

Anhang 4.2 Abschätzung gefasster Lösungsmittlemissionen Rev. 1

Abschätzung gefasster Lösungsmittlemissionen

Rationale: Vorgehen Abschätzung des C-Massenstroms [kg/h] an den Equipments

Vorgehen: Ermittlung der Emission über maximale Sättigung (Überschätzung) und Volumensverdrängung (Tankvolumen oder Belüftung).

Annahme: Druck Umgebungsdruck, Verhalten von DMSO wie ein ideales Gas.

Quellen: Modellierung des Partialdrucks bei beschriebenen Bedingungen:

Gmehling, J., Onken, U., Arlt, W., Grenzheuser, P., Weidlich, U., Kolbe, B., & Rarey, J. (Eds.).

(1991 - 2014). *Chemistry Data Series: Volume I. Vapor-Liquid equilibrium data collection*. DECHEMA,

Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V.

Verwendete Teile : Part 1, Part 1a, Part 1b

Partialdrücke: Modellierte Partialdrücke

DMSO Konzentrationen im Prozess [%]	Temperatur T [°C]	Partialdruck p_{DMSO} [Pa]
5	25	0,014
10	25	0,039
10	35	0,093
50	40	8,043
50	80	91,520
80	20	17,497
80	25	25,242
100	25	80,173

Konstanten für Berechnung

Molare Masse (DMSO) (M_{DMSO})	78,13	g/mol
Molare Masse (Kohlenstoff) ($M_{\text{Kohlenstoff}}$)	12	g/mol
Gaskonstante R	8,3145	J/mol/K
Luftdruck (p_{System})	100000	Pa
Temperatur (T_0)	273,15	K
Luftdruck (p_0)	101325	Pa

Errechnung der Daten

Für die Berechnung des C-Massensstroms muss die erwartete DMSO Konzentration (β_{DMSO}) in der Atmosphäre für die einzelnen Equipments errechnet werden.

Dazu wird der oben spezifizierte Partialdruck des DMSO verwendet um über die ideale Gasgleichung die Konzentration zu berechnen. Hierzu ist eine Umformung der idealen Gasgleichung notwendig.

$$(1) p_{DMSO} \cdot V = n_{DMSO} \cdot R \cdot T$$

$$(2) p_{DMSO} = \frac{n_{DMSO}}{V} \cdot R \cdot T$$

Umstellen nach Stoffmengenkonzentration: $c_{DMSO} = \frac{n_{DMSO}}{V}$

$$(3) c_{DMSO} = \frac{p_{DMSO}}{R \cdot T}$$

Von der Stoffmengenkonzentration zur Massenkonzentration: $\beta_{DMSO} = c_{DMSO} \cdot M_{DMSO}$

Daraus ergibt sich die Formel für die **Massenkonzentration von DMSO Gas** (β_{DMSO}) in der Atmosphäre des Equipments.

$$(4) \beta_{DMSO} = \frac{p_{DMSO} \cdot M_{DMSO}}{R \cdot T}$$

Um die **Massenkonzentration DMSO Gas** unter Normalbedingungen ($\beta_{N DMSO}$) zu errechnen wird folgende Formel verwendet.

$$(5) \beta_{N DMSO} = \frac{\beta_{DMSO} \cdot p_{System} \cdot T}{p_0 \cdot T_0}$$

Der **Massenstrom der einzelnen Equipments** (siehe Liste Emission einzelne Equipments) ($\dot{m}$) kann mit der Massenkonzentration DMSO Gas unter Normalbedingungen ($\beta_{N DMSO}$), und der molaren Masse von Kohlenstoff ($M_{Kohlenstoff}$) und DMSO (M_{DMSO}) sowie dem je Abluftstrom ($\dot{V}$) ermittelt werden.

$$(6) \dot{m} = \frac{\beta_{N DMSO} \cdot 2 \cdot M_{Kohlenstoff}}{M_{DMSO}} \cdot \dot{V}$$

Die Summe der Massenströme stellt die maximale gleichzeitige Emission im Betrieb dar, im realen Betrieb wird die Emission geringer ausfallen.

Liste Emission einzelne Equipments

Equipment	Quelle	Beschreibung Arbeitsschritte	Beschreibung der Emissionen im Betriebsverlauf (pro Woche)	Abgeschätzte Dauer der Emission [h]	Häufigkeit pro Woche []	Maximale DMSO Konzentrationen in Equipment [%]	Maximale Temperatur im Equipment (T) [K]	Volumenstrom (V _{DMSO}) Abluft pro Stunde durch Arbeitsschritte [Nm³/h]	Massenstrom (m) [kg C/h]
									0,0055452
									0,0055452
									0,0055452
									0,0038025
									0,0000036
									0,0000177
									0,0000702
									0,0000009
									0,0000009
									0,0000001
									0,0000001
									0,0000177
									0,0000702
									0,0000009
									0,0000009
									0,0000001
									0,0000001
									0,0002651
									0,0002651
									0,0002651
									0,0000102
									0,0000000
									0,0001276
									0,0000000
									0,0011420
									0,0000000
Summe:									0,023

Einzelne Schritte der Produktion geben Rückschlüsse auf den Herstellungsprozess. Aus Gründen des Betriebsgeheimnisses wurden diese daher unkenntlich gemacht.