er von der Verwendung von EvaChem erwarten kann und welche Rohstoff-, Prozess- und Zielmolekül-spezifischen Fragestellungen beantwortet werden können.



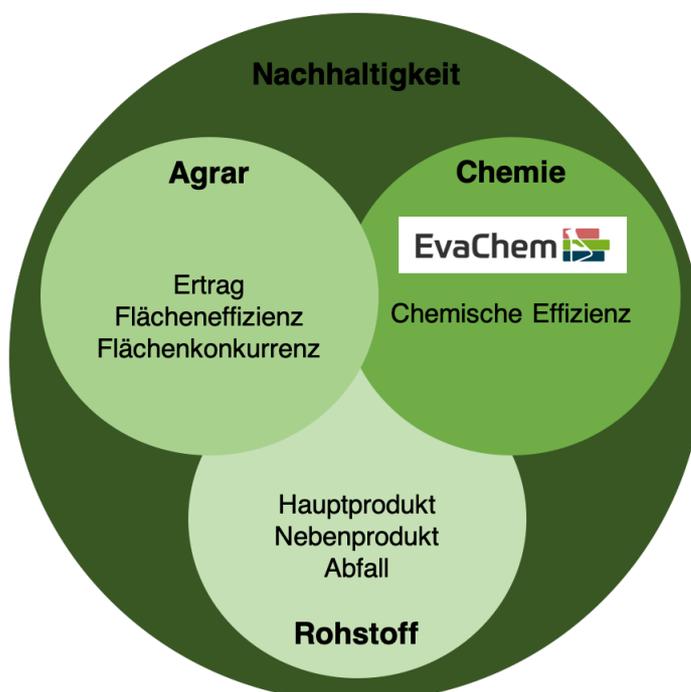
**Abbildung 22:** Bewertungsrelevante Systemgrenzen des Multikriterien-Systems am Beispiel von Ethylen

Das Multikriterien-System ist so entwickelt worden, dass die Stöchiometrie- oder Prozessdaten-basierte Prozessevaluation entweder mit dem Vorläufer- oder Startmolekül beginnen kann, aber nicht mit dem eigentlichen Rohstoff, wie Rohöl, Mais, Holz, Abgase oder Luft. Die Einbeziehung des Rohstoffs in die Berechnung zum Beispiel durch die Verwendung einer Konversionsrate von Rohstoff zum Vorläufer- oder Startmolekül ist eine Möglichkeit (Kapitel 3.1.4.1 und 3.2). Allerdings würden in diesem Fall alle weiteren signifikanten Gesichtspunkte für eine ganzheitliche Rohstoffbetrachtung und -bewertung, die nicht chemischer Natur sind wie z.B. Ertrag, Flächeneffizienz und Flächenkonkurrenz, nicht berücksichtigt werden. Somit liegt der Einbezug des Rohstoffs bewusst außerhalb des EvaChem-Anwendungsbereichs (Abbildung 22).

Somit beschreibt EvaChem die chemische Effizienz vom rohstoffnahen „Vorläufermolekül“ bis zum Zielmolekül. **Chemische Effizienz** bedeutet hierbei die Effizienz der Umwandlung von Vorläufer- und/oder Startmolekül in das Zielmolekül unter Berücksichtigung der chemischen Struktur,

einschließlich deren Ähnlichkeit, Erhalt oder Änderung. Somit ist sie eine wichtige Größe für die Bewertung von Rohstoffen im Kontext eines Zielmoleküls.

Um die Frage nach dem „vorteilhaftesten“ Rohstoff beantworten zu können, müssen neben der chemischen Effizienz noch andere Dimensionen einbezogen werden, um eine adäquate Bewertung vornehmen zu können. Eine ganzheitlichere Betrachtung der nachhaltigen Rohstoffnutzung bedarf der Berücksichtigung weiterer Aspekte aus dem Rohstoff-, Agrar- und Nachhaltigkeitsbereich. Hierzu zählen beispielsweise insbesondere im Agrarbereich für die Bewertung von Biomasse, die Einstufung des Rohstoffs in Haupt-, Nebenprodukt oder Abfall, wie auch Erträge, Flächeneffizienz und Flächenkonkurrenz, sowie Energiebedarf, CO<sub>2</sub>-Fußabdruck.



**Abbildung 23:** Bewertungssysteme für die Rohstoffnutzung am Beispiel von Biomasse und die Bedeutung von EvaChem

Während EvaChem für die letzten zwei Parameter (Energiebedarf, CO<sub>2</sub>-Fußabdruck) zumindest Hinweise liefern kann, wie z.B. Energie- und Massedaten, überschreiten die anderen Größen klar die Systemgrenzen von EvaChem. Die Bewertung verschiedener Rohstoffe kann aber indirekt über die „Vorläufermoleküle“ erfolgen.

EvaChem erweitert die bisherigen Bewertungssysteme für Rohstoffe und darauf basierende Produkte und deren Synthesen um die – bedeutsame – Größe „chemische Effizienz“ (Abbildung 23).

Kleine und mittelständische Unternehmen (KMUs) und auch Wissenschaftler haben oft Schwierigkeiten, das Potenzial, das hinter ihrer Chemikalienproduktion in Bezug auf mögliche Kombinationen aus Rohstoff, Syntheseweg und Zielmolekül liegt, hinreichend zu evaluieren. Daraus ergeben zwei übergreifende Leitfragen: **Was sind die stoff- und prozessbezogen vorteilhaftesten Kombinationen? Wann sind Biomasse erster und zweiter Generation oder CO<sub>2</sub> am vorteilhaftesten, für welche Synthesewege und Zielmoleküle bleiben fossile Rohstoffe im Vorteil?**

Diese Leitfragen können vollständig, in Ansätzen oder tendenziell mit dem Multikriterien-System EvaChem beantwortet werden. Welche Detailfragen unter diese Leitfragen fallen und inwieweit diese mit EvaChem im Detail beantwortet werden können, sollten in einem separaten Projekt bearbeitet (Kapitel 8).

### **Was sind die stoff- und prozessbezogen vorteilhaftesten Kombinationen?**

Das entwickelte Multikriterien-System EvaChem beschreibt die chemische Effizienz vom rohstoffnahen „Vorläufermolekül“ bis zum Zielmolekül. Dadurch ist es möglich verschiedene Vorläufermoleküle von unterschiedlichen oder gleichen Rohstoffklassen miteinander zu vergleichen. Zum Beispiel Stärke und Saccharose aus erster Generation Biomasse miteinander oder mit Lignocellulose aus zweiter Generation Biomasse, sowie diese aus Biomasse entstehenden Vorläufermolekülen mit denen aus fossilen Rohstoffen oder CO<sub>2</sub> (Abbildung 20).

Auch ist es möglich die aus den Vorläufermolekülen hervorgehenden **Startmoleküle** miteinander zu vergleichen, wie zum Beispiele Glukose aus erster Generation Biomasse oder zweiter Generation Biomasse.

Ebenfalls können auf diese Weise unterschiedliche **Prozesswege** miteinander verglichen werden. Beim Vergleich unterschiedlicher Prozesswege ausgehend vom selben Edukt zum Zielmolekül sollten Daten zu den Prozessen vorhanden sein, um aussagekräftigere Ergebnisse zu erhalten.

### **Wann sind Biomasse erster und zweiter Generation oder CO<sub>2</sub> am vorteilhaftesten, für welche Synthesewege und Zielmoleküle bleiben fossile Rohstoffe im Vorteil?**

Die mit Hilfe des Multikriterien-Systems EvaChem beschriebene chemische Effizienz vom rohstoffnahen „Vorläufermolekül“ bis zum Zielprodukt ist eine wichtige Größe für die Bewertung von Biomasse im Kontext eines Zielproduktes.

Um die Frage nach der „vorteilhaftesten“ Biomasse zu beantworten, müssen neben der chemischen Effizienz noch ganz andere Dimensionen einbezogen werden, um eine adäquate Bewertung vornehmen zu können. Die Bewertung erster und zweiter Generation Biomasse kann mit EvaChem daher indirekt über die **Vorläufermoleküle** erfolgen.

### **3.2.3 Finalisierung des Multikriterien-System**

Die Anwendung des in Kapitel 3.2 dargestellten optimierten Multikriterien-Systems (Details in der Langfassung des Zwischenberichts zum Verbundprojekt EvaChem, Mai 2020, Kapitel 4.2.1 und 4.2.2) und die integrativ, parallel dazu durchgeführte Bewertung führte zur Umbenennung und Einführung der Bezeichnungen Vorläufermolekül, Startmolekül und Intermediat (Kapitel 3.2.2).

Bedingt durch diese Neubezeichnung wurden die in Kapitel 3.2 (Abbildung 17; Tabelle 5) vorgestellten Indikatoren und Metriken teilweise ebenfalls umbenannt und neu definiert. Hierzu zählen die *Chemical Feedstock Utilisation Efficiency* (cFUE) und die *Primary Feedstock Utilisation Efficiency* (pFUE), sowie die *Co-Reactant Independency*. Darüber hinaus wurde die Bewertung der Technologischen Reife angepasst und die Metrik des *Renewable Carbon Share* (RCS) integriert (Abbildung 24).

Die *Chemical Feedstock Utilisation Efficiency* (cFUE) und die *Primary Feedstock Utilisation Efficiency* (pFUE) wurden in **(Stoichiometric) Educt Utilisation Efficiency (sEUE/EUE)** umbenannt. Somit wird deutlich, dass für die Berechnung, Stöchiometrie- oder Prozessdaten-basiert, das Edukt, entweder Vorläufer- oder Startmolekül, herangezogen wurde. Eine weitere Unterscheidung in der Metrikbezeichnung ist in diesem Falle nicht zielführend, da wie oben

beschrieben eine prozessabhängige und spezifische flexible Zuordnung notwendig ist, um der Komplexität und Variabilität der verschiedenen Prozesswege gerecht zu werden.

Stöchiometrie-basiert		Prozessdaten-basiert	
Basis-Indikatoren und Metriken		Erweiterte Metriken	
Masse-bezogene Metriken		Masse-bezogene Metriken	
Atomökonomie (AE)		Reaction Mass Efficiency (RME)	
Stoichiometric Educt Utilisation Efficiency (sEUE)		Educt Utilisation Efficiency (EUE)	
Stoichiometric Educt Utilisation Sufficiency (sEUS)		-	
Renewable Carbon Share (RCS)		-	
Energie-bezogene Metriken		Energie-bezogene Metriken	
Reaktionsenthalpie ( $H_R$ )		Prozessenergie (E)	

Andere	Andere Metriken und Indikatoren
	Änderung der chemischen Komplexität ( $\Delta C$ )
	Verwertbare Coprodukte (CP)
	Technologische Reife (TRL range)

**Abbildung 24:** Übersicht Metriken und Indikatoren des finalen Multikriterien-Systems

Für eine einheitlichere und eindeutiger Bezeichnung wurde die *Co-Reactant Independency* in **Stoichiometric Educt Utilisation Sufficiency (sEUS)** umbenannt. Während der Anwendung und Bewertung des Multikriterien-Systems an den Beispielmolekülen Ethylen und Monoethylenglykol (MEG) (Kapitel 3) wurde deutlich, dass eine Bewertung der **Technologischen Reife (TRL)** der verschiedenen Prozesse nur transparent und unmissverständlich erfolgen kann, wenn eine Bandbreite (*range*) angegeben wird, welche die TRLs aller einzelnen Prozessschritte widerspiegelt. Dies ist notwendig, da in einigen Fällen einzelne Prozessschritte sehr unterschiedliche TRLs aufweisen, sodass für den Gesamtprozess eine subjektive Abschätzung des TRLs vorgenommen werden müsste. Ein Beispiel hierfür sind Prozesse, die auf  $CO_2$  als Rohstoff basieren. Während die Produktion von Synthesegas (Syngas) und Fischer-Tropsch-Prozesse basierend auf Kohlegas oder Erdgas als Rohstoff seit mehr als einem Jahrhundert etabliert und optimiert wurden und daher ein Technologische Reife von 9 aufweisen, ist die Integration dieser Prozesse in einen Gesamtprozess zur  $CO_2$ -Nutzung noch nicht in diesem Ausmaß etabliert und optimiert, weshalb hier von einem TRL von 6-8 auszugehen ist.

Das in EvaChem entwickelte Multikriterien-System vergleicht verschiedene Prozesse für bestimmte Zielmoleküle basierend auf verschiedenen Rohstoffen: Fossile Rohstoffe, Biomasse und  $CO_2$ , wobei die letzteren beiden, neben Recycling, Quellen von sogenanntem erneuerbarem Kohlenstoff, *renewable carbon*, sind (Carus et al. 2020). Um die Nutzung und den Anteil des erneuerbaren Kohlenstoffs für die Substitution von fossilem Kohlenstoff in das Multikriterien-System mit einzubeziehen, wurde der **Renewable Carbon Share (RCS)** als zusätzliche Metrik in das System aufgenommen.

Tabelle 7 zeigt die im finalen Multikriterien-System enthaltenen Indikatoren und Metriken, ihre Definition sowie deren Vor- und Nachteile.

**Tabelle 7:** Definitionen und Vor- und Nachteile des finalen Multikriterien-Systems.

Grün: Stöchiometrie-basierte Basis-Indikatoren und Metriken; Rot: Prozessdaten-basierte Erweiterte Metriken; Blau: Andere Metriken und Indikatoren.

Indikator/Metrik	Beschreibung/Formel	Vorteile	Nachteile
<b>Masse-bezogene Metriken</b>			
<b>Atomökonomie (AE)</b>	Gibt an, wie groß der Anteil aller Reaktionspartner am Zielmolekül ist.  Masse der Produkte / Masse aller Reaktionspartner	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Bezieht nicht nur den Vorläufermolekül/Startmolekül mit ein, sondern auch die Reaktionspartner.</li> <li>• Gibt Auskunft über die Bildung von Nebenprodukten.</li> </ul>	
<b>Reaction Mass Efficiency (RME)</b>		Ermöglicht es verschiedene Prozesse miteinander zu vergleichen.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Daten/Informationen für diese Berechnung sind oft nicht zugänglich oder nicht vorhanden.</li> </ul>
<b>Stoichiometric Educt Utilisation Efficiency (sEUE)</b>	Wie viel des Vorläufermolekül/Startmolekül gelangt ins Zielmolekül?	Berechnet, wie viel vom Vorläufermolekül/Startmolekül ins Zielmolekül gelangt.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Gibt keine Auskunft über die eventuelle Nutzung und Menge von anderen Reaktionspartnern.</li> <li>• Keine Auskunft über Nebenprodukte.</li> <li>• Hier ist es absolut notwendig, ab zwei oder mehr Reaktionsschritten nochmals die Stöchiometrie aller Prozessschritte mit einzubeziehen.</li> </ul>
<b>Educt Utilisation Efficiency (EUE)</b>			
<b>Stoichiometric Educt Utilisation Sufficiency (sEUS)</b>	Ist der Prozess unabhängig von anderen Reaktionspartnern?	Gibt direkte Auskunft darüber, wie viel des Produkts aus dem Vorläufermolekül/Startmolekül besteht und somit indirekt Auskunft über den Anteil von Co-Reaktionspartnern im Zielmolekül.	Gibt keine Auskunft über die Bildung von Nebenprodukten.

<b>Renewable Carbon Share (RCS)</b>	<p><i>Renewable Carbon</i> (erneuerbarer Kohlenstoff) umfasst alle Kohlenstoffquellen, die die Verwendung von zusätzlichem fossilen Kohlenstoff aus der Geosphäre vermeiden oder ersetzen. Erneuerbarer Kohlenstoff kann aus der Biosphäre, Atmosphäre oder Technosphäre stammen – aber nicht aus der Geosphäre. Somit ergeben sich genau drei alternative Kohlenstoffquellen: Biomasse, die direkte Nutzung von CO<sub>2</sub> sowie Recycling.</p>	Gibt direkte Auskunft darüber wieviel erneuerbarer Kohlenstoff aus dem Vorläufermolekül/Startmolekül im Zielmolekül enthalten ist.	
<b>Energie-bezogene Metriken</b>			
<b>Reaktionsenthalpie (H<sub>R</sub>)</b>	Wird aus der theoretischen Standardenthalpie berechnet.	Ermöglicht den Vergleich verschiedener Prozesse, wenn die unterschiedlichen Enthalpien der verschiedenen prozess-spezifischen Intermediate miteinbezogen und verglichen werden.	
<b>Prozessenergie (E)</b>	Im Prozess benötigte Energie pro produziertem kg Produkt (MJ/kg Produkt).	Ermöglicht die Unterscheidung zwischen verschiedenen Prozessen mit demselben Vorläufermolekül/Startmolekül und Zielmolekül.	Daten/Informationen für diese Berechnung sind oft nicht zugänglich oder nicht vorhanden.
<b>Andere Metriken und Indikatoren</b>			
<b>Änderung der chemischen Komplexität (ΔC)</b>	Kumulierte Änderung der Komplexität von Vorläufermolekül/Startmolekül, Zwischenmolekülen	<ul style="list-style-type: none"> <li>Ermöglicht einen einfachen Vergleich zwischen Vorläufermolekül/Startmolekül und Zielmolekül.</li> </ul>	

	und Zielmolekül über den gesamten Herstellungsprozess ( <a href="https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov">https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov</a> ).	<ul style="list-style-type: none"> <li>Gibt indirekt Auskunft über benötigte Reaktionspartner und Nebenprodukte.</li> </ul>	
<b>Verwertbare Coprodukte (CP)</b>	Gibt an, ob verwendbare Coprodukte oder Nebenprodukte entstehen	Gibt Auskunft darüber, ob der Prozess zielgerichtet auf ein Molekül oder auf mehrere gewünschte Moleküle gerichtet ist.	<ul style="list-style-type: none"> <li>Keine geeignete direkte oder indirekte Metrik vorhanden, hier wird nur eine Ja/Nein Aussage benötigt.</li> <li>Betrachtung ist abhängig von der gewünschten Aussage des Anwenders.</li> </ul>
<b>Technologische Reife (TRL range)</b>	Gibt Auskunft über den Status des Gesamtprozesses unter Berücksichtigung der verschiedenen TRLs der Teilprozesse.	Ermöglicht einen schnellen Überblick, ob die Technologie bereits direkt einsetzbar ist oder noch weitere Entwicklung benötigt.	Einordnung von Prozessen oft subjektiv und teilweise schwierig.

Das finale Multikriterien-System, die Systemgrenzen sowie die anwendungs- und bewertungsrelevanten Fragestellungen und Systemgrenzen wurden in einem zweiten EvaChem Stakeholder-Workshop vorgestellt und auf Verständlichkeit geprüft. Was die anwendungs- und bewertungsrelevanten Fragestellungen und Systemgrenzen anbelangt, sind die Unterschiede sowie die Vor- und Nachteile der Berechnung mit und ohne Prozessdaten für die Stakeholder klar.

Ebenfalls wurden die Systemgrenzen und der damit verbundene Anwendungsbereich von EvaChem für die Stakeholder verständlich definiert. Somit ist davon auszugehen, dass die Anwender und Anwenderinnen (Stakeholder) den Fokus des EvaChem-Multikriterien-Systems auf die chemische Effizienz verstehen und nachvollziehen können und den Mehrwert von EvaChem für eine ganzheitliche Bewertung der Rohstoffnutzung erkennen (Kapitel 5.2).

## 4 Anwendung des Multikriterien-Systems – Teilvorhaben 2

Das erstellte Multikriterien-System (Kapitel 3) wurde zunächst auf zwei Chemikalien angewendet (Ethylen und Monoethylenglykol (MEG)), die aus fossilen Ressourcen, CO<sub>2</sub> und erster und zweiter Generation Biomasse hergestellt werden können, um die vorteilhafteste Route für die Produktion der jeweiligen Chemikalie zu ermitteln, aber umgekehrt auch, um die besten Zielprodukte für verschiedene Rohstoffe zu ermitteln. Zur iterativen Optimierung sowie der Bewertung des Multikriterien-Systems wurde dann noch eine weitere Chemikalie zur Bewertung herangezogen, Acrylsäure.

Ziel des Teilvorhabens war zunächst die Auswahl eines geeigneten Zielmoleküls bzw. geeigneter Prozessketten, um das in Teilvorhaben 1 entwickelte Multikriterien-System exemplarisch auf seine Aussagekraft hin zu prüfen und das Werkzeug mit den ausgewählten Prozessketten iterativ zu optimieren. Hierfür mussten zunächst das Zielmolekül bzw. die entsprechenden Prozessketten so ausgewählt werden, dass nach Möglichkeit ein Großteil der Stärken und Schwächen der jeweiligen Prozesse sowie die Herausforderungen ihrer Implementierung schon bekannt sind. Die Analyse dieser Syntheserouten über das entwickelte Multikriterien-System diente dann der Optimierung des Multikriterien-Systems sowie der Überprüfung des Systems hinsichtlich seiner Richtigkeit, Zuverlässigkeit und Robustheit (Kapitel 3.1.4).

Das Multikriterien-System wurde so weiterentwickelt, dass es auf andere etablierte, aber auch weniger etablierte bzw. neue Prozessketten angewendet werden kann.

### 4.1 Anwendung der finalen Kriterien, Metriken und Indikatoren auf Beispiele

Nach der finalen Erweiterung und Umbenennung der Indikatoren und Metriken des Multikriterien-Systems (Kapitel 3.2.3) wurden die Indikatoren und Metriken noch einmal abschließend auf die Moleküle Ethylen, Monoethylenglykol (MEG) und Acrylsäure angewendet (Kapitel 4.1.1 bis 4.1.3). Wie in Kapitel 3.2 beschrieben ist das Multikriterien-System so entwickelt worden, dass die Berechnungen zur Prozessevaluation sowohl stöchiometrisch als auch Prozessdaten-basiert vorgenommen werden können. Während die Basis-Indikatoren und -Metriken auf Stöchiometrie basieren und diese Informationen für jeden Prozess verfügbar sind und somit immer bestimmt oder berechnet werden können, basieren die Erweiterten Metriken auf Prozessdaten. Sie können nur verwendet werden, wenn die zur Berechnung notwendigen Daten verfügbar sind (siehe Abbildung 24 und Tabelle 7). Diese Daten sind aber nicht immer öffentlich zugänglich oder bekannt, ggf. sind aber beim Anwender spezifische Daten für seine Prozesse vorhanden. Die Verwendung der Erweiterten Metriken kann in der späteren Anwendung des Multikriterien-Systems daher dem jeweiligen Anwender überlassen werden und führt dann auf der einen Seite zu noch aussagekräftigeren Ergebnissen des Multikriterien-Systems, es kann aber auf der anderen Seite auch bislang stöchiometrisch erhobene Metriken ersetzen. Darüber hinaus ist es mit den Erweiterten Metriken möglich die stöchiometrisch erhaltenen Ergebnisse hinsichtlich ihrer Aussagekraft zu bewerten und gegebenenfalls Trends in der Abweichung vom theoretischen und tatsächlichen Wert zu erkennen.

Um das finale Multikriterien-System zur Berechnung der beschriebenen Indikatoren und Metriken anwenden zu können, werden unterschiedliche Informationen benötigt, welche in die Excel-Tabelle

des Systems eingegeben werden, bevor eine automatisierte Berechnung stattfindet. Welche dieser sogenannten Input-Daten für welchen Metrik/Indikator benötigt werden, ist in Tabelle 8 zusammengefasst. Die in der Excel-Tabelle verwendeten Formeln zur anschließenden Berechnung der Indikatoren und Metriken sind in Tabelle 9 zusammengefasst und graphisch dargestellt.

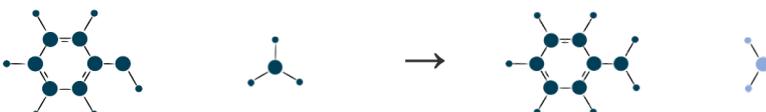
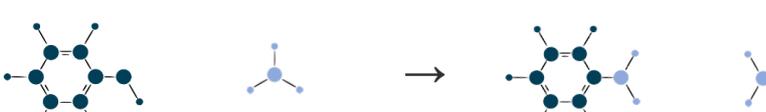
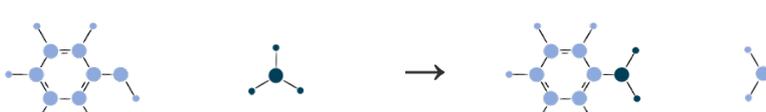
**Tabelle 8:** Übersicht über benötigte Input-Daten zur Berechnung der Indikatoren und Metriken im finalen Multikriterien-System.

Grün: Stöchiometrie-basierte Basis-Indikatoren und Metriken; Rot: Prozessdaten-basierte Erweiterte Metriken; Blau: Andere Metriken und Indikatoren.

Indikator/Metrik	Benötigte Input-Daten
<b>Masse-bezogene Metriken</b>	
<b>Atomökonomie (AE)</b>	Stöchiometrische Bilanz der Reaktion und Molekulargewicht aller Edukte, Produkte und Reaktanden.
<b>Reaction Mass Efficiency (RME)</b>	AE und Masse aller Edukte, Produkte und Reaktanden oder Prozessausbeute(n).
<b>Stoichiometric Educt Utilisation Efficiency (sEUE)</b>	Stöchiometrische Bilanz der Reaktion und Anteil der Atome im Produkt die aus dem Vorläufer- oder Startmolekül stammen.
<b>Educt Utilisation Efficiency (EUE)</b>	sEUS und Produktausbeuten(n).
<b>Stoichiometric Educt Utilisation Sufficiency (sEUS)</b>	Stöchiometrische Bilanz der Reaktion und Anteil der Atome im Produkt die aus dem Vorläufer- oder Startmolekül stammen.
<b>Renewable Carbon Share (RCS)</b>	Anteil an Kohlenstoff im Produkt der aus einem erneuerbaren Vorläufer oder Startmolekül stammt.
<b>Energie-bezogene Metriken</b>	
<b>Reaktionsenthalpie (<math>H_R</math>)</b>	Stöchiometrische Bilanz der Reaktion und Standardbildungsenthalpie aller Reaktanden und Produkte.
<b>Prozessenergie (E)</b>	Gemessener Energiebedarf des Prozesses / der Prozesse.
<b>Andere Metriken und Indikatoren</b>	
<b>Änderung der chemischen Komplexität (<math>\Delta C</math>)</b>	Stöchiometrische Bilanz der Reaktion und Komplexität aller Reaktanden, Intermediate und Produkte.
<b>Verwertbare Coprodukte (CP)</b>	Kann mit Ja oder Nein angegeben werden.
<b>Technologische Reife (TRL range)</b>	Kann für Gesamtprozess, ggf. als Range, der alle Teilprozesse abdeckt, angegeben werden.

**Tabelle 9:** Formeln zur Berechnung und beispielhafte graphische Darstellung der verwendeten Indikatoren und Metriken.

Die gezeigten Strukturen dienen der Veranschaulichung einiger Metriken und deuten an, welche Anteile des Edukts bzw. der Edukte in das Produkt bzw. Coprodukte umgewandelt werden.

Indikator/Metrik	Formel
Atomökonomie (AE) (%)	$AE = \frac{m_{\text{Zielprodukt(e)}}}{\sum m_{\text{Reaktanden}}} * 100$
Reaction Mass Efficiency (RME) (%)	$RME = \frac{m_{\text{Zielprodukt(e)}}}{\sum m_{\text{Reaktanden}}} * 100 * \text{Gesamtausbeute}$ oder $RME = \frac{m_{\text{Zielprodukt(e) im Prozess}}}{\sum m_{\text{Reaktanden im Prozess}}} * 100$
	
Stoichiometric Educt Utilisation Efficiency (sEUE) (%)	$sEUE = \frac{m_{\text{Atome im Produkt die vom Edukt stammen}}}{m_{\text{Edukt}}} * 100$
Educt Utilisation Efficiency (EUE) (%)	$EUE = \frac{m_{\text{Atome im Produkt die vom Edukt stammen}}}{m_{\text{Edukt}}} * 100 * \text{Gesamtausbeute der Prozesse}$
	
Stoichiometric Educt Utilisation Sufficiency (sEUS) (%)	$sEUS = \frac{m_{\text{Atome im Produkt die vom Edukt stammen}}}{m_{\text{Produkt}}} * 100$
	
Renewable Carbon Share (RCS) (%)	$RCS = \frac{m_{\text{Anzahl an C-Atome aus erneuerbaren Kohlenstoffquellen im Produkt aus allen Edukten}}}{m_{\text{Gesamtzahl aller C-Atome im Produkt}}} * 100$
Reaktionsenthalpie $H_R$ (MJ/kg Produkt)	$\Delta H_R = \frac{\sum \text{stöchiometrischer Koeffizient} * H_{f, \text{Produkt(e)}}^0 - \sum \text{stöchiometrischer Koeffizient} * H_{f, \text{Edukt(e)}}^0}{m_{\text{Produkt(e)}}}$
Prozessenergie (E) (MJ/kg Produkt)	wird durch Prozessauswertungen bestimmt
Änderung der chemischen Komplexität ( $\Delta C$ )	$\Delta C = \sum \Delta C_{\text{Reaktionsschritt}}$
Technologische Reife (TRL range)	wird durch Prozessauswertungen bestimmt
Verwertbare Coprodukte (CP)	wird durch Prozessauswertungen bestimmt

Die mit Hilfe des Systems ermittelten Ergebnisse werden abschließend in einer Excel-Übersichtstabelle zusammengefasst, in welcher die errechneten bzw. eingegebenen Werte für alle Metriken/Indikatoren für die jeweilig gewählten Syntheseroute aufgeführt sind. Um die Interpretation der Ergebnisse zu erleichtern, wurde für die Darstellung ein Farbschema gewählt, welches die Ergebnisse entweder prozentual (alle Masse-bezogenen Metriken, siehe Abbildung 25) oder basierend auf den ermittelten Maximal- und Minimalwerten (Energie-bezogene Metriken und Änderung der chemischen Komplexität) in Grün (Minimalwert), Rot (Maximalwert) oder Gelb/Orange (Zwischenwerte) einfärbt. Für die Ergebnisdarstellung der Technologischen Reife und die Verwertbaren Coprodukte wurde kein Farbschema angewandt.



**Abbildung 25:** Farbschema nach errechnetem prozentualen Anteil zur Darstellung Masse-bezogener Metriken

Das finale Multikriterien-System wurde auf die drei schon beschriebenen (Kapitel 3.1.4.1) Beispielmoleküle Ethylen, Monoethylenglykol (MEG) und Acrylsäure angewandt.

#### 4.1.1 Ergebnisse des finalen Multikriterien-Systems für Ethylen

Das finale Multikriterien-System wurde zunächst für das Molekül Ethylen (nicht komplex) angewandt. Ethylen kann konventionell aus dem fossilen Rohstoff Erdöl über das Vorläufermolekül Naphtha hergestellt werden oder aus Biomasse oder CO<sub>2</sub> (Abbildung 26 und Prozessbeschreibung Kapitel 3.1.4.1). Wie in den Kapiteln 3.2.2 und 3.2.3 beschrieben, wurde das anfängliche Multikriterien-System überarbeitet und eine finale Systemdifferenzierung festgelegt. Das überarbeitete, finale Multikriterien-System wurde für die Berechnung von insgesamt sechs Ethylen-Syntheserouten verwendet, welche in Abbildung 26 dargestellt sind.

Die Ergebnisse der Berechnungen aller sechs Syntheserouten sind in Tabelle 10 zusammengefasst. Für die Berechnungen wurden die beschriebenen Input-Parameter (Kapitel 4.1; Tabelle 8) und für die Ergebnisdarstellung die beschriebenen Farbkodierungen und Abgrenzungsbereiche (Kapitel 4.1; Abbildung 25) verwendet.

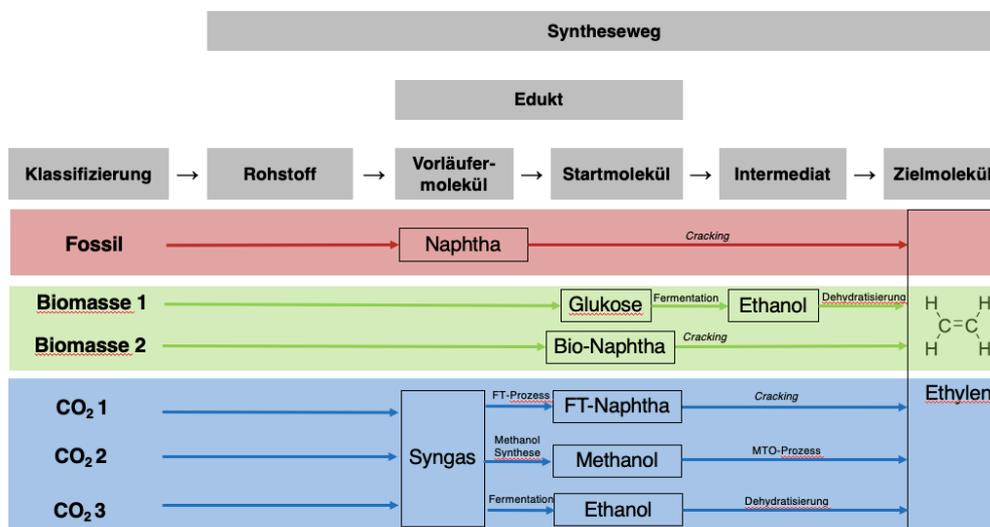


Abbildung 26: Übersicht der Prozessrouten für die Herstellung von Ethylen basierend auf der überarbeiteten, finalen Systemdifferenzierung

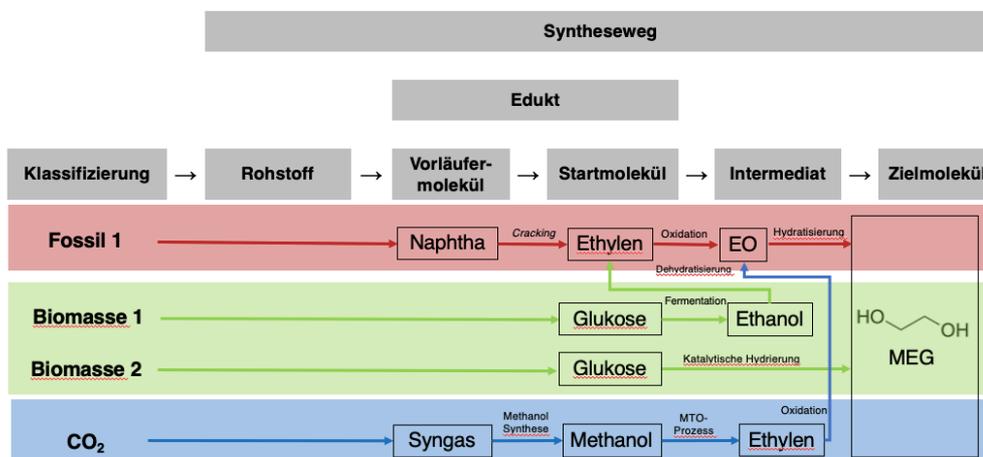
Tabelle 10: Ergebnisübersicht Ethylen

	Fossil	Biomasse 1	Biomasse 2	CO <sub>2</sub> 1	CO <sub>2</sub> 2	CO <sub>2</sub> 3
Masse-bezogene Metriken						
Atomökonomie (AE)	97,7	31,1	99,2	28,0	28,0	28,0
Reaction Mass Efficiency (RME)	80,1	18,0	43,4	Keine Daten verfügbar	8,5	Keine Daten verfügbar
Stoichiometric Educt Utilisation Efficiency (sEUE)	100,0	31,1	100,0	27,3	27,3	27,3
Educt Utilisation Efficiency (EUE)	82,0	18,0	43,7	Keine Daten verfügbar	8,3	Keine Daten verfügbar
Stoichiometric Educt Utilisation Sufficiency (sEUS)	100,0	100,0	100,0	85,7	85,7	85,7
Renewable Carbon Share (RCS)	0,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0
Energie-bezogene Metriken						
Reaktionsenthalpie (H <sub>R</sub> )	4,2	0,3	3,5	50,4	50,4	48,5
Prozessenergie (E) (MJ/kg Produkt)	40,0	10,7	40,0	Keine Daten verfügbar	9,6	Keine Daten verfügbar
Andere Metriken und Indikatoren						
Änderung der chemischen Komplexität (ΔC)	9,8	151,0	112,0	18,3	18,3	18,3
Verwertbare Coprodukte (CP)	Ja	Nein	Ja	Ja	Ja	Nein
Technologische Reife (TRL range)	9	9	9	9	3-9	3-9

Die Auswertung Masse-bezogener Metriken macht deutlich, dass die analysierten Biomasse- und CO<sub>2</sub>-basierte Routen nicht mit der fossil-basierten Route konkurrieren können. Dies kann vor allem auf die Nicht-Verwendung des Sauerstoffs aus den Rohstoffen (Biomasse und CO<sub>2</sub>) zurückgeführt werden. Bei der fossilen Route, sowie der zweiten Biomasse-Route ist dies nicht der Fall. Hier sind sowohl Edukt als auch Zielmolekül Kohlenwasserstoffe, so dass eine hohe Effizienz bei der Atomkonservierung erreicht werden kann, welche sich positiv auf die berechneten Metriken auswirkt. Da es sich bei allen betrachteten Biomasse-Routen um einfache Eliminierungs-Reaktionen handelt, beträgt die sEUS 100 %. Für die fossil-basierte Route ergibt sich ebenfalls eine sEUS von 100 %, da der betrachtete *Cracking*-Prozess eine hohe Atomökonomie aufweist. Die niedrigeren sEUS-Werte für CO<sub>2</sub>-basierte Routen kommen durch den zusätzlichen Bedarf einer externen Wasserstoff-Quelle zustande, welche im vorliegenden Beispiel durch die Elektrolyse von Wasser gedeckt wird. Da für die erste und dritte CO<sub>2</sub>-Route keine Prozessdaten, wie z.B. Ausbeuten, verfügbar waren, konnten weniger Metriken berechnet werden. Wie zu erwarten, geht die Umwandlung hochkomplexer bio-basierter Moleküle in einfache Olefine mit hohen Änderungen der chemischen Komplexität einher, welche zu einer negativen Bewertung des Indikators führt. Auf der anderen Seite wird der Kohlenstoff aus allen Rohstoffen in den Produkten konserviert und daher für die Biomasse- und CO<sub>2</sub>-basierten Routen (erneuerbare Kohlenstoffquellen) zu 100 % erhalten. Weiterhin ist der Prozessenergiebedarf für CO<sub>2</sub>-Routen stark abhängig von der Wasserstoff- und Energiequelle für den Reduktionsprozess. Es muss beachtet werden, dass in dieser Auswertung Wasserstoff aus der Elektrolyse von Wasser berücksichtigt wurde. Die berechnete Änderung der chemischen Komplexität ist für alle CO<sub>2</sub>-Routen identisch, was trotz unterschiedlicher Komplexitäten von Zwischenprodukten auf eine konstante Reduktion der Komplexität zurückgeführt werden kann. Da sich die betrachteten CO<sub>2</sub>-Routen 2 und 3 noch in einem frühen Entwicklungsstadium befinden und noch nicht großtechnisch in einen Gesamtprozess integriert wurden, wurde ein sehr breiter TRL *range* für die Routen angenommen, d.h. die einzelnen Schritte sind entwickelt, aber kommerzielle Wertschöpfungsketten für CO<sub>2</sub>-zu-Ethylen sind noch nicht etabliert. Zusammenfassend zeigen die Ergebnisse für Ethylen, dass Biomasse und CO<sub>2</sub>-Einsatzstoffe bei der Umwandlung in *drop-in*-Olefine wie Ethylen in ihrer chemischen Effizienz nicht mit fossilen Einsatzstoffen konkurrieren können. Die zweite Biomasse-Route über bio-basiertes Naphtha als Startmolekül stellt jedoch eine interessante erneuerbare Alternative zu der konventionellen, fossilen Produktionsroute dar.

#### 4.1.2 Ergebnisse des finalen Multikriterien-Systems für Monoethylenglykol (MEG)

Ebenfalls wurde das finale Multikriterien-System für die Bewertung eines Moleküls mit geringer Komplexität, dem Monoethylenglykol (MEG), angewendet. Konventionell wird für die Herstellung von MEG Erdöl als fossiler Rohstoff verwendet um zunächst Ethylen als Intermediat herzustellen, welches in einem weiteren Schritt zu Ethylenoxid oxidiert und anschließend zu MEG hydratisiert wird (Abbildung 27 und Prozessbeschreibung Kapitel 3.1.4.1). Wie in den Kapiteln 3.2.2 und 3.2.3 beschrieben, wurde das anfängliche Multikriterien-System überarbeitet und eine finale Systemdifferenzierung festgelegt. Das überarbeitete, finale Multikriterien-System wurde für die Berechnung von insgesamt vier MEG-Syntheserouten verwendet, welche in Abbildung 27 dargestellt sind.



**Abbildung 27:** Übersicht der Prozessrouten für die Herstellung von Monoethylenglykol basierend auf der überarbeiteten, finalen Systemdifferenzierung.  
EO: Ethylenoxid, MEG: Monoethylenglykol.

**Tabelle 11:** Ergebnisübersicht Monoethylenglykol (MEG)

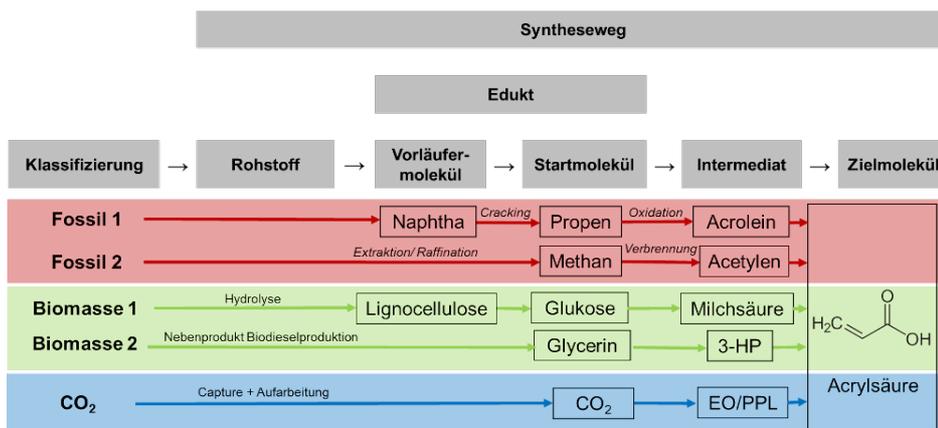
	Fossil	Biomasse 1	Biomasse 2	CO <sub>2</sub>
Masse-bezogene Metriken				
Atomökonomie (AE)	100,0	58,5	100,0	53,4
Reaction Mass Efficiency (RME)	100,0	38,3	Keine Daten verfügbar	16,4
Stoichiometric Educt Utilisation Efficiency (sEUE)	100,0	33,3	100,0	27,3
Educt Utilisation Efficiency (EUE)	100,0	21,8	Keine Daten verfügbar	8,4
Stoichiometric Educt Utilisation Sufficiency (sEUS)	45,2	48,4	96,8	38,7
Renewable Carbon Share (RCS)	0,0	100,0	100,0	100,0
Energie-bezogene Metriken				
Reaktionsenthalpie (H <sub>r</sub> )	0,0	-3,5	4,0	19,1
Prozessenergie (E) (MJ/kg Produkt)	16,7	15,4	Keine Daten verfügbar	44,3
Andere Metriken und Indikatoren				
Änderung der chemischen Komplexität (ΔC)	26,6	167,3	145,0	34,6
Verwertbare Coprodukte (CP)	Ja	Nein	Nein	Nein
Technologische Reife (TRL range)	9	9	9	3-9

Die Ergebnisse der Berechnungen aller vier Syntheserouten sind in Tabelle 11 zusammengefasst. Für die Berechnungen wurden die beschriebenen Input-Parameter (Kapitel 4.1; Tabelle 8) und für die Ergebnisdarstellung die beschriebenen Farbkodierungen und Abgrenzungsbereiche (Kapitel 4.1; Abbildung 25) verwendet.

Die Ergebnisse zeigen, dass nach der konventionellen, fossil-basierten Route, die zweite Biomasse-Route am besten in der Gesamtbewertung abschneidet. Dies kann unter anderem darauf zurückgeführt werden, dass in der ersten Biomasse-Route und der CO<sub>2</sub>-Route kein Sauerstoff konserviert wird (via Dehydrierungszwischenschritte). Darüber hinaus profitiert die zweite Biomasse Route von einer direkten Umwandlung (Hydrierung) von Glukose in MEG und somit einer vollständigen Biomassenutzung, während in der ersten Biomasse-Route ein weiterer Zwischenschritt über Ethanol berücksichtigt wurde. Darüber hinaus konnten für die fossil-basierte und für beide bio-basierte Prozessrouten relativ hohe Gesamt-Produktausbeuten ermittelt werden. Daher haben die errechneten Stöchiometrie-basierten Metriken Atomökonomie und sEUE eine ähnliche Tendenz wie die korrespondierenden Prozess-basierten Metriken RME und EUE. Die CO<sub>2</sub>-Route hingegen schnitt aufgrund der schlechten Sauerstoffkonservierung, der Notwendigkeit einer externen Wasserstoff-Quelle und der hohen Energieintensität, die mit der Reduktion verbunden ist, schlechter ab. In diesem Fall sind somit stöchiometrische Daten ausreichend, um aussagekräftige Ergebnisse zu erhalten. Vergleicht man die Ergebnisse für Reaktionsenthalpie und Prozessenergie, wird deutlich, dass im Falle von MEG eine alleinige Berechnung der Reaktionsenthalpie nicht ausreichend wäre, um die einzelnen Routen aussagekräftig zu bewerten. Eine erste Tendenz, welche Route energetisch vorteilhafter ist, kann jedoch abgelesen werden. Da für die zweite Biomasse-Route keine Prozessdaten, wie z. B. Ausbeuten, verfügbar waren, da sich der Prozess noch in der Entwicklung befindet, konnten weniger Metriken berechnet werden. Es ist allerdings davon auszugehen, dass die benötigte Prozessenergie der zweiten Biomasse-Route stark von der für die Hydrierung verwendeten Wasserstoff-Quelle abhängig ist. Da einzelne Teilprozessschritte bei der CO<sub>2</sub>-Route unterschiedlich weit in ihrer Entwicklung und Anwendung sind, konnte für die Technologische Reife nur ein Bereich von 3-9 angegeben werden. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass direkte (fossile oder Biomasse-Route 2) Pfade in der Bewertung gegenüber indirekten Routen (weniger Atomkonservierung und mehr Schritte, die mit einem höheren Energiebedarf verbunden sind) bevorzugt werden.

### 4.1.3 Ergebnisse des finalen Multikriterien-Systems für Acrylsäure

Abschließend wurde das Multikriterien-System für ein Molekül mittlerer Komplexität, der Acrylsäure, angewendet (Abbildung 28 und Prozessbeschreibung Kapitel 3.1.4.1). Acrylsäure wird konventionell aus fossilen Rohstoffen hergestellt. In den letzten Jahren hat die bio-basierte Herstellung von Acrylsäure allerdings stark an Aufmerksamkeit gewonnen. Darüber hinaus ist eine Herstellung auf der Basis von CO<sub>2</sub> denkbar. Wie in den Kapiteln 3.2.2 und 3.2.3 beschrieben, wurde das anfängliche Multikriterien-System überarbeitet und eine finale Systemdifferenzierung festgelegt. Das überarbeitete, finale Multikriterien-System wurde für die Berechnung von insgesamt fünf Syntheserouten der Acrylsäure verwendet, welche in Abbildung 28 dargestellt sind. Die Ergebnisse der Berechnungen aller fünf Syntheserouten sind in Tabelle 12 zusammengefasst. Für die Berechnungen wurden die beschriebenen Input-Parameter (Kapitel 4.1; Tabelle 8) und für die Ergebnisdarstellung die beschriebenen Farbkodierungen und Abgrenzungsbereiche (Kapitel 4.1; Abbildung 25) verwendet.



**Abbildung 28:** Übersicht der Prozessrouten für die Herstellung von Acrylsäure basierend auf der überarbeiteten, finalen Systemdifferenzierung.

3-HP: 3-Hydroxypropionsäure, EO: Ethylenoxid, PPL: Polypropiolacton.

**Tabelle 12:** Ergebnisübersicht Acrylsäure

	Fossil 1	Fossil 2	Biomasse 1	Biomasse 2	CO <sub>2</sub>
<b>Masse-bezogene Metriken</b>					
Atomökonomie (AE)	80,2	66,7	80,0	78,3	50,0
Reaction Mass Efficiency (RME)	68,2	53,5	58,9	66,5	keine Daten verfügbar
Stoichiometric Educt Utilisation Efficiency (sEUE)	93,0	87,5	80,0	78,3	63,6
Educt Utilisation Efficiency (EUE)	79,1	70,3	58,9	66,5	keine Daten verfügbar
Stoichiometric Educt Utilisation Sufficiency (sEUS)	55,6	38,9	100,0	100,0	77,8
Renewable Carbon Share (RCS)	0,0	0,0	100,0	100,0	0,0
<b>Energie-bezogene Metriken</b>					
Reaktionsenthalpie (H <sub>r</sub> )	-7,8	-3,7	-0,5	0,0	15,1
Prozessenergie (E) (MJ/kg Produkt)	keine Daten verfügbar				
<b>Andere Metriken und Indikatoren</b>					
Änderung der chemischen Komplexität (ΔC)	50,7	55,9	95,1	30,7	57,6
Verwertbare Coprodukte (CP)	Ja	Nein	Nein	Nein	Nein
Technologische Reife (TRL range)	9	9	3-9	3-5	2

Betrachtet man die Ergebnisse der Masse-bezogenen Metriken, erzielen die beiden fossilen sowie die beiden Biomasse-basierten Routen jeweils ähnliche Ergebnisse. Im Vergleich zu den Biomasse-

Routen, weisen beide fossilen Routen nur eine geringfügig höhere sEUE auf. Mit jeweils 100 % bei den Metriken sEUS und RCS heben sich die Biomasse-Routen allerdings deutlich von den beiden fossilen Produktionsrouten ab. Beide Biomasse-Routen profitieren hierbei von einer Konservierung des Sauerstoffs im Syntheseweg. Da bei der zweiten Biomasse-Route eine C3-Verbindung (Glycerin) in Acrylsäure (C3) umgewandelt wird, ist die Änderung der Komplexität geringer als in der ersten Biomasse-Route, wodurch die zweite Biomasse-Route insgesamt besser abschneidet als die erste Biomasse-Route. Da für beide fossil-basierte und für beide bio-basierte Prozessrouten Gesamt-Produktausbeuten von mindestens 80 % ermittelt werden konnten, haben die errechneten Stöchiometrie-basierten Metriken Atomökonomie und sEUE eine ähnliche Tendenz wie die korrespondierenden Prozess-basierten Metriken RME und EUE. In diesem Fall sind somit stöchiometrische Daten ausreichend, um aussagekräftige Ergebnisse zu erlangen. Da es sich im Gegensatz zu den fossil- und bio-basierten Produktionsrouten im Falle der CO<sub>2</sub>-Route um eine potenzielle Prozessroute handelt, welche noch in der Entwicklung ist (TRL 2), sind keine Prozessdaten, wie z.B. Ausbeuten, verfügbar und es konnten somit weniger Metriken berechnet werden. Für keine der beschriebenen Syntheserouten waren Angaben zur Prozessenergie verfügbar, was unter anderem auf das niedrige TRL-Level (Biomasse-Routen und CO<sub>2</sub>-Route) und auf Betriebsgeheimnisse (fossile Routen) zurückgeführt werden kann. Die Technologische Reife konnte für beide fossil-basierten Routen mit 9 angegeben werden. Da einzelne Teilprozessschritte bei den Biomasse-Routen unterschiedlich weit in ihrer Entwicklung und Anwendung sind konnten hier nur Bereiche von 3-9 (Biomasse 1) und 3-5 (Biomasse 2) angegeben werden. Zusammenfassend kann gesagt werden, dass bio-basierte Routen für die Produktion von Acrylsäure eine interessante Alternative zu konventionellen, fossil-basierten Produktionsrouten darstellen. Hierbei sind Routen mit wenigen Prozessschritten und einer hohen Atomökonomie (im Beispiel der Acrylsäure z.B. durch Konservierung des C3-Körpers) besonders attraktiv, wie am Beispiel der Umwandlung von Glycerin als Beiprodukt der Biodiesel-Produktion gezeigt (Biomasse Route 2). Um das Potential CO<sub>2</sub>-basierter Routen abschließend bewerten und mit anderen Routen vergleichen zu können, sind zusätzliche Daten aus Forschungs- und Entwicklung nötig.

#### 4.1.4 Schlussfolgerungen zur Anwendung des finalen Multikriterien-Systems

Das finale Multikriterien-System wurde auf drei Beispielmoleküle unterschiedlicher Komplexität (Ethylen, Monoethylenglykol, Acrylsäure) mit insgesamt 15 unterschiedlichen Prozessrouten angewendet und evaluiert. Basierend auf den oben beschriebenen Ergebnissen können folgende, allgemeine Schlussfolgerungen für das System getroffen werden:

Masse-bezogenen Metriken, welche nur auf der Basis von Stöchiometrie-Daten berechnet wurden, erlauben in den meisten Fällen bereits einen guten Einblick in die Effizienz der Prozesse und haben im vorliegenden System für Prozesse mit hohen Prozessausbeuten (meist hohes TRL) die gleiche Tendenz wie Masse-bezogene Metriken, die mit Hilfe von Prozessdaten berechnet wurden. Dies vereinfacht die Anwendung und Ergebnisbewertung des Systems, da für viele Prozesse keine ausreichende Datenbasis für exaktere Kalkulationen öffentlich verfügbar sind. Stöchiometrische Daten hingegen können für die meisten Prozesse ohne großen Aufwand erhoben werden. Hierbei gilt es die Systemgrenzen des finalen Multikriterien-Systems zu beachten, welche keine Prozesse zur Umwandlung von Rohstoffen zu Vorläufermolekülen berücksichtigen. Diese können, z.B. im Falle von biologischen Rohstoffen, einen großen Einfluss auf die Gesamtausbeute eines Prozesses haben

und somit die Vergleichbarkeit von Stöchiometrie-basierten Ergebnissen und Prozessdaten-basierten Ergebnissen beeinflussen.

Die Auswertung der Energie-bezogenen Metriken ergab, dass eine Berechnung der Reaktionsenthalpie oftmals nicht ausreichend ist, um unterschiedliche Routen aussagekräftig miteinander zu vergleichen. Allerdings kann sie für eine erste Abschätzung verschiedener Umwandlungswege (z.B. Fermentation vs. Thermische Prozesse) und verschiedener Moleküle herangezogen werden. Für einen fundierteren, energetischen Vergleich einzelner Prozessrouten, werden zusätzliche Prozessdaten zur Energieintensität benötigt. Die Verfügbarkeit solcher Daten stellt allerdings gerade bei proprietären Prozessen und Prozessen, die sich noch in der Entwicklung befinden, eine große Herausforderung dar. Modelliert man Hydrierungsprozesse ist zudem zu beachten, dass der Energiebedarf des Prozesses weitgehend von der verwendeten Wasserstoff-Quelle abhängig ist. Hierbei könnten in Zukunft verschiedene Szenarien betrachtet werden, um das mögliche Energiebedarfs-Spektrum eines Prozesses aufzuzeigen.

Die Bewertung zahlreicher nicht-konventioneller Produktionsrouten aus Biomasse oder CO<sub>2</sub> machte deutlich, dass es zwar eine Vielfalt neuer Entwicklungen gibt, oftmals allerdings nur einzelne Produktions-Teilschritte und keine vollständige Wertschöpfungsketten für spezifische Produkte im Detail beschrieben sind. Dies kann die Eingabe der gewünschten Input-Daten erschweren, da Annahmen zur Kopplung möglicher Teilprozesse sowie Mittelwerte für Energiebedarfe, TRLs, etc. getroffen werden müssen.

In den gewählten Beispielen schnitten fossile Produktionsrouten besser ab als alternative Produktionsrouten. Dies kann unter anderem auf die oben beschriebenen Herausforderungen bei der Datenbeschaffung und auf die Wahl der Produkte zurückgeführt werden. Alle gewählten Beispielprodukte werden konventionell auf Olefinbasis produziert und gelten als sogenannte *drop-in*-Chemikalien (Carus et al. 2017). In Zukunft könnten weitere Beispielmoleküle (z.B. *smart drop-ins* / *dedicated chemicals*) getestet und den vorliegenden Ergebnissen der *drop-in*-Chemikalien gegenübergestellt werden.

Abschließend kann gesagt werden, dass mit Hilfe des Multikriterien-Systems Hinweise auf attraktive, alternative erneuerbare Produktionspfade gegeben werden konnten, z.B. die Produktion von MEG aus direkter Glukose-Hydrogenolyse oder die Produktion von Acrylsäure aus Glycerin. Somit kann das System zu einer Vorauswahl, *Screening*, herangezogen werden um neue, vielversprechende Produktionsrouten zu identifizieren, welche dann in anschließenden Detailanalysen hinsichtlich wirtschaftlicher und ökologischer Aspekte charakterisiert werden können.

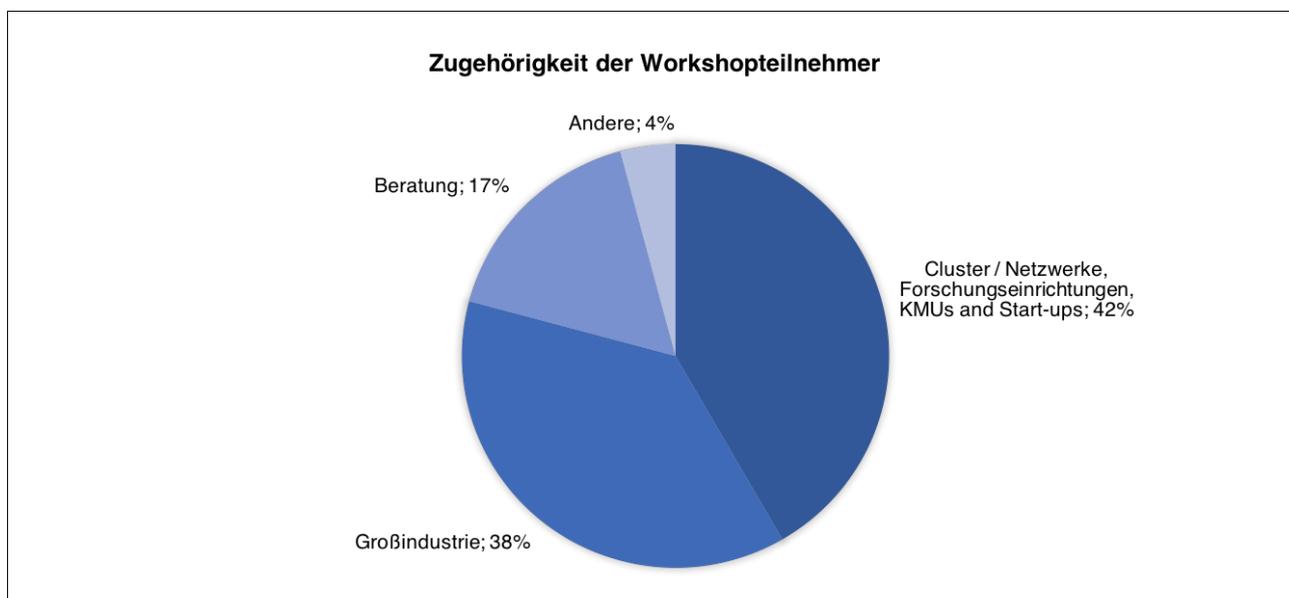
Die Rückmeldungen der Stakeholder zu dem finalen Multikriterien-System und der damit durchgeführten Berechnungen der Moleküle Ethylen, Monoethylenglykol (MEG) und Acrylsäure waren durchweg positiv, da alle relevanten Routen der drei Beispielmoleküle abgebildet wurden und somit ein guter Einblick in die Anwendung des Multikriterien-Systems erhalten werden konnte (Kapitel 5.2).

## 5 Ergebnisse der Stakeholder-Workshops

### 5.1 Ergebnisse des ersten Stakeholder-Workshops

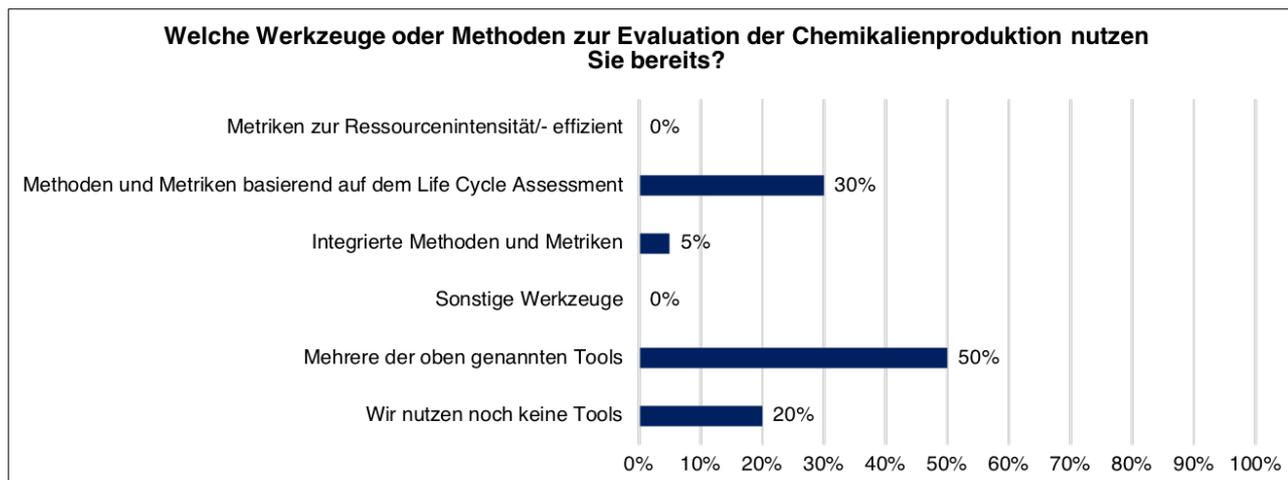
Der erste Stakeholder-Workshop zum Verbundprojekt EvaChem fand am 14. Mai 2020 aufgrund der COVID-19-Pandemie online statt.

Insgesamt haben 24 Vertreter aus verschiedenen Bereichen teilgenommen. Der Großteil der Teilnehmer (42 %) war aus dem Bereich der Cluster / Netzwerke, als Vertreter für die in ihrem Netzwerk enthaltenen kleinen und mittelständischen Unternehmen (KMUs) und Forschungseinrichtungen, sowie direkte Vertreter von KMUs, Forschungseinrichtungen und *Start-ups*. 38 % waren Vertreter aus der Großindustrie, 17 % der Teilnehmer sind in der Beratung tätig und 4 % waren Einzelpersonen, die nicht mehr aktiv einem der anderen Bereiche angehören (Abbildung 29).



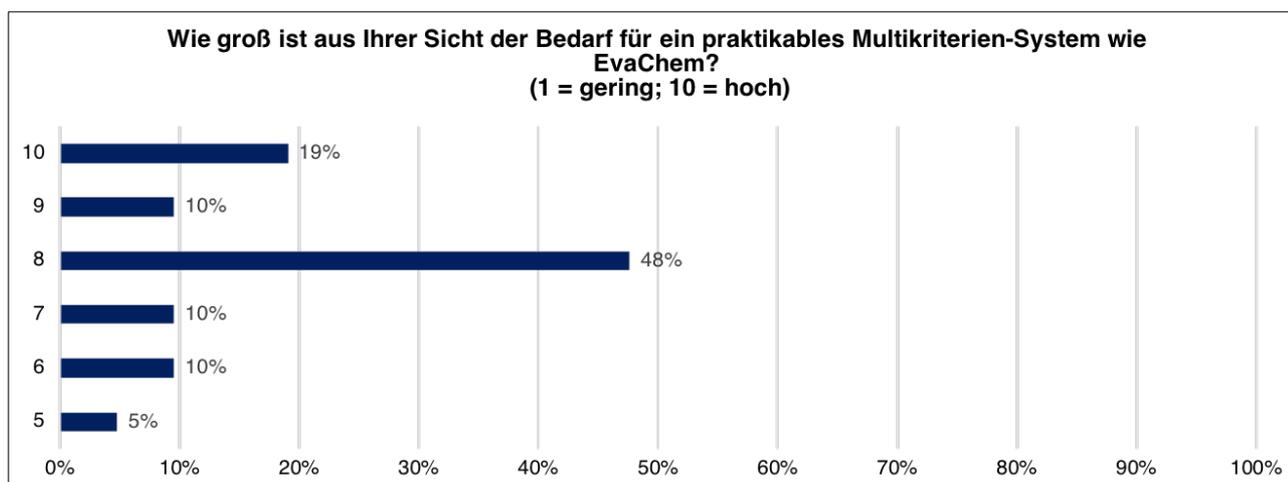
**Abbildung 29:** Zugehörigkeit der Workshopteilnehmer

Die in den vorherigen Kapiteln 3 und 3.1.4 ausführlich beschriebene Vorgehensweise und die Ergebnisse der Etablierung und Anwendung des Multikriterien-Systems wurden in einer komprimierten Form erläutert und zur Diskussion gestellt. Mit Hilfe verschiedener Umfragen und darauf aufbauender Diskussionen wurde *Feedback* zur Auswahl der im Multikriterien-System enthaltenen Kriterien, Indikatoren und Metriken sowie der Anwendung des Systems eingeholt. Somit war es möglich zu diesem frühen Zeitpunkt in der Entwicklung von EvaChem mögliche grundlegende Unzulänglichkeiten zu erkennen und zu beseitigen. Eine erste Umfrage zur derzeitigen Nutzung der vorhandenen *State-of-the-Art*-Methoden ergab, dass der Großteil der Teilnehmer entweder Methoden und Metriken basierend auf dem *Life Cycle Assessment* (30 %) oder mehrere, einfachere Methoden (50 %) verwendet, um die Chemikalienproduktion zu evaluieren (Abbildung 30). Dies zeigt, dass es momentan notwendig ist, entweder Methoden mit einem hohen Datenbedarf und zeitlichen Aufwand zu nutzen oder diese aufwändigen Methoden miteinander zu kombinieren um die vorteilhaftesten Prozesswege von Rohstoff zum Zielmolekül zu evaluieren.



**Abbildung 30:** Umfrage 1: Welche Werkzeuge oder Methoden zur Evaluation der Chemikalienproduktion nutzen Sie bereits?

Diese Annahme wurde durch das Ergebnis einer zweiten Umfrage bestätigt (Abbildung 31). Auf einer Skala von 1 (gering) bis 10 (hoch), halten 77 % den Bedarf für das in EvaChem zu entwickelnde Multikriterien-System für relativ hoch bis sehr hoch. Keiner der Teilnehmer war der Meinung das kein oder nur ein geringer Bedarf an einem solchen praktikablen Multikriterien-System besteht.



**Abbildung 31:** Umfrage 2: Wie groß ist aus Ihrer Sicht der Bedarf für ein praktikables Multikriterien-System wie EvaChem? (1 = gering; 10 = hoch)

Ebenfalls wird die in EvaChem vorgeschlagene Vereinfachung der Ergebnisse mit 53 % als aussagekräftig erachtet, 26 % sind der Meinung, dass wichtige Parameter fehlen (Abbildung 32).

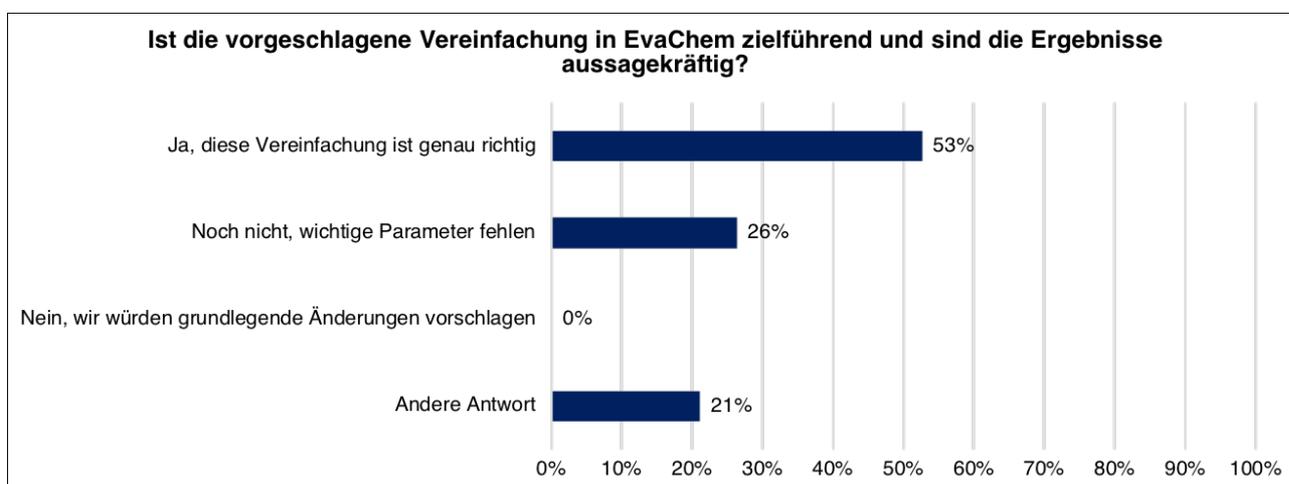
Unter diese wichtigen Parameter fallen laut den Teilnehmern ökologische und ökonomische Faktoren, die allerdings bewusst in diesem Multikriterien-System nicht betrachtet werden, da sie nicht der Zielsetzung entsprechen. Auch die gewählte transparente, tabellarische Darstellung mit einem farblichen Ampelsystem zur vereinfachten Auswertung der Ergebnisse hält die Mehrheit der Teilnehmer für gut und hilfreich (84 %) (Abbildung 33).

Wie in Kapitel 2.3 beschrieben lag der Fokus des EvaChem-Projekts auf der Entwicklung eines praktikablen Multikriterien-Systems für die Identifizierung der vorteilhaftesten stoff- und

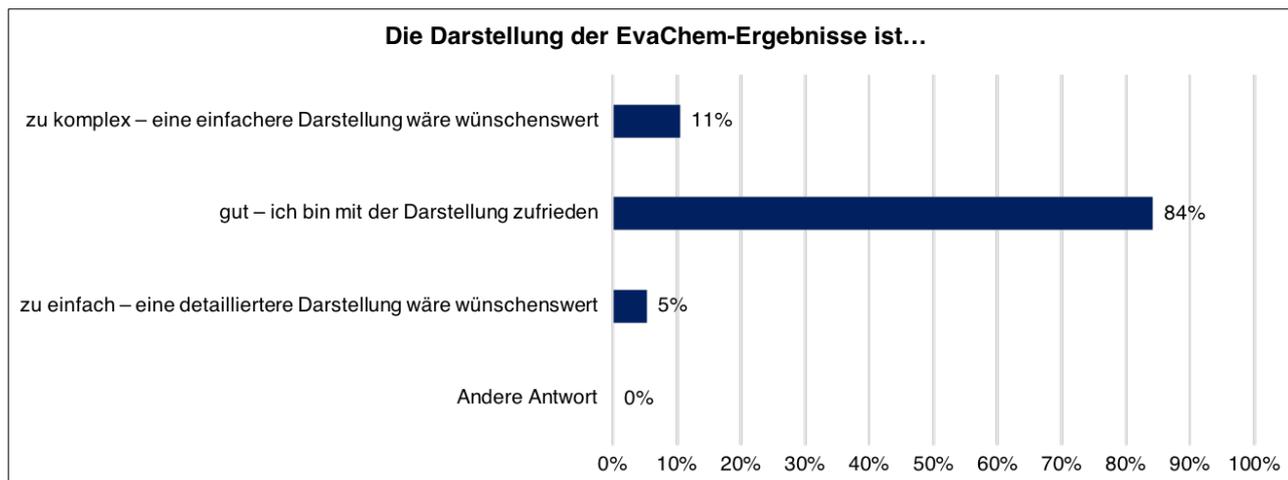
prozessbezogenen, aus chemischer Sicht vielversprechendsten Kombinationen aus Rohstoff, Syntheseweg und Zielmolekül. Nachhaltigkeits- und Wirtschaftsindikatoren mit hohem Datenbedarf liegen außerhalb des Untersuchungsrahmens und werden im entwickelten Multikriterien-System nicht betrachtet. Somit kann das Multikriterien-System als ein *Screening-Tool* zu Beginn des Innovationsprozesses genutzt werden, um eine Vorauswahl geeigneter Ressourcen und Prozesswege zu identifizieren, die ökologisch und ökonomisch potenziell vorteilhaft sind. 81 % der Teilnehmer halten die Ergebnisse des Multikriterien-Systems für ausreichend, um einzelne Routen aus einer Vielzahl von Prozesswegen zu selektieren und diese Auswahl anschließend im Detail mit komplexen *State-of-the-Art-Methoden* zu verifizieren (Abbildung 34).

Zusammenfassend ist zu sagen, dass die Resonanz der EvaChem-Stakeholder auf die Vorgehensweise im Projekt sowie des etablierten und angewendeten Multikriterien-System durchweg positiv war. Der Großteil der Stakeholder ist an diesem vereinfachten und praktikablen System zur Chemikalienproduktion interessiert und würde dieses für eine Vorauswahl verschiedener Prozesswege anwenden. Generell besteht von Seiten der Stakeholder der Wunsch das System noch auf weitere, komplexere Zielmoleküle anzuwenden und zu testen, wie z.B. aromatische oder Stickstoff-enhaltende Moleküle.

Zudem sind die Stakeholder an einem weiteren, regen Austausch bezüglich der Weiterentwicklung des Systems interessiert. Aufgrund dessen wurden die Stakeholder gefragt, ob sie bereit sind Prozessdaten nicht aktueller Forschungsprojekte und Herstellungsprozesse für EvaChem zur Verfügung zu stellen. Diese Daten könnten künftig genutzt werden, um die bis jetzt Stöchiometrie-basierten Aussagen mit Prozessdaten zu bestätigen und zu bekräftigen.



**Abbildung 32:** Umfrage 3: Ist die vorgeschlagene Vereinfachung in EvaChem zielführend und sind die Ergebnisse aussagekräftig?



**Abbildung 33:** Umfrage 4: Die Darstellung der EvaChem-Ergebnisse ist...



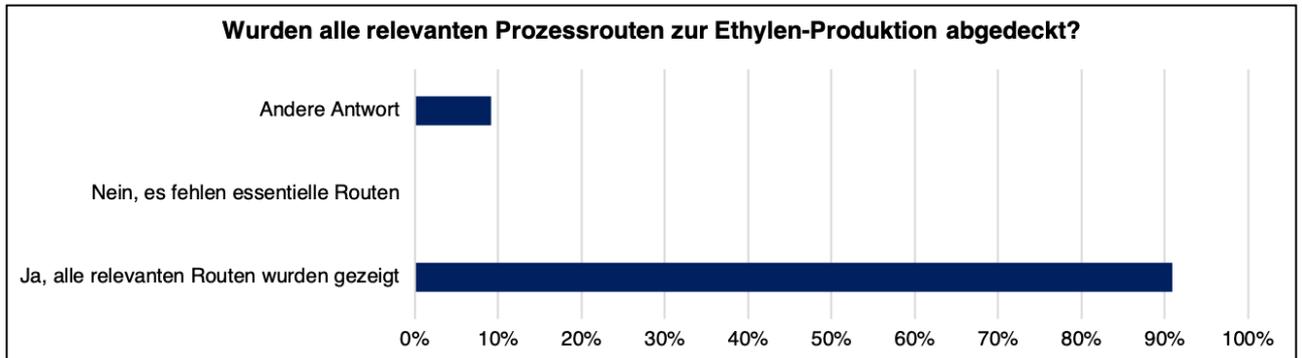
**Abbildung 34:** Umfrage 5: Sind diese Ergebnisse ausreichend um einzelne Routen zu selektieren und gezielt weiterzuverfolgen?

## 5.2 Ergebnisse des zweiten Stakeholder-Workshops

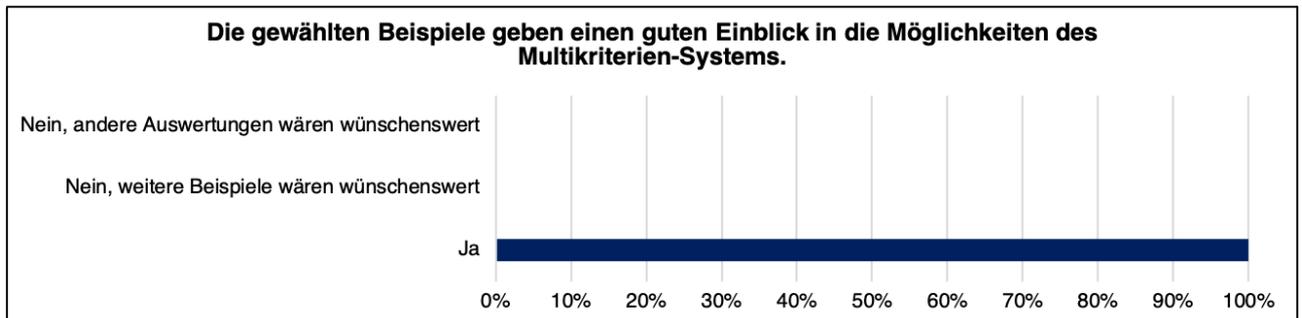
Wie der erste Stakeholder-Workshop zum Verbundprojekt EvaChem im Mai 2020, fand auch der zweite Stakeholder-Workshop aufgrund der COVID-19-Pandemie am 26. Oktober 2020 online statt. Die Zahl der Teilnehmenden war in diesem Workshop geringer als im ersten Workshop. Insgesamt haben 13 Vertreterinnen und Vertreter aus den Bereichen Cluster/Netzwerke, als Vertreter für die in ihrem Netzwerk enthaltenen kleinen und mittelständischen Unternehmen (KMUs) und Forschungseinrichtungen, sowie direkte Vertreter und Vertreterinnen von KMUs, Forschungseinrichtungen und *Start-ups* teilgenommen. Bei allen Teilnehmern handelte es sich um EvaChem-Stakeholder die schon am ersten Workshop teilgenommen haben.

Der Fokus dieses Workshops lag auf der Vorstellung und Diskussion des optimalen Multikriterien-Systems und dessen Anwendung (Kapitel 3.2), sowie auf dem Anwendungsbereich von EvaChem und dessen Systemgrenzen (Kapitel 3.2.2). Mit Hilfe verschiedener Umfragen und darauf

aufbauender Diskussionen wurde *Feedback* zum Multikriterien-System sowie dessen Anwendung eingeholt. Ebenfalls wurden die Verständlichkeit und Nachvollziehbarkeit der Systemgrenzen von EvaChem und der damit verbundene Anwendungsbereich geprüft.

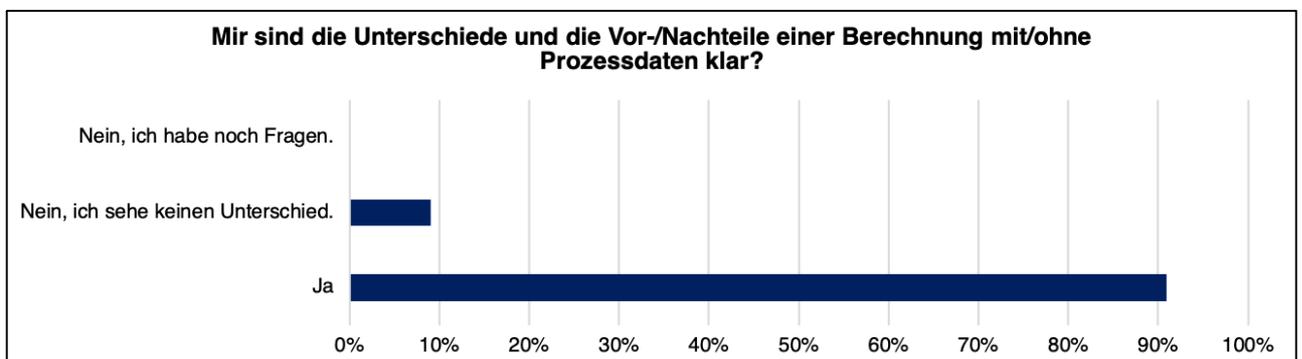


**Abbildung 35:** Umfrage 1: Wurden alle relevanten Prozessrouten zur Ethylen-Produktion abgedeckt?



**Abbildung 36:** Umfrage 2: Die gewählten Beispiele geben einen guten Einblick in die Möglichkeiten des Multikriterien-Systems.

Die ersten beiden Umfragen (Abbildung 35 und Abbildung 36) ergaben, dass alle relevanten Routen des Beispiels Ethylen abgebildet wurden (91 %) und durch die vorgestellten Beispiele Ethylen, Monoethylenglykol (MEG) und Acrylsäure ein guter Einblick in die Möglichkeiten des Multikriterien-Systems erhalten werden konnte (100 %).



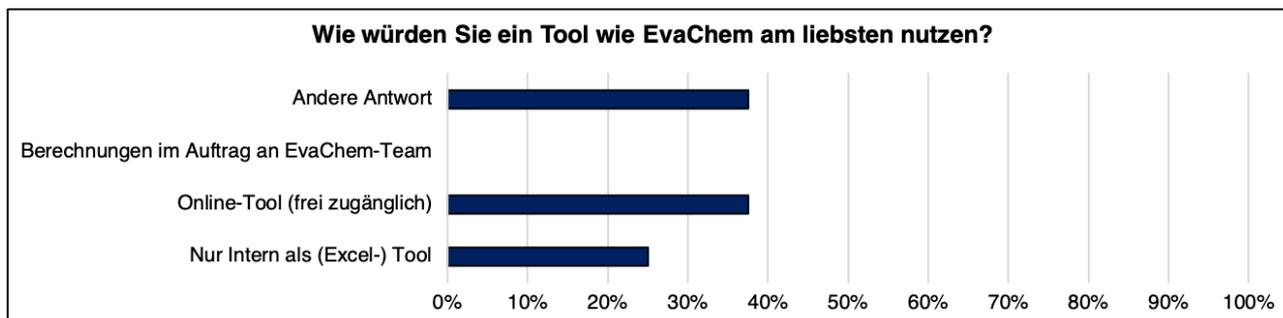
**Abbildung 37:** Umfrage 3: Mir sind die Unterschiede und die Vor-/Nachteile einer Berechnung mit/ohne Prozessdaten klar?

Was die anwendungs- und bewertungsrelevanten Fragestellungen und Systemgrenzen anbelangt, sind die Unterschiede sowie die Vor- und Nachteile der Berechnung mit und ohne Prozessdaten den Teilnehmern weitestgehend (91 %) klar (Abbildung 37).



**Abbildung 38:** Umfrage 4: Sind die Systemgrenzen und der Anwendungsbereich von EvaChem verständlich definiert?

Ebenfalls wurden die Systemgrenzen und der damit verbundene Anwendungsbereich von EvaChem für die Stakeholder verständlich definiert (Abbildung 38). Somit ist davon auszugehen, dass die Anwender und Anwenderinnen (Stakeholder) den Fokus des EvaChem-Multikriterien-Systems auf die chemische Effizienz verstehen und nachvollziehen können und den Mehrwert von EvaChem für eine ganzheitliche Bewertung der Rohstoffnutzung erkennen.



**Abbildung 39:** Umfrage 5: Wie würden Sie ein Tool wie EvaChem am liebsten nutzen?

Diese Annahme kann tendenziell durch die letzte Umfrage bestätigt werden, denn alle Stakeholderinnen und Stakeholder würden EvaChem prinzipiell nutzen, wobei sich 38 % ein frei zugängliches *Online*-Werkzeug wünschen würden, 25 % würden es gerne als ein betriebsinternes Werkzeug verwenden und weitere 38 % wählten eine andere Antwort, wobei sich hierbei verschiedene Fragen, Anmerkungen und Wünsche zum Aufbau des vom Anwender nutzbaren Systems sowie der Bedienerfreundlichkeit verbargen (Abbildung 39). Diese Anregungen und Diskussionspunkte waren zum einen Grundlage für die in Kapitel 3.2.3 durchgeführte und dargestellte Überarbeitung des optimierten Systems zum finalen System, zum anderen sind sie Ausgangspunkte für die Entwicklung eines EvaChem Nachfolgeprojekts (Details siehe Kapitel 8).

Anders als geplant war es im Mai 2021, aufgrund der andauernden COVID-19 Situation, nicht möglich einen Abschlussworkshop zum EvaChem-Verbundprojekt als Präsenzveranstaltung durchzuführen. Ein weiterer Online-Workshop war aus Sicht des Projektteams nicht zielführend, da für den „realen“ Abschlussworkshop interaktive Arbeiten angedacht waren, die sich Online nicht im gleichen Maße umsetzen ließen.

Deswegen wurde stattdessen das EvaChem-Verbundprojekt im Rahmen der „Renewable Materials Conference 2021“ (<https://renewable-materials.eu>) einer breiten Öffentlichkeit vorgestellt.

## 6 Verwertung

Durch die Veröffentlichung der Ergebnisse des Multikriterien-Systems und dessen Anwendungsbereich in zwei Online-Stakeholder-Workshops war es möglich Teile der zuvor beschriebenen wissenschaftlichen und wirtschaftlichen Erfolgsaussichten und deren Anschlussfähigkeiten (Tabelle 13) mit späteren potentiellen Anwendern zu diskutieren und diesbezüglich Feedback einzuholen.

**Tabelle 13:** Verwertungsplan des EvaChem Multikriterien-Systems.

Grün: Durch Rücksprache mit dem etablierten Stakeholder-Netzwerk diskutierte und bestätigte Verwertungsmöglichkeiten.

Verwertungskategorie	Verwertung	Instrument	Zeithorizont
<b>Wissenschaftliche Erfolgsaussichten</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Bereitstellung eines <i>Tools</i> für weitere, zukünftige Forschungsarbeiten</li> <li>• Schaffung von <i>Know-how</i></li> <li>• Effizientere Prozessgestaltung</li> <li>• Konzentration der Bioökonomie auf ressourceneffiziente und erfolgsversprechende Syntheserouten</li> <li>• Transfer zu Nutzergruppen</li> <li>• Verknüpfung mit anderen Evaluierungsmethoden (z.B LCA)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Veröffentlichungen</li> <li>• Internetauftritte</li> <li>• Workshops</li> <li>• Informationsmaterial</li> <li>• Verbreitung der Ergebnisse</li> <li>• Netzwerkbildung</li> <li>• Beratungsleistungen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Kurzfristig (1 Jahr)</li> <li>• Mittelfristig (1 bis 4 Jahre)</li> <li>• Langfristig (über 4 Jahre)</li> </ul>
<b>Wirtschaftliche Erfolgsaussichten</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Effizienzsteigerung in der Wertschöpfungskette</li> <li>• Nachhaltigkeit</li> <li>• Nutzen für verschiedene Anwendergruppen, -industrien</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Veröffentlichungen</li> <li>• Internetauftritte</li> <li>• Workshops</li> <li>• Informationsmaterial</li> <li>• Verbreitung der Ergebnisse</li> <li>• Netzwerkbildung</li> <li>• Beratungsleistungen</li> </ul>	
<b>Wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit im Hinblick auf eine Verwertung</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Folgeprojekte</li> <li>• Umsetzung weiterer Ergebnisse durch Kontaktaufnahme mit Nutzern / Verwendern</li> <li>• Bereitstellung einer internetbasierten Software</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Veröffentlichungen</li> <li>• Internetauftritte</li> <li>• Workshops</li> <li>• Informationsmaterial</li> <li>• Verbreitung der Ergebnisse</li> <li>• Netzwerkbildung</li> <li>• Beratungsleistungen</li> </ul>	

Der Verwertungsplan beinhaltet schon weitreichendere zukünftige Verwertungsmöglichkeiten, die auf einer erfolgreichen Etablierung, Anwendung und Bewertung des Multikriterien-Systems basieren und durch ein Nachfolgeprojekt für die Umsetzung des Multikriterien-Systems in ein anwenderfreundliches *EvaChem-Tool* erweitert werden kann (Kapitel 8).

Die Diskussion mit den Stakeholdern ergab, dass ein großer Zuspruch bzw. Bedarf an einem solchen, vereinfachten, praktikablen und dennoch aussagekräftigen System zur Evaluation der Chemikalienproduktion besteht (Kapitel 5). Bezüglich der wissenschaftlichen und wirtschaftlichen Erfolgsaussichten ist zu sagen, dass ein Großteil der Stakeholder aus verschiedenen Bereichen (Universitäten, Forschungseinrichtungen, *Start-ups*, KMUs und Großindustrie) das entwickelte Multikriterien-System als eine Art *Screening*-System für weitere, zukünftige Forschungsarbeiten nutzen würde, um sich somit auf ressourceneffiziente und erfolgsversprechende Syntheserouten zu konzentrieren und Prozesse effizienter gestalten zu können. Auch die Systemgrenzen und der Anwendungsbereich von *EvaChem* sowie die chemische Effizienz als einen Baustein (neben Aspekten aus dem Rohstoff-, Agrar- und Nachhaltigkeitsbereich) für die ganzheitliche Betrachtung der nachhaltigen Rohstoffnutzung zu beachten, wurde als äußerst hilfreich bewertet.

Mit Hilfe der durchgeführten Stakeholder-Workshops war es nicht nur möglich die Ergebnisse von *EvaChem* zu verbreiten, sondern ebenfalls schon ein Stakeholder-Netzwerk aus potentiellen Anwendern des Multikriterien-Systems aufzubauen. Hierbei wurde deutlich, dass für eine allgemeine, flächendeckende Nutzung des etablierten Multikriterien-Systems ein anwenderverständlicher und benutzerfreundlicher *EvaChem Tool*-Prototyp entwickelt werden muss. Diese Umsetzung könnte und sollte in einem Folgeprojekt von *EvaChem* erfolgen. In diesem Nachfolgeprojekt könnte dann neben anderen wichtigen Aspekten ebenfalls die Verknüpfung von *EvaChem* mit anderen Evaluierungsmethoden untersucht werden (Details Kapitel 8).

## 7 Zusammenfassung der Ergebnisse

Im Projekt EvaChem wurde ein praktikables Multikriterien-System zur Evaluierung der Chemikalienproduktion (EvaChem) entwickelt, um die stoff- und prozessbezogenen vorteilhaftesten Kombinationen aus Rohstoff (fossile Ressourcen, CO<sub>2</sub>, erste und zweite Generation Biomasse), Syntheseweg und Zielmolekül effizient zu identifizieren.

Auf dieser Basis können z. B. die Zielmoleküle und Prozesswege gefunden werden, für die Biomasse erster und zweiter Generation als Ausgangspunkt besonders vielversprechend sind oder ob fossile Ressourcen oder CO<sub>2</sub> genutzt werden sollten. Hier können sich weitere Entwicklungen und Investitionen lohnen. Ebenso wird deutlich, bei welchen Molekülen der petrochemische Weg vorteilhaft bleibt.

Die Evaluation im EvaChem Multikriterien-System erfolgt nach folgenden Aspekten:

- Identifizierung der vorteilhaftesten **stoff- und prozessbezogenen** Kombinationen aus Rohstoff, Syntheseweg und Zielmolekül
- Fokus auf Moleküle und Prozesswege, die aus chemischer Sicht vielversprechend sind
- Herstellung von **ressourcen- und energieeffizienten** Produkten
- Das Multikriterien-System ist **wissenschaftlich korrekt** aber auch **praktikabel** und einfach **anwendbar**

Somit beschreibt und erlaubt EvaChem die Bewertung der chemischen Effizienz vom rohstoffnahen „Vorläufermolekül“ bis zum Zielmolekül. Chemische Effizienz bedeutet hierbei die Effizienz der Umwandlung von Vorläufer- und/oder Startmolekül in das Zielmolekül unter Berücksichtigung der chemischen Struktur, einschließlich deren Ähnlichkeit, Erhalt oder Änderung.

Somit ist die chemische Effizienz eine wichtige Größe für die Bewertung von Rohstoffen im Kontext eines Zielmoleküls.

Nachhaltigkeits- und Wirtschaftsindikatoren mit hohem Datenbedarf lagen bewusst **außerhalb** des Untersuchungsrahmens und werden im entwickelten Multikriterien-System nicht betrachtet. Dennoch ist es mit EvaChem möglich Prozesswege und Kombinationen zu identifizieren die ökologisch und ökonomisch potenziell vorteilhaft sind.

Das entwickelte Multikriterien-System EvaChem besteht aus insgesamt 11 Indikatoren und Metriken, die sich in drei Klassen von Indikatoren und Metriken unterteilen lassen: Masse-bezogene Metriken, Energie-bezogene Metriken, Andere Metriken und Indikatoren. Innerhalb dieser Klassen gibt es dann die sogenannten Stöchiometrie-basierten Basis-Indikatoren und Metriken und die Prozessdaten-basierten Erweiterten Indikatoren und Metriken (Kapitel 3.2.3, Tabelle 7).

Das EvaChem Multikriterien-System kann als ein *Screening* zu Beginn von Innovationsprozessen genutzt werden und erlaubt eine Vorauswahl geeigneter Ressourcen und Prozesswege, aber auch als frühe Unterstützung ist es geeignet, um den **Labor-Maßstab-Status** effektiv durch die effizienteste Route zu verkürzen oder zu überbrücken. Im **Pilot- und Demonstrations-Maßstab** bietet das System die Möglichkeit den Prozess iterativ zu optimieren und erlaubt erste Prozessdaten zu ermitteln. Generell kann dieses System zu kürzeren Innovationszyklen beitragen, was zur monetären und materiellen Ressourcenschonung und mehr Erfolg am Markt führen kann. Die Vorstellung des etablierten und angewendeten Multikriterien-Systems gegenüber Stakeholdern aus der EvaChem-Zielgruppe bestätigte die Nutzung und Funktion von EvaChem als *Screening*-System zu Beginn von Innovationsprozessen: Die Stakeholder sind an diesem vereinfachten und praktikablen System zur

Chemikalienproduktion interessiert und würde dieses für eine Vorauswahl verschiedener Prozesswege anwenden.

## 8 Ausblick und weiteres Vorgehen

Der Fokus des Projekts EvaChem lag auf der Entwicklung eines praktikablen, aber dennoch aussagekräftigen Multikriterien-Systems zur Evaluierung der Chemikalienproduktion. Durch die Etablierung, iterative Anwendung, Optimierung und Bewertung konnte ein geeignetes Multikriterien-System entwickelt werden, welches einfach, praktikabel und dennoch aussagekräftig für die Evaluierung verschiedener Synthesewege der Chemikalienproduktion ist. Es wurde deutlich, dass ein hoher Bedarf für ein solches Bewertungs-System besteht. Das entwickelte Multikriterien-System kann als eine Art *Screening*-Instrument für weitere, zukünftige Forschungsarbeiten verwendet werden, um ressourceneffiziente und erfolgsversprechende Syntheserouten zu identifizieren, die Forschung auf diese zu konzentrieren und Prozesse effizienter gestalten zu können.

Für eine allgemeine, flächendeckende Nutzung des etablierten Multikriterien-Systems ist es notwendig anwenderverständliche und benutzerfreundliche EvaChem *Tool*-Prototypen basierend auf diesem System zu entwickeln. Dies sollte in einem weiteren Projekt realisiert werden.

Der Fokus des nachfolgenden Projekts könnte hierbei auf drei Hauptaspekten liegen:

- Entwicklung von EvaChem *Tool*-Prototypen
- Evaluierung und Optimierung der EvaChem *Tool*-Prototypen
- Anschlussfähigkeits-Analyse, Verbreitung und Verwertung der EvaChem *Tool*-Prototypen

### Entwicklung von EvaChem *Tool*-Prototypen

Die Entwicklung der *Tool*-Prototypen würde zum einen die Transformation des EvaChem Multikriterien-Systems in *Tool*-Prototypen, zum anderen eine Standardisierung der Prototypen und die geeignete Visualisierung der Ergebnisse innerhalb der Prototypen beinhalten.

Hierbei könnten zwei Versionen von *Tool*-Prototypen in einem fortgeschrittenen Excel-Format in deutscher und englischer Sprache etabliert werden. Beiden *Tool*-Prototypen würde hierbei das entwickelte Multikriterien-System, sowie dieselben Daten und Berechnungen zugrunde liegen. Beide würden allerdings unterschiedliche Zielgruppen haben und somit auch eine unterschiedliche Ausstattung und Kosten. Während sich der sogenannte *basic Tool*-Prototyp, als freiverfügbares, kostenloses *Tool* an Hochschulen und Forschungsinstitute richten könnte, könnte der kommerzielle, kostenpflichtige *advanced Tool*-Prototyp *Start-ups*, KMUs und auch die Großindustrie als Zielgruppen haben.

Mit einer Standardisierung der *Tools* wäre es möglich eine hohe Benutzerfreundlichkeit zu gewährleisten. Dazu zählt zum Beispiel die Standardisierung der Parameter zur Berechnung, um die Eingabe von Seiten des Anwenders zu minimieren. Neben der Standardisierung ist auch eine aussagekräftige Visualisierung der Ergebnisse wichtig um einen direkten Vergleich von zum Beispiel mehreren Rechnungen grafisch darzustellen.

### Evaluierung und Optimierung der EvaChem *Tool*-Prototypen

Die Evaluierung und Optimierung könnte die Anwendung und inhaltliche Weiterentwicklung der *Tool*-Prototypen hinsichtlich bestimmter Fragestellungen unter zur Hilfenahme ausgewählter Zielmoleküle und Prozesswege beinhalten sowie die Erweiterung und iterative Optimierung der *Tool*-Prototypen. Die zunächst inhaltliche Weiterentwicklung würde in erster Linie die Anwendung der *Tool*-Prototypen unter bestimmten Fragestellungen beinhalten um somit die Reichweite und die Nutzung der *Tool*-Prototypen für die Anwender aussagekräftig zu definieren. Die Erweiterung und iterative Optimierung der EvaChem *Tool*-Prototypen würde anschließend auf den zuvor gemachten

Ergebnissen der Anwendung basieren und sich auf die Visualisierung verschiedener Ergebnisse, den Vergleich der Ergebnisse sowie die mögliche Ableitung von generellen Aussagen die mit dem *Tool*-Prototypen gemacht werden können, fokussieren. Durch diese kontinuierliche und iterative inhaltliche Weiterentwicklung und Optimierung könnten speziell die Bedürfnisse der *Tool*-Anwender berücksichtigt werden und der Anwendungsbereich für die EvaChem *Tool*-Prototypen bewertet werden.

### **Anschlussfähigkeits-Analyse, Verbreitung und Verwertung der EvaChem *Tool*-Prototypen**

Die abschließende Anschlussfähigkeits-Analyse, Verbreitung und Verwertung der EvaChem *Tool*-Prototypen würde sich auf die Analyse und Beschreibung der Anschlussfähigkeit der EvaChem *Tool*-Prototypen an andere, relevante Bewertungssysteme sowie die Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse fokussieren. Für die Anschlussfähigkeits-Analyse könnten zusätzliche Kriterien, die neben der chemischen Effizienz für eine ganzheitliche Rohstoffbewertung notwendig sind, wie z.B. Wirtschaftlichkeit, Rohstoff-Verfügbarkeit, Nachhaltigkeit, Infrastruktur etc. zunächst gesammelt und in Abstimmung mit potenziellen Anwendern (Stakeholder) weiter ausgearbeitet werden. Aufgrund der Ergebnisse der Anschlussfähigkeits-Analyse wäre es dann möglich zu entscheiden wie die EvaChem *Tool*-Prototypen passgenau in Anwender-interne Entscheidungsprozesse eingebunden werden können um Hinweise darüber zu geben, welche weiterführenden Analysen ggf. genutzt werden können um alternative Produktionsrouten weitergehend zu charakterisieren.

Für die effektive Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse ist es möglich eine Projekt-eigene Homepage aufzusetzen welche allgemeine Projektinformationen, Updates sowie die EvaChem *Tool*-Prototypen beinhaltet und so der Öffentlichkeit zugänglich macht. Um möglichst viele Interessenten auf die EvaChem *Tool*-Prototypen aufmerksam zu machen und ggf. Kunden bzw. Partner für weiterführende Projekte und/oder Aufträge zu generieren, könnte für die Verbreitung und Bewerbung auf die Kanäle (z.B. Newsletter, LinkedIn, Xing), Netzwerke (z.B. ProcessNet, ...) und Veranstaltungsformate (z.B. Tagungen, Konferenzen) aller Projektpartner zurückgegriffen werden.

## 9 Veröffentlichungen

Das Projekt sowie die Projekt-Aktivitäten und Ergebnisse wurde einem breiten Spektrum potenzieller Anwender aus Industrie, Mittelstand, Start-up und Forschung über Homepages, Kommunikations-Kanäle wie z.B. SocialMedia (z.B. LinkedIn) und Newsletter, Publikationen und Pressemitteilungen sowie Netzwerke der Partner bekannt gemacht und mit den Experten/den potenziellen Anwendern im Rahmen der Stakeholder-Workshops am 14. Mai 2020 und 26. Oktober 2020 diskutiert.

Ferner wurde das Verbundprojekt in englischer Sprache auf der „Renewable Materials Conference 2021“ (<https://renewable-materials.eu>) am 20. Mai 2021 vorgestellt.

### **Bekanntmachung des Projekts und Eröffnung der Stakeholder-Registrierung 16. Januar 2020**

Internetseite: <http://nova-institute.eu/evachem>

Pressemitteilung: <http://nova-institute.eu/press/?id=161>

Bio-based News Portalbeitrag: <http://news.bio-based.eu/identifizierung-der-vorteilhaftesten-kombinationen-aus-rohstoff-syntheseweg-und-zielmoekuel-stakeholder-registrierung-fuer-verbundprojekt-evachem-offen/>

### **Ankündigung des ersten Stakeholder-Workshops und Eröffnung der Anmeldung 26. März 2020**

Internetseite: <http://nova-institute.eu/evachem/workshop/>

Pressemitteilung: <http://nova-institute.eu/press/?id=185>

Bio-based News Portalbeitrag: <http://news.bio-based.eu/verbundprojekt-evachem-stakeholder-workshop-am-14-mai-2020-in-koeln/>

### **Vorstellung des Verbundprojekts in englischer Sprache auf der *Renewable Materials Conference 2021* (<https://renewable-materials.eu>) am 20. Mai 2021**

## 10 Literaturverzeichnis

- Canals, L. M. i., Azapagic, A., Doka, G., Jefferies, D., King, H., Mutel, C., Nemecek, T., Roches, A., Sim, S., Stichnothe, H., Thoma, G. and Williams, A. 2011: Approaches for Addressing Life Cycle Assessment Data Gaps for Bio-based Products. *Journal of Industrial Ecology*, Vol. 15 (5), 707-725. doi:10.1111/j.1530-9290.2011.00369.x
- Carus, M., Dammer, L., Puente, Á., Raschka, A. and Arendt, O. 2017: Bio-based drop-in, smart drop-in and dedicated chemicals. nova-Institut GmbH (Ed.), Hürth, Germany, 2017-10. Download at <https://renewable-carbon.eu/publications/product/bio-based-drop-in-smart-drop-in-and-dedicated-chemicals-%E2%88%92-full-version/>
- Carus, M., Dammer, L., Raschka, A., Skoczinski, P. and vom Berg, C. 2020: nova-Paper#12: Renewable Carbon – Key to a Sustainable and Future-Oriented Chemical and Plastic Industry. nova-Institut GmbH (Ed.), Hürth, Germany, 2020-09. Download at <https://renewable-carbon.eu/publications/product/nova-paper-12-renewable-carbon-key-to-a-sustainable-and-future-oriented-chemical-and-plastic-industry-%E2%88%92-full-version/>
- Constable, D. J. C., Curzons, A. D. and Cunningham, V. L. 2002: Metrics to ‘green’ chemistry— which are the best? *Green Chem.*, Vol. 4 (6), 521-527. doi:10.1039/b206169b
- Curzons, A. D., Mortimer, D. N., Constable, D. J. C. and Cunningham, V. L. 2001: So you think your process is green, how do you know? — Using principles of sustainability to determine what is green – a corporate perspective. *Green Chemistry*, Vol. 3 (1), 1-6. doi:10.1039/b007871i
- de Bakker, F. G. A., Fisscher, O. A. M. and Brack, A. J. P. 2002: Organizing product-oriented environmental management from a firm’s perspective. *Journal of Cleaner Production*, Vol. 10 (5), 455-464. doi:10.1016/s0959-6526(02)00012-4
- DeVierno Kreuder, A., House-Knight, T., Whitford, J., Ponnusamy, E., Miller, P., Jesse, N., Rodenborn, R., Sayag, S., Gebel, M., Aped, I., Sharfstein, I., Manaster, E., Ergaz, I., Harris, A. and Nelowet Grice, L. 2017: A Method for Assessing Greener Alternatives between Chemical Products Following the 12 Principles of Green Chemistry. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, Vol. 5 (4), 2927-2935. doi:10.1021/acssuschemeng.6b02399
- Fasahati, P. and Maravelias, C. T. 2018: Advanced Biofuels of the Future: Atom-Economical or Energy-Economical? *Joule*, Vol. 2 (10), 1915-1919. doi:10.1016/j.joule.2018.09.007
- Iffland, K., Sherwood, J., Carus, M., Raschka, A., Farmer, T. and Clark, J. 2015: nova-Paper#8: Definition, Calculation and Comparison of the “Biomass Utilization Efficiency (BUE)” of Various Bio-based Chemicals, Polymers and Fuels. nova-Institut GmbH (Ed.), Hürth, Germany, 2015-11. Download at <http://bio-based.eu/nova-papers/#novapaper8en>
- Karlsson, R. and Luttrupp, C. 2006: EcoDesign: what's happening? An overview of the subject area of EcoDesign and of the papers in this special issue. *Journal of Cleaner Production*, Vol. 14 (15-16), 1291-1298. doi:10.1016/j.jclepro.2005.11.010
- Morales-Mendoza, L. F. and Azzaro-Pantel, C. 2017: Bridging LCA data gaps by use of process simulation for energy generation. *Clean Technologies and Environmental Policy*, Vol. 19 (5), 1535-1546. doi:10.1007/s10098-017-1349-6
- O'Rourke, D. 2014: The science of sustainable supply chains. *Science*, Vol. 344 (6188), 1124-1127. doi:10.1126/science.1248526
- Phan, T. V. T., Gallardo, C. and Mane, J. 2015: GREEN MOTION: a new and easy to use green chemistry metric from laboratories to industry. *Green Chemistry*, Vol. 17 (5), 2846-2852. doi:10.1039/c4gc02169j
- Saurat, M., Ritthoff, M. and Smith, L. 2015: Overview of existing sustainability assessment methods and tools, and of relevant standards. EU funded project „SAMT–Sustainability Assessment

- Methods and Tools to support decision making in the process industries“ No. 636727 (Ed.), 2015-06. Download at [https://www.spire2030.eu/sites/default/files/users/user355/SAMT\\_D.1.1\\_final\\_updatedlinks\\_De c2016.pdf](https://www.spire2030.eu/sites/default/files/users/user355/SAMT_D.1.1_final_updatedlinks_De c2016.pdf)
- Sheldon, R. A. 2017: Metrics of Green Chemistry and Sustainability: Past, Present, and Future. ACS Sustainable Chemistry & Engineering, Vol. 6 (1), 32-48. doi:10.1021/acssuschemeng.7b03505
- Tobiszewski, M., Marć, M., Gałuszka, A. and Namieśnik, J. 2015: Green Chemistry Metrics with Special Reference to Green Analytical Chemistry. Molecules, Vol. 20 (6), 10928-10946. doi:10.3390/molecules200610928
- Trost, B. M. 1991: The atom economy--a search for synthetic efficiency. Science, Vol. 254 (5037), 1471-1477. doi:10.1126/science.1962206
- van Berkel, R., van Kampen, M. and Kortman, J. 1999: Opportunities and constraints for Product-oriented Environmental Management Systems (P-EMS). Journal of Cleaner Production, Vol. 7 (6), 447-455. doi:10.1016/s0959-6526(99)00232-2

## 11 Abkürzungsverzeichnis

<b>3-HP</b>	3-Hydroxypropionsäure
<b>AE</b>	Atomökonomie
<b>BUE</b>	<i>Biomass Utilisation Efficiency</i>
<b>C</b>	Komplexität
<b>CED</b>	<i>Cumulative Energy Demand</i>
<b>CF</b>	<i>Carbon Footprint</i>
<b>cFUE</b>	<i>Chemical Feedstock Utilisation Efficiency</i>
<b>CO<sub>2</sub></b>	Kohlenstoffdioxid
<b>CP</b>	Coprodukt
<b>DME</b>	Dimethylether
<b>E</b>	Prozessenergie
<b>EA</b>	<i>Energy analysis</i>
<b>EEA</b>	<i>Eco-Efficiency Analysis</i>
<b>e-Faktor</b>	<i>Environmental factor</i>
<b>EF</b>	<i>Material Ecological Footprint</i>
<b>EE-IOA / LCA</b>	<i>Hybrid environmentally extended input-output analysis and LCA</i>
<b>EE-IOA / LCA / GEM</b>	<i>Hybrid EE-IOA / LCA und General Equilibrium Model</i>
<b>E-LCA</b>	<i>Exergetic LCA</i>
<b>E-LCC</b>	<i>Environmental Life Cycle Costing</i>
<b>EO</b>	Ethylenoxid
<b>EUE</b>	<i>Educt Utilisation Efficiency</i>
<b>EvaChem</b>	Evaluation der Chemikalienproduktion
<b>FKZ</b>	Förderkennzeichen
<b>FT</b>	Fischer-Tropsch
<b>GCM</b>	<i>Green Chemistry Metrics</i>
<b>H<sub>R</sub></b>	Reaktionsenthalpie
<b>KMU</b>	Kleine und mittelständische Unternehmen
<b>LCA</b>	<i>Life Cycle Analysis</i>
<b>LCAA</b>	<i>Life Cycle Activity Analysis</i>
<b>LCA / PEM</b>	<i>Hybrid LCA und Partial Equilibrium Model</i>
<b>LCIA</b>	<i>Life Cycle Impact Assessment</i>
<b>LCO</b>	<i>Life Cycle Optimisation</i>
<b>MEG</b>	Monoethylenglykol
<b>MeOH</b>	Methanol
<b>MIPS</b>	<i>Material Input Per Service</i>
<b>NGO</b>	<i>Non-governmental organisation</i>
<b>OME</b>	Polyoxymethylendimethylether
<b>pFUE</b>	<i>Primary Feedstock Utilisation Efficiency</i>
<b>PPL</b>	Propiolacton
<b>RCS</b>	<i>Renewable Carbon Share</i>
<b>RME</b>	<i>Reaction Mass Efficiency</i>

<b>sEUE</b>	<i>Stoichiometric Educt Utilisation Efficiency</i>
<b>sEUS</b>	<i>Stoichiometric Educt Utilisation Sufficiency</i>
<b>S-LCA</b>	<i>Social LCA</i>
<b>TRL</b>	<i>Technology Readiness Level / Technologische Reife</i>
<b>WF</b>	<i>Water Footprint</i>



