

TEXTE 21/2004

UMWELTFORSCHUNGSPLAN DES
BUNDESMINISTERIUMS FÜR UMWELT,
NATURSCHUTZ UND REAKTORSICHERHEIT

Forschungsbericht FKZ 201 94 313
UBA-FB 000600

Abfallvermeidung bei Produktionen für organische Spezialchemikalien durch den Einsatz hochspezifischer Katalysatoren

Dr. Frank Marscheider-Weidemann
Dr. Bärbel Hüsing

Fraunhofer-Institut für Systemtechnik und Innovationsforschung

unter Mitarbeit von

Professor Dr. Jens Weitkamp, Universität Stuttgart

Zusammenfassung

Der Einsatz von Katalysatoren macht einige Reaktionen erst möglich und trägt zur Einsparung von Ressourcen bei. Dabei werden Nebenprodukte und Abfälle aufgrund der katalytischen Selektivität und Spezifität vermieden. Wesentliche Einsparpotenziale hinsichtlich der Abfallmengen werden vor allem im Bereich der Feinchemikalienproduktion vermutet. Bei den Feinchemikalien werden oft komplexe und mehrstufige Synthesewege eingesetzt und, durch die in zunehmendem Maße geforderte Enantiomeren-Reinheit, große Mengen an Einsatz- und Hilfsstoffen verbraucht. Obwohl unstrittig ist, dass Katalysatoren wesentlich zu einer "grünen Chemieproduktion" beitragen, gibt es zu den Mengen der durch Katalysatoren eingesparten Abfälle bisher keine umfassende Quantifizierung.

Im Rahmen des vorliegenden Forschungsvorhabens untersuchte das Fraunhofer ISI in Kooperation mit der Universität Stuttgart, welche Ansätze für die Quantifizierung von Einsparpotenzialen durch die Anwendung selektiver katalytischer Verfahren beim Abfallanfall möglich sind. Im Fokus der Untersuchung steht dabei die Herstellung von Spezial- und Feinchemikalien wie pharmazeutische Chemikalien, Pflanzenschutzmittel, Biozide u. a..

Für fortgeschrittene hochselektive Katalysatorsysteme wird eine Bestandsaufnahme erarbeitet, bei der über unterschiedliche Reaktionstypen wichtige Verfahren, Produktionsbereiche und Syntheseprozesse identifiziert werden. Hierzu wurden die aktuellen deutschen Hersteller und Entwickler von Katalysatoren mittels Patent- und Literaturrecherchen identifiziert und der Stellenwert der Katalyse innerhalb der „Green Chemistry“ beschrieben. Nach einer kurzen Diskussion zur Definition von Feinchemikalien und zu Ansatzpunkten einer nachhaltigeren Gestaltung einer Feinchemikalienproduktion wird ein Überblick zum Stand und Entwicklungstrends in der Katalysatorforschung gegeben. Im Kapitel 7 wird dann vertieft auf den Beitrag fortgeschrittener Katalysatorsysteme innerhalb der Feinchemikalienproduktion eingegangen.

Die entsprechenden Daten sind aus der Literatur, Interviews und vor allem einem Fachgespräch mit Katalyseexperten entnommen, das im Rahmen des Forschungsvorhabens am 24. September 2002 am Umweltbundesamt stattfand. Bei dem Fachgespräch wurde kontrovers diskutiert, inwieweit eine Berechnung des Abfalleinsparpotenzials überhaupt möglich und – angesichts bestehender methodischer Schwierigkeiten – sinnvoll ist. Kritikpunkte waren vor allem, dass eine direkte Abschätzung auf Basis von Kennziffern mit zu großen Unsicherheiten und Fehlern belastet ist (und damit unwissenschaftlich wird) und dass die Quantität des anfallenden Abfalls häufig nicht das wichtigste ökologische Kriterium bei chemischen Reaktionen ist, sondern insbesondere die Qualität (z. B. Toxizität) ist von großer Bedeutung.

So wurden, den Anregungen der Experten folgend, im weiteren Verlauf des Forschungsvorhabens u. a. ausgehend von Fallbeispielen und Reaktionstypen nun überwiegend qualitative Betrachtungen zur zukünftigen Entwicklung der Abfallmengen vorgenommen. Es wurde auch eine schriftliche Expertenbefragung genutzt, die im März bis Mai 2003 durchgeführt wurde und an der sich 35 Experten beteiligten. Da die Katalysatorbranche bei der Nennung von Details im Allgemeinen sehr zurückhaltend ist – die Entwicklung eines neuen Katalysators ist mit großen Investitionen und entsprechend schützenswertem hohem Know-how verbunden – wurde versucht, in der Befragung das "tacit knowledge" ausgewiesener Experten zu mobilisieren.

Hierzu wurden die Fragen in allgemeiner Form als Thesen formuliert und mögliche Antworten als Auswahl zum Ankreuzen vorgegeben. Die Fragen umfassten den heutigen und künftigen Einsatz von Katalysatorsystemen, die Entwicklung der künftigen Chemikalienproduktion in den nächsten 10 Jahren, die mögliche Abfallreduktion sowie mögliche Hemmnisse. Die Ergebnisse sind in Kapitel 8 dargestellt.

Die Abschätzung des Abfalleinsparpotenzials erfolgt exemplarisch an ausgewählten Reaktionstypen und Chemiesparten. Es errechnet sich in Kapitel 9 eine Abfalleinsparung von ca. 9 % des Gesamtabfalls der Chemischen Industrie und ca. 14 % der Abfälle aus organisch-chemischen Prozessen. Dieser Prozentwert kann als unterer Wert für die mögliche Abfalleinsparung durch verbesserte Katalysatorsysteme für das Jahr 2010 angesehen werden.

Es werden verschiedene Empfehlungen formuliert, um den Prozess der Abfalleinsparung durch fortgeschrittene Katalysatorsysteme weiter voranzubringen: harte Empfehlungen wie Förderprogramme, um Katalyse-Verfahren schneller in den industriellen Maßstab zu entwickeln und weiche, wie die Mitarbeit des Umweltbundesamtes an geeigneten Veranstaltungen.

Summary

Some reactions are only possible using catalysts and these catalysts contribute to the saving of resources. By-products and waste are avoided due to the catalytic selectivity and specificity. There are assumed to be significant saving effects with regard to the amount of waste, primarily in the domain of fine chemicals. Complex and multi-stage synthesis preparation methods are often used to produce fine chemicals. Because of the increasing demand for enantiomer-pure products, large amounts of raw and auxiliary materials are used. Although it is undisputed that catalysts make a fundamental contribution to "green chemistry" production, there is no comprehensive quantification of the amount of waste saved by their use.

In the context of this research project, the Fraunhofer ISI, in co-operation with the University of Stuttgart, examined which approaches are possible to quantify the waste reducing potential of selective catalysts. The analysis focussed on the production of special and fine chemicals like pharmaceuticals, pesticides, biocides etc.

For advanced, highly selective catalyst systems, a state-of-the-art overview was elaborated, in which various reaction types, important procedures, production sectors and synthesis processes are identified. To do so, the current German producers and developers of catalysts are ascertained using patent and literature research and the importance of the catalysis within "Green Chemistry" is described. After a short discussion about the definition of fine chemicals and starting-points for a more sustainable configuration of fine chemical production, a summary is given of the status and development trends in catalyst research. Chapter 7 then deals in depth with the contribution of advanced catalyst systems within fine chemical production.

The data used are taken from the literature and gathered from interviews, especially from a workshop with catalyst experts, which took place within the scope of this project at the Umweltbundesamt¹ in Berlin on September 24th, 2002. The technical discussion about calculating the potential of waste prevention was controversial: whether such a calculation can be done and whether it is meaningful in view of the methodological difficulties. The main criticisms were the large uncertainties and errors associated with a direct estimate based on specific indices and that the quantity of the occurring waste is frequently not the most important ecological criterion in chemical reactions, but rather the quality (e.g. toxicity) is of particular significance.

In accordance with the experts' suggestions, therefore, in the further course of the research project, mainly qualitative examinations of the future development of waste amounts were carried out using example cases and reaction types. A written survey of experts was also taken into account, which was carried out from March to May 2003, and in which 35 experts participated. Because the catalyst branch is generally very reserved about revealing details – the R&D of new catalysts is linked with large investments and a correspondingly high degree of know-how which has to be protected – the questionnaire attempted to mobilise the "tacit knowledge" of well-known specialists.

To this end, the questions were phrased in a general form as theses and multiple choice answers provided. The questions covered today's and the future use of catalyst systems, the

¹ German Federal Environmental Agency

future development of chemical production within the next 10 years, the possible waste reduction as well as possible obstacles. The results of the questionnaire are shown in Chapter 8.

Estimating the waste reduction potential is carried out based on the examples of selected reaction types and chemical sectors. A waste saving of approx. 9% of the total waste of the chemical industry and approx. 14% of the waste from organic chemical processes is calculated in Chapter 9. These per cent values can be considered to be the lower values for possible waste savings due to improved catalyst systems for the year 2010.

Different recommendations are formulated to further promote the process of saving waste by using advanced catalyst systems: firm recommendations, such as R&D programmes to bring catalysis methods up to industrial scale faster, and soft measures like the participation of the Umweltbundesamt in suitable events.