



- Abschlussbericht zum Projekt HynnoChem -
- Teil II: Eingehende Darstellung -

Zuwendungsempfänger: Carbon Minds GmbH

Förderkennzeichen: 03ZU1115IC

Laufzeit des Vorhabens: 15.10.2021 – 14.10.2024

Berichtszeitraum: 15.10.2021 – 14.10.2024

GEFÖRDERT VOM



**CLUSTERS
4 FUTURE**
Innovationsnetzwerke
für unsere Zukunft



**Bundesministerium
für Bildung
und Forschung**

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis.....	iii
1. Eingehende Darstellung der Ergebnisse	4
1.1. AP 4.4 Life Cycle Assessment.....	4
1.1.1. Ziel und Untersuchungsrahmen.....	5
1.1.2. Sachbilanz.....	10
1.1.3. Ergebnisse der Wirkungsabschätzung	13
1.1.4. Interpretation	18
2. Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises	20
3. Angemessenheit und Notwendigkeit der geleisteten Aufwände.....	20
4. Nutzung und Verwertbarkeit der Ergebnisse	20
5. Fortschritt des Stands der Technik während der Projektlaufzeit	20
6. Veröffentlichung der Ergebnisse.....	20

Abkürzungsverzeichnis (Erweiterung)

EF	Environmental Footprint
GLO	Global
HOR	Hydrogen Oxgen Reaction / Wasserstoffoxidationsreaktion
H2O2	Hydrogen Peroxide / Wasserstoffperoxid
LCA	Life Cycle Assessment / Ökobilanz
LCI	Life Cycle Inventory / Sachbilanz
OER	Oxygen Evolution Reaction / Sauerstoffentstehungsreaktion
RER	Europe
SMR	Steam Methane Reforming / Dampfreformierung

1. Eingehende Darstellung der Ergebnisse

1.1. AP 4.4 Life Cycle Assessment

Problemstellung

Wasserstoffperoxid (H_2O_2) ist eine vielseitige Industriechemikalie mit Anwendungen in der Textil-, Papier- und Chemieindustrie sowie in Umwelttechnologien. Wasserstoffperoxid (H_2O_2) zersetzt sich rückstandsfrei in Wasser und Sauerstoff und bietet damit eine umweltfreundliche Alternative zu konventionellen Chemikalien in verschiedenen industriellen Anwendungen. Derzeit wird H_2O_2 fast ausschließlich über den Anthrachinon-Prozess hergestellt – ein energie- und ressourcenintensives Verfahren, das durch seinen hohen Energie- und Wasserstoffbedarf erhebliche Treibhausgasemissionen verursacht¹. Diese etablierte Produktion ist auf großindustrielle Kapazitäten optimiert und erfordert hochautomatisierte, kontinuierlich betriebene Anlagen in großskaligen Chemieparcs, um wirtschaftlich tragfähig zu sein².

Eine alternative Herstellungsmethode über ein elektrochemisches Verfahren könnte diese Herausforderungen adressieren, indem sie eine dezentrale und bedarfsgerechte Produktion von H_2O_2 ermöglicht. Dadurch könnten energieintensive Transport- und Aufbereitungsschritte entfallen, während gleichzeitig eine flexiblere Anpassung an den tatsächlichen Bedarf in verschiedenen Anwendungsfeldern realisiert wird.

Das Forschungsprojekt HyInnoChem verfolgt die Entwicklung eines elektrochemischen Prozesses mit bifunktionaler Anode, der die bedarfsgerechte und dezentrale Herstellung von Wasserstoffperoxid ermöglicht. Die zentrale Innovation liegt in der bifunktionalen Anode, die sowohl die Sauerstoffentstehungsreaktion (OER) als auch die Wasserstoffoxidationsreaktion (HOR) katalysieren kann. Dadurch ermöglicht sie eine flexible Betriebsweise, bei der die Produktionsroute abhängig von den verfügbaren Rohstoffen und Energiequellen angepasst werden kann. Der Prozess soll speziell für Anwendungen mit bis zu 10 Gewichtsprozent H_2O_2 in wässriger Lösung optimiert werden.

Im Rahmen des Projekts übernimmt Carbon Minds die vergleichende Ökobilanzierung (LCA) des neuen elektrochemischen Prozesses und des konventionellen Antrachinon Verfahrens. Die Ökobilanzierung ist eine wissenschaftlich fundierte Methode zur quantitativen Bewertung der Umweltwirkungen eines Produkts oder Prozesses über dessen gesamten Lebenszyklus

¹ Jia Y., Bai Y., Chang J., Zhai Y., Zhang T., Ren K., Hong J., Life cycle assessment of hydrogen peroxide produced from mainstream hydrogen sources in China (2022)

² Garcia-Serna J., Moreno T., Biasi P., Cocero M. J., Mikkola J.-P., Salmi T. O., Engineering in direct synthesis of hydrogen peroxide: targets, reactors and guidelines for operational conditions (2014)

hinweg. Grundlage hierfür sind die international anerkannten Normen ISO 14040/14044, die sicherstellen, dass die Analyse systematisch, vergleichbar und reproduzierbar ist. Abhängig vom festgelegten Betrachtungsrahmen können dabei die Wechselwirkungen mit der Umwelt in allen Phasen des Produktlebenszyklus berücksichtigt werden. Die Ökobilanz liefert eine transparente und verlässliche Grundlage für nachhaltige Entscheidungen in Industrie, Wissenschaft, Politik und für Verbraucher.

Die Integration einer Ökobilanzierung bereits in einer frühen Entwicklungsphase ermöglicht eine fundierte ökologische Bewertung und trägt dazu bei, nachhaltige Entscheidungen während des Technolgiesedesigns zu treffen. Dies bietet mehrere Vorteile:

- Frühe Identifikation von Umwelt-Hotspots: Kritische Material- und Energieflüsse können rechtzeitig analysiert und durch gezielte Maßnahmen reduziert werden.
- Vergleichbarkeit mit bestehenden Technologien: Eine systematische Analyse stellt sicher, dass die neue Technologie ökologische Vorteile gegenüber dem Status quo aufweist.
- Bessere Skalierbarkeit für industrielle Anwendungen: Durch die frühzeitige Bewertung verschiedener Betriebsszenarien lassen sich Hindernisse für eine spätere Implementierung frühzeitig erkennen und adressieren.

Der folgende Bericht orientiert sich an der klassischen Struktur einer Ökobilanz gemäß ISO 14040/14044. Er beginnt mit einer Ziel- und Untersuchungsdefinition, beschreibt die Methodik der Sachbilanz und stellt die Ergebnisse der Wirkungsabschätzung dar. Abschließend erfolgt eine Interpretation der Resultate, einschließlich der Diskussion möglicher Optimierungsmaßnahmen und Sensitivitätsanalysen des elektrochemischen Verfahrens.

1.1.1. Ziel und Untersuchungsrahmen

Die Festlegung der Zielsetzung und des Untersuchungsrahmens ist ein zentraler Schritt in der Ökobilanzierung, da sie den Geltungsbereich, die funktionelle Einheit und die Systemgrenzen definiert. Nach ISO 14040/14044 bestimmt diese Phase den Umfang der Analyse, die zu bewertenden Umweltwirkungen sowie die Datenquellen und Methoden zur Wirkungsabschätzung.

Dieses Kapitel gliedert sich in zwei Unterkapitel: 1. Zielsetzung der Ökobilanz und 2. Untersuchungsrahmen. Im ersten Abschnitt wird das übergeordnete Ziel der Ökobilanz innerhalb des HyInnoChem-Projekts beschrieben, einschließlich der zu untersuchenden Prozessen und Vergleichsszenarien. Der zweite Abschnitt definiert den methodischen Rahmen der Analyse, indem er die funktionelle Einheit, Systemgrenzen, Datenquellen und Umweltindikatoren festlegt, die für die vergleichende Bewertung der Verfahren verwendet werden.

Zieldefinition

Die vorliegende Ökobilanz hat das Ziel, die Umweltwirkungen der im HyInnoChem-Projekt entwickelten elektrochemischen Produktionsroute für Wasserstoffperoxid (H_2O_2) frühzeitig zu bewerten. Dabei wird das Verfahren mit dem konventionellen Anthrachinon-Prozess verglichen, um die ökologischen Unterschiede beider Technologien zu quantifizieren und das Potenzial der elektrochemischen Alternative unter verschiedenen Betriebsbedingungen zu analysieren.

Die Ergebnisse dieser Ökobilanz dienen dazu:

- Den ökologischen Fußabdruck der neuen elektrochemischen Produktionsroute für H_2O_2 zu quantifizieren.
- Den konventionellen Anthrachinon-Prozess mit dem elektrochemischen Verfahren zu vergleichen, insbesondere in Bezug auf Treibhausgasemissionen.
- Die Auswirkungen verschiedener Energieszenarien auf die Umweltbilanz beider Produktionsverfahren zu untersuchen.
- Die potenziellen Vorteile einer dezentralen H_2O_2 -Produktion für die nachgelagerte industrielle Anwendungen zu analysieren.

Die Ergebnisse richten sich an Industriepartner, politische Entscheidungsträger und Forschungseinrichtungen, um wissenschaftlich fundierte Entscheidungsgrundlagen für die nachhaltige Transformation der chemischen Industrie zu schaffen.

Obwohl zwei Produktionsverfahren direkt verglichen werden, dient die Ökobilanz keiner gezielten Ab- oder Aufwertung, sondern einer frühzeitigen, generischen Analyse der elektrochemischen Produktionsroute. Da es sich um eine explorative Bewertung und keine abschließende Entscheidungsgrundlage handelt, ist kein kritisches Review gemäß ISO 14044 erforderlich.

Untersuchungsrahmen

Funktionelle Einheit

Die funktionelle Einheit beschreibt die quantifizierte Leistung eines Produktsystems und dient als Grundlage für die ökologische Bewertung sowie den Vergleich unterschiedlicher Herstellungsrouten. Im HyInnoChem-Projekt werden Anwendungsfälle für Wasserstoffperoxid mit einer Konzentration von bis zu 10 Gewichtsprozent in wässriger Lösung untersucht. Die funktionelle Einheit für die vergleichende Ökobilanz ist daher **die Produktion und**

Bereitstellung von 1 kg Wasserstoffperoxid (trocken³) als 10 Gewichtsprozentige wässrige Lösung, bereit zur Nutzung in der folgenden Applikation.

Systemgrenzen

Die Systemgrenzen definieren, welche Prozesse und Stoffflüsse in die Ökobilanz einbezogen werden und bis zu welchem Punkt das Produktsystem analysiert wird. Sie bestimmen, welche Lebenszyklusphasen betrachtet werden und welche Umweltbelastungen den untersuchten Produktionsrouten zugeordnet werden.

Die Systemgrenzen dieser Ökobilanz folgen einer Cradle-to-Gate-Analyse, die alle relevanten Prozesse von der Rohstoffgewinnung bis zur Bereitstellung des Wasserstoffperoxids in der geforderten Konzentration beim Anwender erfasst. Die nachgelagerte Nutzung des Produkts wird nicht berücksichtigt, da sich die chemischen Eigenschaften von Wasserstoffperoxid unabhängig vom Herstellungsprozess nicht unterscheiden.

Für diese Annahme gelten folgende Rahmenbedingungen:

- **Identische Produktqualität:** Obwohl die elektrochemische Herstellung von Wasserstoffperoxid potenziell eine höhere chemische Reinheit ermöglicht, wird angenommen, dass das Endprodukt für den vorgesehenen Anwendungsfall chemisch gleichwertig mit dem konventionell hergestellten Wasserstoffperoxid ist.⁴
- **Keine zusätzlichen Aufbereitungsprozesse:** Es wird davon ausgegangen, dass das elektrochemisch erzeugte Wasserstoffperoxid in der geforderten Konzentration (10 %ige wässrige Lösung) direkt genutzt werden kann, ohne dass weitere Reinigungsschritte erforderlich sind.
- **Funktionelle Äquivalenz in der Anwendung:** Die nachgelagerte Nutzung wird nicht betrachtet, da die Reaktivität und Wirksamkeit des Wasserstoffperoxids in der definierten Konzentration unabhängig vom Produktionsweg gleichbleibt.
- **Kein Einfluss auf nachgelagerte Prozessketten:** Mögliche Unterschiede in der Verunreinigung durch Nebenprodukte oder deren Einfluss auf nachfolgende industrielle Anwendungen werden in dieser Studie nicht weiter analysiert.

Beide Produktionsprozesse werden unter zwei unterschiedlichen Rahmenbedingungen untersucht, um die Auswirkungen der Energieversorgung auf die Umweltbilanz zu analysieren.

- **Szenario A - Status Quo:** Dieses Szenario bildet die aktuelle Realität der Wasserstoffperoxid-Produktion in Deutschland ab. Der Anthrachinon-Prozess dient als Referenz, während der elektrochemische Prozess mit den bestehenden

³ Das Wasser in der Lösung wird in dem Datensatz nicht berücksichtigt und muss für anschließende Studien zusätzlich hinzugefügt werden.

⁴ Shi X., Back S., Gill T. M., Siahrostami S., Zheng X., Electrochemical Synthesis of H₂O₂ by Two-Electron Water Oxidation Reaction (2020)

Energiequellen in den zwei Betriebsmodi (Wasserstoff und Wasser als Oxidationsmittel an der Anode) bewertet wird.

- **Szenario B - Erneuerbares Energiesystem:** In diesem Szenario wird untersucht, wie sich die Umweltbilanz der Prozesse verändert, wenn ausschließlich erneuerbare Energien genutzt werden.

Abbildung 1 stellt die Systemgrenzen der beiden untersuchten Wasserstoffperoxid-Produktionsrouten. Der obere Teil zeigt den konventionellen Anthrachinon-Prozess, während der untere Teil den elektrochemischen Prozess mit bifunktionaler Anode abbildet.

Im Anthrachinon-Prozess wird Wasserstoffperoxid in einem mehrstufigen Verfahren durch die zyklische Reduktion und Oxidation von Anthrachinon gewonnen. Der Prozess benötigt neben Wasserstoff und Strom auch verschiedene Prozesschemikalien sowie thermische Energie. Das Wasserstoffperoxid wird dabei üblicherweise in hohen Konzentrationen (ca. 70 Gewichtsprozent) produziert und für den Transport stabilisiert. Am Anwendungsort erfolgt die Verdünnung, auf die für die Applikation benötigten, 10 Gewichtsprozent. In Szenario A erfolgt die Stromversorgung aus dem deutschen Strommix sowie Wasserstoff aus der Dampfreformierung und die thermische Energie wird durch fossile Energieträger in Form von Dampf bereitgestellt.

Beim elektrochemischen Verfahren wird Wasserstoffperoxid direkt in der geforderten Konzentration von 10 Gewichtsprozent erzeugt. Dadurch entfällt der Transport von hochkonzentriertem H_2O_2 sowie der anschließende Verdünnungsschritt. Der Prozess kann in zwei Betriebsmodi erfolgen: mit Wasserstoff oder Wasser als Oxidationsmittel an der Anode. In Szenario A (Status Quo) erfolgt die Energieversorgung des elektrochemischen Verfahrens über den aktuellen Strommix in Deutschland, der einen hohen Anteil fossiler Energieträger aufweist. Wasserstoff wird analog zum Anthrachinon-Prozess durch Dampfreformierung bereitgestellt. Sauerstoff stammt aus einer Luftzerlegungsanlage (Air Separation Unit, ASU), deren Strombedarf ebenfalls aus dem konventionellen Energiemix gedeckt wird.

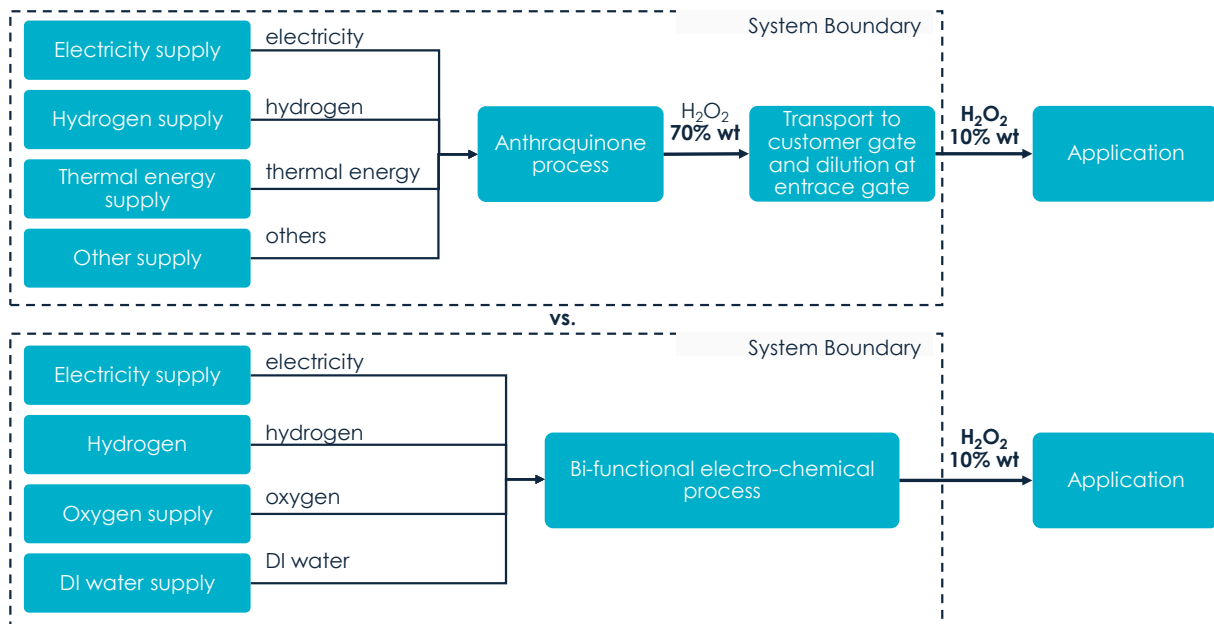


Abbildung 1: Vergleich der Systemgrenzen für die Produktion von Wasserstoffperoxid (H_2O_2) im Anthrachinon-Prozess und im bi-funktionalen elektrochemischen Verfahren. Während der Anthrachinon-Prozess die Cradle-to-Gate-Grenze am Werkstor des Kunden mit einer nachfolgenden Verdünnung setzt, umfasst die Systemgrenze des elektrochemischen Verfahrens die direkte Bereitstellung von 10 Gew.-% H_2O_2 am Anwendungsort, wodurch Transport und Verdünnung außerhalb der Systemgrenze entfallen.

Szenario B analysiert das gleiche System wie in Szenario A, jedoch unter veränderten Bedingungen in der Energiebereitstellung. Ziel ist es, den Einfluss einer erneuerbaren Energieversorgung auf die Umweltwirkungen beider Produktionsrouten für Wasserstoffperoxid zu untersuchen. Während der Anthrachinon-Prozess und die elektrochemische Synthese unverändert bleiben, wird in diesem Szenario die Energieversorgung an ein potenzielles zukünftiges Strom- und Wasserstoffsystem angepasst.

Die wichtigsten Änderungen gegenüber Szenario A sind:

- Elektrizität stammt vollständig aus erneuerbaren Quellen (z. B. Wind, Solar, Wasserkraft).
- Wasserstoff wird durch Elektrolyse aus erneuerbarem Strom bereitgestellt.
- Thermische Energie in Form von Dampf wird über einen elektrischen Boiler bereitgestellt.
- Die Luftzerlegungsanlage wird ebenfalls mit dem erneuerbaren Elektrizitätsmix betrieben.

Diese Anpassungen ermöglichen eine Bewertung der Sensitivität beider Prozesse gegenüber der Energiebereitstellung und zeigen, in welchem Umfang die Umweltwirkungen durch den Einsatz erneuerbarer Energien reduziert, werden können.

Methode der Wirkungsabschätzung

Die Wirkungsabschätzung erfolgt gemäß den Environmental Footprint (EF) v3.1 Methodenvorgaben⁵, wobei der Fokus auf der Kategorie Klimawandel liegt. Diese Kategorie wird als primärer Indikator betrachtet, da sie für die Bewertung der Treibhausgasemissionen und deren Einfluss auf den CO₂-Fußabdruck der untersuchten Prozesse entscheidend ist. Zusätzlich werden alle weiteren relevanten Umweltwirkungen nach der EF v3.1 Methodik mitberücksichtigt, um eine ganzheitliche Bewertung zu gewährleisten und potenzielle Burden-Shifting-Effekte zwischen verschiedenen Umweltkategorien zu vermeiden.

1.1.2. Sachbilanz

Die Sachbilanz (Life Cycle Inventory, LCI) ist der zweite wesentliche Schritt in der Ökobilanzierung und dient der Erfassung und Quantifizierung aller relevanten Stoff- und Energieflüsse innerhalb der definierten Systemgrenzen. Gemäß ISO 14040/14044 umfasst sie die Sammlung, Validierung und Aufbereitung von Primär- und Sekundärdaten.

Dieses Kapitel beschreibt die Systemgrenzen der Studie und stellt die Datenquellen für das Vordergrund- und Hintergrundsystem dar. Dabei werden zwei Szenarien analysiert, die sich insbesondere in der Art der Energieversorgung unterscheiden. Anschließend werden die angewandten Allokationsverfahren und Abschneidekriterien erläutert, um die methodische Vorgehensweise der Sachbilanz transparent darzustellen.

In der Sachbilanz werden die direkt untersuchten Prozesse dem Vordergrundsystem zugeordnet, während die Bereitstellung von Rohstoffen, Energie und Hilfsstoffen durch Hintergrundprozesse abgebildet wird.

In Szenario A umfasst das Vordergrundsystem die Produktion von Wasserstoffperoxid sowohl über den Anthrachinon-Prozess als auch über die elektrochemische Synthese. Das Hintergrundsystem beinhaltet die Bereitstellung von Strom aus dem deutschen Strommix, Wasserstoff aus Dampfreformierung von Erdgas (Steam Methane Reforming - SMR) sowie weitere Prozesschemikalien und Rohstoffe.

In Szenario B bleibt das Vordergrundsystem identisch, jedoch wird die Energieversorgung im Hintergrundsystem angepasst: Strom stammt vollständig aus erneuerbaren Quellen, und Wasserstoff wird durch Elektrolyse aus grünem Strom bereitgestellt. Dadurch kann der Einfluss der Energiebereitstellung auf die Umweltwirkungen beider Produktionsrouten quantifiziert werden. Im Folgenden werden die Datenquellen für das Vordergrund- und Hintergrundsystem beschrieben.

⁵ Valente, A., Sala, S., Ardente, F. Updated characterisation and normalisation factors for the Environmental Footprint (EF) method: EF 3.1 update. (2023)

Vordergrundsystem – Szenario A

- Anthrachinon-Prozess: Die Massen- und Energiebilanzen stammen aus der cm.chemicals Datenbank und bilden den aktuellen Industriestandard für die H₂O₂-Produktion ab.⁶
- Elektrochemischer Prozess: Die Massen- und Energiebilanzen wurden gemeinsam mit den Projektpartnern entwickelt und basieren auf technischen Messungen aus Labortests.
- Transportdistanzen: Die Transportmodelle basieren auf mittleren Transportdistanzen aus der Ecoinvent-Datenbank für Wasserstoffperoxid.

Vordergrundsystem – Szenario B

Die Massen- und Energiebilanzen der Produktionsprozesse aus Szenario A bleiben in Szenario B unverändert. Zusätzlich werden jedoch weitere Prozesse berücksichtigt, um den Einfluss einer erneuerbaren Energiebereitstellung zu analysieren:

- Elektrische Dampferzeugung: Der fossile Dampfkessel wird durch einen elektrischen Dampfkessel mit 98% Umwandlungseffizienz ersetzt⁷, wobei der Energieinhalt des erzeugten Dampfes 2,75 MJ/kg beträgt⁸.
- Erneuerbarer Strommix: Der gesamte Strombedarf wird durch einen zukünftigen Strommix gedeckt, bei dem sich insbesondere der Anteil erneuerbarer Energiequellen erhöht. Die Zusammensetzung basiert auf Szenarien des Umweltbundesamts.⁹
- Wasserstoff aus Elektrolyse: Der in den Prozessen benötigte Wasserstoff wird nicht mehr durch Dampfreformierung von Erdgas, sondern durch Wasserelektrolyse bereitgestellt, mit einer angenommenen Effizienz von 80 %.¹⁰

Hintergrundsystem:

Die Rohstoff- und Energiebereitstellung für die untersuchten Prozesse wird durch aggregierte Datensätze aus etablierten Ökobilanzdatenbanken modelliert.

- Produktion der Rohstoffe: Die Herstellung der benötigten Rohstoffe wird mit aggregierten Datensätzen aus den Ökobilanzdatenbanken von Carbon Minds (Version 2.1, März 2024) und Ecoinvent (Version 3.10) abgebildet. Weitere Details zur Methodik der Datenbanken sind in den jeweiligen Dokumentationen der Anbieter zu finden.

⁶ Carbon Minds, cm.chemicals v2.1 (2024)

⁷ Münich P., Somers J., Metz J., Tillmann U., Oliveira C., Hermanns R., Kalousdian A., Meys R., Bardow A., Winter B., Chemie im Wandel. (2023)

⁸ Althaus H.-J., Chudacoff M., Hischer R., Jungbluth N., Osses M. and Primas A. Life Cycle Inventories of Chemicals. (2007)

⁹ Umweltbundesamt (UBA). Energieziel 2050: 100% Strom aus erneuerbaren Quellen. Dessau-Roßlau, 2010.

¹⁰ Brauns, J., Turek, T. Stand und Entwicklungspotenzial der Wasserelektrolyse zur Herstellung von Wasserstoff aus regenerativen Energien.

- Energiebereitstellung: Alle relevanten Energieprozesse werden mit Ecoinvent Version 3.10 modelliert, mit Ausnahme der in Szenario B definierten Vordergrundprozesse (z.B. erneuerbare Stromversorgung, Elektrolyse, elektrische Dampferzeugung).

Eine detaillierte Übersicht der verwendeten Prozesse und spezifischen Hintergrunddaten befindet sich in Annex A. Falls für Deutschland keine passenden Datensätze verfügbar sind, wird ein alternativer Datensatz ausgewählt, der die Region Europa (RER) oder Global (GLO) repräsentiert.

Allokationsverfahren

Die Allokation in der Ökobilanzierung beschreibt die Zuweisung von Umweltbelastungen auf mehrere Produkte oder Nebenprodukte eines Prozesses gemäß den Anforderungen der ISO 14040/14044. Falls ein Prozess mehrere Produkte erzeugt, müssen dessen Umweltwirkungen entsprechend einer festgelegten Methode verteilt werden.

Die meisten verwendeten Daten basieren auf bereits allokierten Massen- und Energiebilanzen, die aus bestehenden Ökobilanzdatenbanken wie Carbon Minds und Ecoinvent stammen. Die spezifischen Allokationsprinzipien in diesen Datensätzen werden in den jeweiligen Methodikdokumentationen der Datenanbieter detailliert beschrieben.

Im elektrochemischen Prozess entsteht ausschließlich Wasserstoffperoxid als Produkt, sodass keine Allokation erforderlich ist. Alle Umweltwirkungen des Prozesses werden direkt dem H₂O₂-Produkt zugewiesen.

Abschneidekriterien

Die angewendeten Abschneide-Kriterien basieren auf der cm. chemicals Methodik¹¹ und dienen als Leitfaden zur Identifikation und möglichen Vernachlässigung von weniger relevanten Stoff- und Energieflüssen innerhalb des Produktsystems. Ziel ist es, eine effiziente Modellierung zu gewährleisten, ohne die Aussagekraft der Ökobilanz zu beeinträchtigen.

Um sicherzustellen, dass die Systemgrenzen konsistent bleiben, wird der kumulative Beitrag der ausgeschlossenen Flüsse auf weniger als ein Massenprozent der gesamten Eingangsflüsse begrenzt.

Ein Fluss wird ausgeschlossen, wenn:

- Sein Beitrag im Vergleich zu anderen Eingangsflüssen weniger als ein Massenprozent beträgt.
- Er keine wesentliche Relevanz für andere Prozesse innerhalb des untersuchten Produktionssystems hat.

Darüber hinaus wird die Infrastruktur für den Bau der Anlage nicht berücksichtigt, da sie in dieser Phase der Analyse nicht ausreichend bewertet werden kann. In der chemischen

¹¹ Carbon Minds, cm.chemicals methodology v2.1. (2024)

Industrie haben Infrastrukturaufwände in der Regel nur einen geringen Einfluss auf die Umweltbilanz. Aufgrund der frühen Entwicklungsphase des elektrochemischen Verfahrens und der damit verbundenen Skalierungsnachteile wird der Infrastrukturausbau entsprechend der Methodik von Carbon Minds vernachlässigt.¹¹

Diese Abschneide-Kriterien gewährleisten, dass sich die Modellierung auf die wesentlichen Umweltbelastungen konzentriert, während gleichzeitig die Vollständigkeit der Analyse sichergestellt wird.

1.1.3. Ergebnisse der Wirkungsabschätzung

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Umweltbewertung für die beiden Szenarien A (Status Quo) und B (Zukunftsszenario mit erneuerbarer Energiebereitstellung) dargestellt. Die Analyse folgt der EF v3.1 Methodik, wobei der Schwerpunkt auf der Umweltkategorie Klimawandel liegt.

Die Bewertung umfasst die gesamten direkten und indirekten Emissionen, die mit der Herstellung von Wasserstoffperoxid über den Anthrachinon-Prozess und die elektrochemische Route verbunden sind. Um mögliche Effekte der Lastenverschiebung in anderen Umweltkategorien zu vermeiden, werden neben der Klimawirkung auch andere Umweltkategorien nach der EF v3.1 Methodik analysiert.

Szenario A – Status Quo

Abbildung 2 zeigt die Treibhausgasemissionen in kg CO₂-Äquivalenten pro funktionelle Einheit für die Produktion von Wasserstoffperoxid in den drei betrachteten Produktionsrouten. Die dargestellten Beiträge der verschiedenen Energiequellen und Rohstoffe verdeutlichen die Unterschiede in der Umweltbilanz der einzelnen Verfahren.

Die Ergebnisse zeigen, dass die elektrochemischen Produktionsrouten im Vergleich zum konventionellen Anthrachinon-Prozess höhere Treibhausgasemissionen pro funktioneller Einheit verursachen, sofern die aktuelle Energieversorgung des Status quo (Szenario A) zugrunde gelegt wird.

Beim Anthrachinon-Prozess entstehen die größten Treibhausgasemissionen durch die Bereitstellung thermischer Energie sowie durch die Produktion des benötigten Wasserstoffs. Der Stromverbrauch hat nur einen geringen Einfluss, da der Prozess primär durch thermische Energie in Form von Dampf betrieben wird. Der Transport des Wasserstoffperoxids zum Kunden ist unter den gegebenen Bedingungen vernachlässigbar.

Beim elektrochemischen Prozess ist der Stromverbrauch der dominierende Faktor für die Treibhausgasemissionen und macht 80 % der Gesamtemissionen im Betrieb mit Wasserstoff (H₂-Modus) und 90 % im Betrieb mit Wasser (H₂O-Modus) aus. Die Bereitstellung von Sauerstoff trägt in beiden Szenarien mit etwa 11 % zur Klimawirkung bei. Im elektrochemischen Prozess mit Wasserstoff (H₂-Modus) verursacht zudem die Produktion des benötigten Wasserstoffs aus Dampfremformierung rund 9,5 % der Gesamtemissionen.

Insgesamt ist die Energiebereitstellung der maßgebliche Treiber der Treibhausgasemissionen in beiden Produktionsrouten für Wasserstoffperoxid. Während der Anthrachinon-Prozess primär auf thermische Energie angewiesen ist, hängt die Umweltbilanz des elektrochemischen Prozesses maßgeblich vom Stromverbrauch ab.

Besonders entscheidend ist der spezifisch höhere elektrische und thermische Energiebedarf pro kg Wasserstoffperoxid in der elektrochemischen Produktion. Je nach Betriebsart liegt dieser um 55 % (H₂-Modus) bis 103 % (H₂O-Modus) über dem des Anthrachinon-Verfahrens..

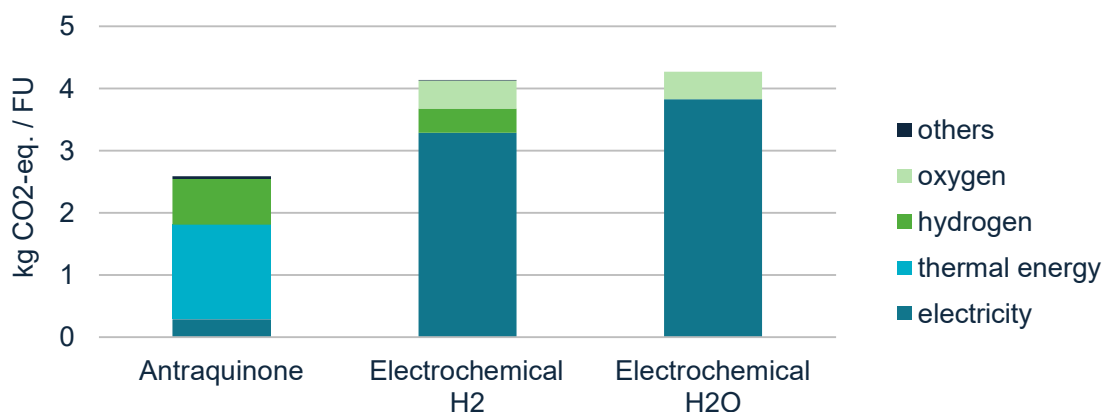


Abbildung 2: Vergleich der Treibhausgasemissionen (kg CO₂-Äquivalente pro funktionelle Einheit) für die Herstellung von Wasserstoffperoxid über das Anthrachinon-Verfahren und zwei elektrochemische Prozessvarianten (H₂- und H₂O-Modus), einschließlich des Beitrags verschiedener Energiequellen und Rohstoffe zur Gesamtbilanz.

Abbildung 3 zeigt die Umweltwirkungen der untersuchten Produktionsrouten für Wasserstoffperoxid über verschiedene Wirkungskategorien hinweg, normiert auf den Anthrachinon-Prozess. Die elektrochemischen Prozesse weisen in den meisten Umweltkategorien höhere Belastungen auf als das etablierte Anthrachinon-Verfahren. Dies ist

primär auf den höheren spezifischen Energiebedarf der elektrochemischen Synthese zurückzuführen, insbesondere auf den hohen Stromverbrauch.

Die Wertschöpfungskette der Stromerzeugung spielt eine entscheidende Rolle für die Umweltwirkungen der elektrochemischen Prozesse. Im hier angenommenen deutschen Strommix (2020) hat insbesondere die Kohleverstromung einen signifikanten Einfluss auf Kategorien wie Süßwasser-Eutrophierung, ionisierende Strahlung auf die menschliche Gesundheit, sowie Ökotoxizität im Süßwasser. So zeigt sich ein besonders auffälliger Unterschied in der Kategorie ionisierende Strahlung, in der die elektrochemischen Prozesse einen deutlich höheren Beitrag aufweisen. Dies ist darauf zurückzuführen, dass der zugrunde gelegte deutsche Strommix aus dem Jahr 2020 noch Atomkraftanteile sowie Importe aus Ländern mit hoher Kernenergieproduktion (z. B. Frankreich) berücksichtigt. Der Anthrachinon-Prozess wird überwiegend wärmebasiert betrieben und Strom spielt nur eine untergeordnete Rolle. Dabei ist die Dampferzeugung für den Anthrachinon-Prozess primär erdgasbasiert und die ionisierende Strahlung somit geringer.

Neben dem Stromverbrauch hat auch der Sauerstoffbedarf der elektrochemischen Prozesse einen erheblichen Einfluss auf bestimmte Umweltkategorien. Rund 50 % der Wassernutzung in den elektrochemischen Szenarien sind auf die Wertschöpfungskette des Sauerstoffs zurückzuführen. Während ein Teil dieses Beitrags aus dem Strombedarf für die Luftzerlegung

stammt, ist der dominierende Faktor die Luftzerlegungsanlage selbst, insbesondere die Verdampfung von in der Luft enthaltener Feuchtigkeit.

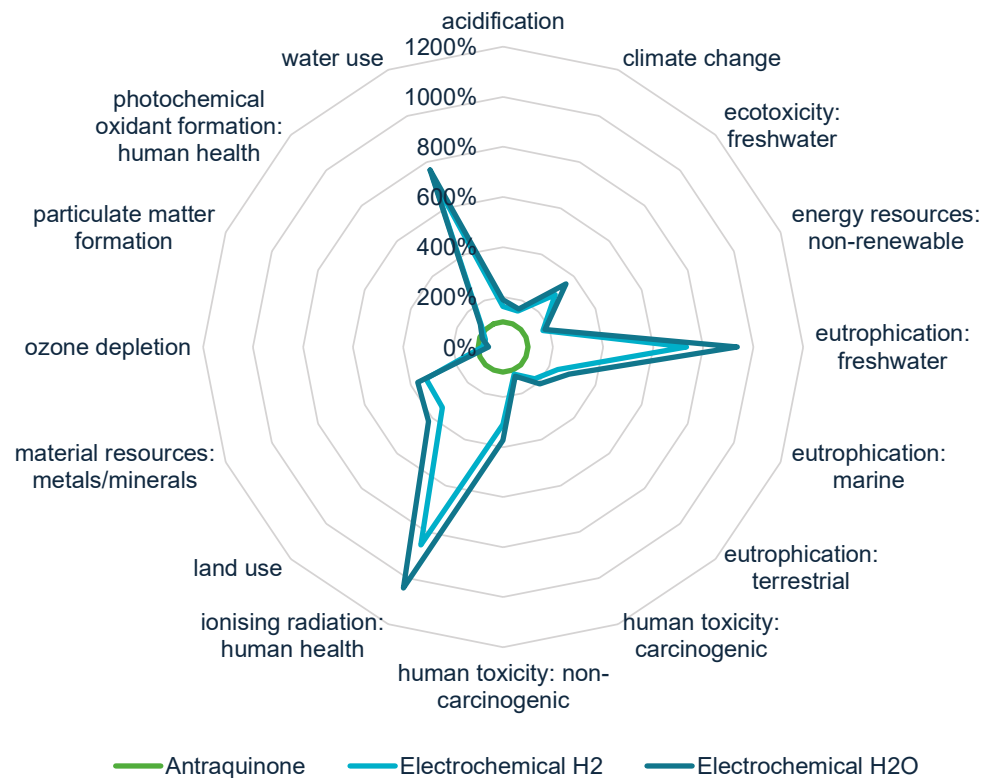


Abbildung 3: Vergleich der Umweltwirkungen verschiedener Produktionsrouten für Wasserstoffperoxid über mehrere Wirkungskategorien hinweg, normiert auf den Anthrachinon-Prozess basierend auf den Umweltkategorien der Environmental Footprint (EF) Methode v3.1.

Vergleich der Szenarien

Abbildung 4 zeigt den Vergleich der Treibhausgasemissionen (kg CO₂-Äquivalente pro funktionelle Einheit) für die Produktion von Wasserstoffperoxid in zwei Szenarien:

- Status Quo: Nutzung des aktuellen Strommixes mit fossilen Energieträgern.
- Erneuerbare Energien: Versorgung mit einem vollständig erneuerbaren Strommix.

Dargestellt sind die Ergebnisse für den Anthrachinon-Prozess und den elektrochemischen Prozess, wobei Letzterer als Mittelwert der beiden Betriebsmodi (H₂- und H₂O-Anode) modelliert wurde.¹²

In dem Szenario mit einer erneuerbaren Energieversorgung sinken die Emissionen beider Verfahren erheblich. Der elektrochemische Prozess profitiert besonders stark von der Dekarbonisierung des Strommixes, da seine Umweltbilanz maßgeblich vom CO₂-Fußabdruck

¹² Der Betriebsmodi-Mix des elektrochemischen Prozesses basiert auf Modellierungen aus Arbeitspaket AP 4.3, die den optimalen Anteil der Betriebsarten in Abhängigkeit vom Wasserstoffpreis bestimmen.

des verwendeten Stroms abhängt. Dennoch bleibt der Anthrachinon-Prozess auch unter erneuerbaren Bedingungen leicht im Vorteil, da der elektrochemische Prozess trotz emissionsfreier Stromversorgung einen höheren absoluten Energiebedarf aufweist. Dennoch bleibt der Anthrachinon-Prozess auch unter erneuerbaren Bedingungen leicht im Vorteil, da der elektrochemische Prozess trotz emissionsfreier Stromversorgung einen höheren absoluten Energiebedarf aufweist. Allerdings verringert sich die Differenz zwischen den beiden Prozessen, da im erneuerbaren Energieszenario der strombasierte Energiebedarf in beiden Fällen dominiert: Im Anthrachinon-Prozess wird Erdgas für die Dampferzeugung durch einen elektrischen Boiler ersetzt, während die Wasserstoffbereitstellung von Dampfreformierung auf Elektrolyse umgestellt wird. Dadurch wird der Gesamtenergieverbrauch stärker durch den Strombedarf bestimmt, was die Unterschiede zwischen den beiden Produktionsrouten reduziert. Während diese Entwicklung insbesondere die Treibhausgasemissionen beeinflusst, wirkt sich die verstärkte Elektrifizierung auch auf andere Umweltkategorien aus. Weitere Umweltkategorien sind am Anhang dargestellt.

Die geringe Differenz in Szenario B verdeutlicht, dass eine vollständig erneuerbare Stromversorgung entscheidend für den ökologischen Betrieb des elektrochemischen Verfahrens ist. Im Folgenden wird eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt, um die Auswirkungen des elektrischen Energiebedarfs der elektrochemischen Prozesse auf die Umweltbewertung weiter zu untersuchen.

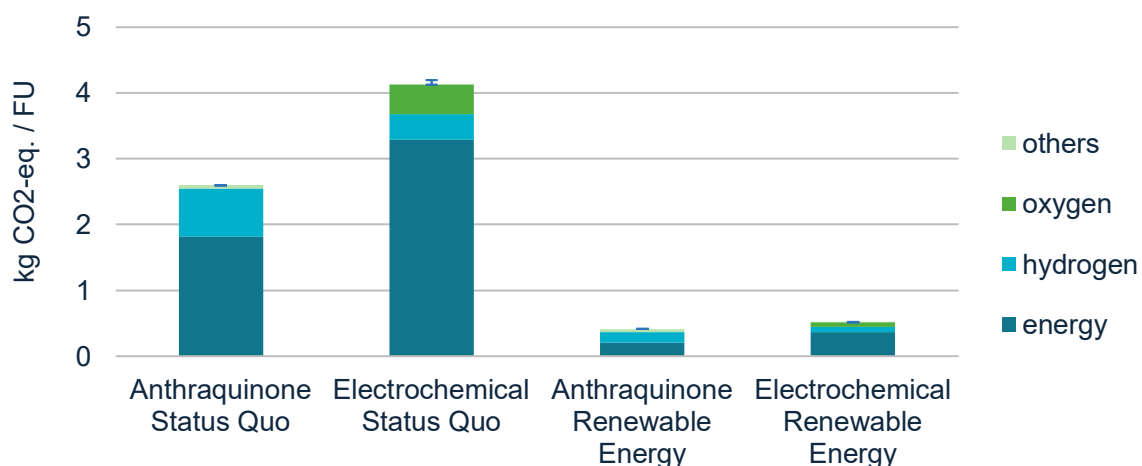


Abbildung 4: Vergleich der Treibhausgasemissionen für die Produktion von Wasserstoffperoxid im Status-quo-Szenario und unter erneuerbaren Energiebedingungen. Die Ergebnisse für den Elektrochemischen Prozess berücksichtigen einen Betriebsmodus mit bifunktionaler Anode bei einem vorliegenden Wasserstoffpreis von 8 €/kg. Der Fehlerbalken zeigt den Einfluss einer Betriebsweise mit einem niedrigeren Wasserstoffpreis und häufigerem Betriebswechsel.

1.1.4. Interpretation

Sensitivitätsanalyse

Der Strombedarf im elektrochemischen Prozess ist der entscheidende Faktor für die Umweltbelastung des Verfahrens, da er sowohl die Treibhausgasemissionen als auch weitere Umweltwirkungen maßgeblich beeinflusst. Diese Sensitivitätsanalyse vergleicht den experimentell gemessenen Strombedarf aus Labortests mit theoretischen und literaturbasierten Werten, um das Optimierungspotenzial des Prozesses zu bewerten.

Theoretisches Minimum nach Faraday

Zur Berechnung des minimalen Strombedarfs wurde das Faraday'sche Gesetz unter Berücksichtigung der Redox-Gleichungen an der Kathode und Anode sowie deren Standardpotenziale angewendet¹³. Theoretisch ergibt sich für die elektrochemische H₂O₂-Produktion mit Wasser als Oxidationsmittel ein um 79 % niedrigerer Strombedarf als der experimentell ermittelte Laborwert. Diese Differenz zeigt das erhebliche Potenzial für Effizienzsteigerungen, das durch verbesserte Zellarchitekturen und Prozessoptimierung ausgeschöpft werden könnte.

Vergleich mit Literaturwerten

Ein Vergleich mit der Studie von Xia et al. (2019)¹⁴ bestätigt diese Diskrepanz. Xia et al. untersuchten die direkte elektrochemische Synthese von hochreinen H₂O₂-Lösungen unter Verwendung einer festen Elektrolytmembran und wendeten zur genaueren Bewertung eine iR-Korrektur (Ohmsche Widerstandskorrektur) an. Diese Korrektur eliminiert den Einfluss des internen Zellwiderstands auf die gemessene Zellspannung und zeigt den tatsächlichen Strombedarf für die elektrochemische Umwandlung.

- Ohne Widerstandsverluste liegt der Strombedarf 59 % unter den in diesem Projekt ermittelten Laborwerten.
- Wird der Ohmsche Widerstand zurückgerechnet, stimmen die Werte von Xia et al. mit den Labormessungen dieses Projekts überein.

Diese Analyse verdeutlicht, dass Widerstandsverluste in der Zellarchitektur einen zentralen Optimierungsfaktor darstellen. Gleichzeitig muss berücksichtigt werden, dass eine vollständige Vernachlässigung dieser Verluste nicht repräsentativ für industrielle Bedingungen ist.

¹³ Talukder, N., Wang, Y., Nunna, B.B., Lee, E.S. An In-Depth Exploration of the Electrochemical Oxygen Reduction Reaction (ORR) Phenomenon on Carbon-Based Catalysts in Alkaline and Acidic Mediums. (2022)

¹⁴ Xia Ch., Xia Y., Zhu P., Fan L., Wang H., 2019, Direct electrosynthesis of pure aqueous H₂O₂ solutions up to 20% by weight using a solid electrolyte (Supplementary Materials Note 4)

Insgesamt zeigt die Analyse, dass sowohl das thermodynamische Optimum als auch die Ergebnisse von Xia et al. eine Reduktion des Strombedarfs als möglich erscheinen lassen. Allerdings sind solch geringe Werte in der industriellen Umsetzung oft nicht realistisch, da Skalierungseffekte, Materialeigenschaften und Betriebsbedingungen berücksichtigt werden müssen. Die frühe Entwicklungsphase der elektrochemischen Zelle zur Wasserstoffperoxidproduktion lässt jedoch erkennen, dass Effizienzsteigerungen im Strombedarf ein wesentliches Optimierungspotenzial darstellen, das sich maßgeblich auf die Umweltbilanz auswirkt.

Fazit, Empfehlung und Limitierung

Diese Ökobilanz untersucht die Umweltwirkungen der konventionellen Anthrachinon-Produktion von Wasserstoffperoxid im Vergleich zu einer neuen elektrochemischen Produktionsroute. Die Ergebnisse zeigen, dass der elektrische Strombedarf des elektrochemischen Verfahrens die Umweltbilanz maßgeblich beeinflusst und derzeit eine zentrale Herausforderung für dessen Weiterentwicklung darstellt. Für eine faire Vergleichbarkeit wurden in dieser Analyse jedoch identische Rahmenbedingungen für beide Prozesse angesetzt.

Der elektrochemische Prozess verfolgt das Ziel, eine dezentrale Herstellung von H_2O_2 direkt am Anwendungsort zu ermöglichen. Dezentrale Systeme unterliegen oft anderen wirtschaftlichen und infrastrukturellen Rahmenbedingungen als großtechnische Anthrachinon-Anlagen, die meist in integrierten Chemieparcs betrieben werden. In spezifischen Anwendungsfällen, etwa der direkten Kopplung an erneuerbare Energiequellen, könnte das elektrochemische Verfahren eine flexible und lokal emissionsfreie Alternative darstellen – entweder als Ergänzung oder als potenzieller Ersatz konventioneller Produktionswege.

Für fundierte Investitionsentscheidungen sollte die Ökobilanzierung nicht nur generische Technologievergleiche liefern, sondern gezielt auf spezifische Anwendungsfälle und Standortbedingungen eingehen. Eine detaillierte Bewertung unter realistischen Betriebsbedingungen ist erforderlich, um das Potenzial der dezentralen H_2O_2 -Produktion präziser zu erfassen und mögliche Vorteile in spezifischen Nutzungsszenarien herauszuarbeiten.

Diese Studie basiert auf experimentellen Labordaten für den elektrochemischen Prozess, die mit Unsicherheiten hinsichtlich Skalierungseffekten und technischer Optimierung behaftet sind. Zudem wurden industrielle Randbedingungen wie die Integration in bestehende Prozesse oder die Infrastrukturverfügbarkeit nicht im Detail betrachtet.

Die Analyse der Sensitivität des Strombedarfs zeigt, dass eine Reduktion der elektrischen Verluste und Prozessoptimierung wesentliche Hebel zur Verbesserung der Umweltbilanz des elektrochemischen Verfahrens darstellen. Besonders die Widerstandsverluste innerhalb der Zelle, wie sie in der Literatur (z. B. Xia et al., 2019) durch iR-Korrekturen quantifiziert wurden, bieten ein klares Optimierungspotenzial. Gleichzeitig zeigt sich, dass die Unterschiede zwischen den Produktionsrouten durch eine erneuerbare Energieversorgung erheblich reduziert werden. Zukünftige Analysen sollten daher nicht nur die Umweltbilanz, sondern auch wirtschaftliche, technische und infrastrukturelle Faktoren berücksichtigen, um eine ganzheitliche Bewertung des elektrochemischen Verfahrens zu ermöglichen.

2. Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

50% Stelle für ökologische Bewertung des elektrochemischen Prozesses.

3. Angemessenheit und Notwendigkeit der geleisteten Aufwände

Die Arbeiten und finanziellen Mittel wurden entsprechend der Arbeitspakete durchgeführt und verwendet sowie an den Projektergebnissen ausgerichtet und waren notwendig und angemessen.

4. Nutzung und Verwertbarkeit der Ergebnisse

Die im Vollantrag projektierte wirtschaftliche und wissenschaftliche Verwertbarkeit bei Carbon Minds besteht unverändert weiter.

Im Projekt wurde die Erweiterung der firmeneigenen LCA-Datenbank um alternative Prozesstechnologien angestoßen – ein wichtiger Schritt, um neue Dienstleistungen wie die Bewertung von Reduktionszielen und Transformationspfaden in der chemischen Industrie anzubieten. Zudem wurde der Lifecycle-Ansatz in technikorientierten Fachkreisen erfolgreich platziert, wodurch Carbon Minds seine Sichtbarkeit als datenbasierter Nachhaltigkeitspartner gestärkt und die Relevanz von Umweltbewertungen in frühen Technologiephasen betont hat.

5. Fortschritt des Stands der Technik während der Projektlaufzeit

Auf dem Bereich der Ökobilanzierung von elektrochemischen Prozessen zur Direktsynthese von Wasserstoffperoxid sind keine Fortschritte während der Projektdurchführung bekannt geworden.

6. Veröffentlichung der Ergebnisse

Datum:	Titel:	Art der Publikation:
April 2023	Understanding the demand of hydrogen and resulting greenhouse gas emissions in the German chemical industry: a bottom-up modeling approach	Poster Präsentation auf dem Hydrogen Colloquium, Aachen, 2023
Mai 2024	An environmental assessment of electrochemical hydrogen peroxide synthesis for enhanced sustainability in propylene oxide production	Präsentation auf dem Hydrogen Colloquium Aachen, 2024