ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ (Δ.Π.Μ.Σ.)

"ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΥΛΙΚΩΝ"

ΑΝΑΛΥΣΗ ΚΥΚΛΟΥ ΖΩΗΣ ΝΑΝΟΫΛΙΚΩΝ

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΠΑΝΑΓΙΩΤΑ-ΠΑΡΑΣΚΕΥΗ Γ. ΠΑΠΑΓΕΩΡΓΙΟΥ
Διπλωματούχου Μηχανικού Περιβάλλοντος, ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ

ΕΠΙΒΛΕΨΗ:
Κ. ΧΑΡΙΤΙΔΗΣ
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

ΑΘΗΝΑ, Οκτώβριος 2018

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ (Δ.Π.Μ.Σ.)

"ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΥΛΙΚΩΝ"

ΑΝΑΛΥΣΗ ΚΥΚΛΟΥ ΖΩΗΣ ΝΑΝΟΫΛΙΚΩΝ

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΠΑΝΑΓΙΩΤΑ-ΠΑΡΑΣΚΕΥΗ Γ. ΠΑΠΑΓΕΩΡΓΙΟΥ
Διπλωματούχου Μηχανικού Περιβάλλοντος, ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ

ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΕΠΙΤΡΟΠΗ:

Κ. ΧΑΡΙΤΙΔΗΣ, *Καθηγητής Ε.Μ.Π.*
Κ. ΤΣΑΚΑΛΑΚΗΣ, *Καθηγητής Ε.Μ.Π.*
Λ. ΖΟΥΜΠΟΥΛΑΚΗΣ, *Καθηγητής Ε.Μ.Π.*

ΑΘΗΝΑ, Οκτώβριος 2018

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η παρούσα εργασία αποτελεί διπλωματική εργασία στα πλαίσια του μεταπτυχιακού προγράμματος «Επιστήμη και Τεχνολογία υλικών» της Σχολής Χημικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Πριν την παρουσίαση των αποτελεσμάτων αισθάνομαι την υποχρέωση να ευχαριστήσω ορισμένους ανθρώπους που συνεργάστηκα μαζί τους και έπαιξαν πολύ σημαντικό ρόλο στην πραγματοποίηση της μεταπτυχιακής μου εργασίας.

Πρώτον απο όλους θέλω να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας, Καθηγητή κ. Κωνσταντίνο Χαριτίδη για την πολύτιμη καθοδήγηση και την εμπιστοσύνη που μου έδειξε.

Στην συνέχεια θα ήθελα να ευχαριστήσω ιδιαίτερα την κα Ειρήνη Κανελλοπούλου, ΕΤΕΠ ΕΜΠ και τον Δρ. Αθανάσιο Μοροζίνη, μεταδιδακτορικό ερευνητή, οι οποίοι στάθηκαν σημαντικοί αρωγοί στην προσπάθεια μου και συνέβαλαν ουσιαστικά στην ολοκλήρωση αυτής της εργασίας.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες στην κα Βάσω Στεργίου, επίσης μεταπτυχιακή φοιτήτρια του ΔΠΜΣ «Επιστήμη και Τεχνολογία Υλικών» για την πολύτιμη συνεργασία μας.

Τέλος, θέλω να ευχαριστήσω τους γονείς μου Ξανθή και Γιώργο, καθώς και τους αδερφούς μου Γιάννη και Πέτρο, που μου προσέφεραν την απαραίτητη ηθική συμπαράσταση για την ολοκλήρωση της μεταπτυχιακής μου εργασίας.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Κατά την παρούσα μεταπτυχιακή εργασία αναπτύχθηκε ένα εργαλείο αποτίμησης ενδεχόμενων κινδύνων για το περιβάλλον και την ανθρώπινη υγεία που μπορούν να προκύψουν από τις διεργασίες σύνθεσης νανοϋλικών και από τα νανοϋλικά ως τελικά προϊόντα.

Η ανάλυση του κύκλου ζωής (Life cycle assessment-LCA) ενός προϊόντος ή μιας διεργασίας δημιουργεί ένα μοντέλο προσομοίωσης το οποίο περιγράφει όσο πιο ρεαλιστικά γίνεται ένα σύστημα ή ένα προϊόν. Ο σχεδιασμός του εργαλείου βασίστηκε στις αρχές της LCA και με την βοήθεια της Recipe2016, μιας βάσης δεδομένων η οποία παρέχει παράγοντες χαρακτηρισμού στοιχείων και ενώσεων αντιπροσωπευτικούς σε παγκόσμιο επίπεδο, υπολογίστηκε το αποτύπωμα του προϊόντος στο περιβάλλον και στην ανθρώπινη υγεία.

Πιο συγκεκριμένα, εξετάστηκαν δύο κατηγορίες νανοϋλικών που παρουσιάζουν τεράστιο επιστημονικό ενδιαφέρον, τα πολυμερικά νανοσφαιρίδια και οι νανοσωλήνες άνθρακα (Carbon Nanotubes, CNTs). Μελετήθηκε η σύνθεση 50g συμπολυμερούς πολυμεθακρυλικού οξέος με διμεθακρυλικό εστέρα της αιθυλενογλυκόλης και αφού βρέθηκαν όλοι οι παράγοντες χαρακτηρισμού της κάθε ένωσης και ουσίας που συμμετέχει στην σύνθεση του, αλλά και οι παράγοντες χαρακτηρισμού της ενέργειας που καταναλώθηκε κατά την σύνθεση, με την βοήθεια του εργαλείου υπολογίστηκε το συνολικό αποτύπωμα των 50g πολυμερικών νανοσφαιριδίων στο περιβάλλον και στην ανθρώπινη υγεία. Η ίδια διαδικασία ακολουθήθηκε και για την σύνθεση 15g νανοσωλήνων άνθρακα και υπολογίστηκε το αποτύπωμα 15g CNTs στο περιβάλλον και στην ανθρώπινη υγεία. Τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν και διαπιστώθηκε ότι τα 15g CNTs επιβαρύνουν περισσότερο το περιβάλλον και την ανθρώπινη υγεία συγκριτικά με τα πολυμερικά νανοσφαιρίδια.

Ο σχεδιασμός και η ανάπτυξη του εργαλείου-LCA πραγματοποιήθηκε με την βοήθεια του προγράμματος MS Excel.

ABSTRACT

In this postgraduate thesis, a tool has been developed to assess the potential risks to the environment and human health that can arise from the synthesis processes of nanomaterials and from nanomaterials as end products.

The Life Cycle Assessment (LCA) of a product or process creates a simulation model that describes as realistically as possible a system or product. The design of the tool was based on the principles of the LCA, and with the help of "Recipe2016", a database that provides global data about emission factors, the product's footprint on the climate change and human health was calculated.

In particular, two classes of nanomaterials of enormous scientific interest have been examined, polymeric nanospheres and carbon nanotubes (CNTs). We studied the synthesis of 50 g of P(MAA-co-EGDMA) and after all the characterization factors of each compound and substance involved in its synthesis as well as the energy characterization factors consumed in the synthesis were studied, we calculated the total impact of 50g of nanoparticles in the climate change and human health. The same procedure was followed for the synthesis of 15g of carbon nanotubes and we calculated the impact of 15g CNTs in the climate change and human health. We compared the results and it was found that 15g of CNTs negatively impact the climate change and human health compared to polymeric nanospheres.

The design and development of the LCA tool was carried out with the help of the MS Excel program.

Περιεχόμενα

Κατάλογος πινάκων 2

Κατάλογος εικόνων 4

Κατάλογος σχημάτων 5

Κατάλογος διαγραμμάτων 6

Εισαγωγή 7

Κεφάλαιο 1^{ο} 8

Ανάλυση κύκλου ζωής 8

1.1 Γενικά 8

1.2 Ιστορική Αναδρομή και βασικές αρχές 9

Κεφάλαιο 2^{ο} 16

Νανοτεχνολογία & Νανοϋλικά 16

2.1 Ιστορική αναδρομή 16

2.2 Νανοτεχνολογία 17

2.3 Νανοϋλικά και τεχνικές σύνθεσής τους 18

Κεφάλαιο 3^{ο} 22

Ανάλυση κύκλου ζωής στην νανοτεχνολογία στα νανοϋλικά 22

3.1 Υπολογισμός αποτυπώματος των πρώτων υλών και των διεργασιών παραγωγής των νανοσωματιδίων στην ανθρώπινη υγεία και στο περιβάλλον 22

3.2 Μοντελοποίηση διαδικασιών υπολογισμού αποτυπώματος και δημιουργία αλγορίθμου 24

1.3 Case Studies 28

Κεφάλαιο 4^{ο} -Σχεδιασμός εργαλείου LCA 59

Κεφάλαιο 5^{ο}-Συμπεράσματα 62

Κεφάλαιο 6^{ο}- Προτάσεις για το μέλλον 63

Παράρτημα 64

Κατάλογος πινάκων

Πίνακας 3.1: Συνθήκες *σνθεσης 50g P(MAA-co-EGDMA)*

Πίνακας 3.2: *Κατηγορίες ενδιάμεσων κατηγοριών με τις μονάδες τους και οι συντελεστές χαρακτηρισμού τους με τις μονάδες τους*

Πίνακας 3.3: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας του ακετονιτριλίου*

Πίνακας 3.4: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας του μεθακρυλικού οξέος*

Πίνακας 3.5: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας του* διμεθακρυλικού εστέρα της αιθυλενογλυκόλης

Πίνακας 3.6: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) του ακετονιτριλίου*

Πίνακας 3.7*: Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού του ακετονιτριλίου στις τελικές κατηγορίες*

Πίνακας 3.8: *Συντελεστές μετατροπής (Fm→e) του μεθακρυλικού οξέος*

Πίνακας 3.9: *Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού του μεθακρυλικού οξέος στις τελικές κατηγορίες*

Πίνακας 3.10: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) της* διμεθακρυλικής αιθυλενογλυκόλης

Πίνακας 3.11*: Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού της* διμεθακρυλικής αιθυλενογλυκόλης *στις τελικές κατηγορίες*

Πίνακας 3.12*: Συντελεστές μετατροπής της κατανάλωσης νερού*

Πίνακας 3.13: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) της κατανάλωσης ηλεκτρικής ενέργειας*

Πίνακας 3.14: *Σύνθεση 15gr νανοσωλήνων άνθρακα*

Πίνακας 3.15: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας του ακετυλενίου*

Πίνακας 3.16: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας των VOCs*

Πίνακας 3.17: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας των PAHs*

Πίνακας 3.18: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας του Soot*

Πίνακας 3.19: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) του ακετυλενίου*

Πίνακας 3.20: *Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού του ακετυλενίου στις τελικές κατηγορίες*

Πίνακας 3.21: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) των VOCs*

Πίνακας 3.22: *Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού των VOC στις τελικές κατηγορίες*

Πίνακας 3.23: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) των PAHs*

Πίνακας 3.24: *Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού των PAHs στις τελικές κατηγορίες*

Πίνακας 3.25: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) του Soot*

Πίνακας 3.26: *Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού του Soot στις τελικές κατηγορίες*

Πίνακας 3.27: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) της κατανάλωσης ηλεκτρικής ενέργειας*

Κατάλογος εικόνων

Εικόνα 1.1: *Σχηματική περιγραφή της ανάλυσης του κύκλου ζωής*

Εικόνα 1.2: *Σχηματική απεικόνιση των βημάτων του LCA*

Εικόνα 2.1*: Ένα νανόμετρο 1nm ισοδυναμεί με ένα δισεκατομμυριοστό του μέτρου 1/1.000.000.000m.*

Εικόνα 2.2: *Κλίμακα και ονομασία υλικού*

Εικόνα 2.3: *Κατηγορίες νανοϋλικών βάση της διάστασής τους*

Εικόνα 3.1: *Υπολογισμός αποτυπώματος 50gr πολυμερικών νανοσφαιρών στην κλιματική αλλαγή και στην ανθρώπινη υγεία*

Εικόνα 3.2: *Υπολογισμός αποτυπώματος 15gr CNTs στην κλιματική αλλαγή και στην ανθρώπινη υγεία*

Εικόνα 4.1: *Εργαλείο MS Excel*

Εικόνα 4.2: *Συλλογή δεδομένων στο εργαλείο MS Excel*

Εικόνα 4.3: *Αποτελέσματα στο εργαλείο MS Excel*

Κατάλογος σχημάτων

Σχήμα 3.1: *Απλοποιημένο σύστημα παραγωγής*

Σχήμα 3.2: *Σχηματική απεικόνιση των ομάδων νανοσωματιδίων και των διεργασιών τους*

Σχήμα 3.3: *Σχηματική απεικόνιση των 18 κατηγοριών μεσαίων σημείων και των 3 τελικών σημείων*

Σχήμα 3.4: *Διάγραμμα ροής των σταδίων του κύκλου ζωής των πολυμερικών νανοσφαιρών*

Σχήμα 3.5: *Διάγραμμα ροής των σταδίων του κύκλου ζωής των CNTs*

Κατάλογος διαγραμμάτων

Διάγραμμα 3.1: *Ποσοστιαία συνεισφορά των συστατικών σύνθεσης των πολυμερικών νανοσφαιρών στις 2 κατηγορίες εξέτασης*

Διάγραμμα 3.2: *Ποσοστιαία συνεισφορά των συστατικών σύνθεσης των CNTs στις 2 κατηγορίες εξέτασης*

Διάγραμμα 3.3: *Σύγκριση αποτυπώματος των CNTs με τα πολυμερικά νανοσφαιρίδια στο περιβάλλον*

Διάγραμμα 3.4: *Σύγκριση αποτυπώματος των CNTs με τα πολυμερικά νανοσφαιρίδια στην ανθρώπινη υγεία*

Εισαγωγή

Η μελέτη Ανάλυσης Κύκλου Ζωής (Life Cycle Assesment, LCA) ενός προϊόντος είναι ένα σύνολο συστηματικών διεργασιών με σκοπό την συλλογή και εξέταση των στοιχείων εισόδου και εξόδου και των περιβαλλοντικών επιπτώσεων που συνδέονται με το προϊόν αυτό. Η LCA είναι ταυτόχρονα μια συλλογιστική, μια νέα σκέψη, ένα εργαλείο για την παρακολούθηση και αποτίμηση της περιβαλλοντικής επίδοσης ενός προϊόντος ή μιας διεργασίας ή μιας δράσης καθ' όλη την διάρκεια της ύπαρξης του από το σημείο της ανάκτησης της πρώτης ύλης μέχρι της τελικής διάθεσης. Η Νανοτεχνολογία είναι ένα αναπτυσσόμενο πεδίο που σχετίζεται σχεδόν με κάθε κλάδο των θετικών επιστημών και της επιστήμης του μηχανικού και έχει καταστεί το κέντρο του ενδιαφέροντος των επιστημόνων. Μέχρι σήμερα, οι μελέτες που εφαρμόστηκαν για την αξιολόγηση του κύκλου ζωής, LCA στον τομέα των Νανοϋλικών και της Νανοτεχνολογίας είναι ελάχιστες, εξαιτίας της δυσκολίας κατηγοριοποίησης των νανοϋλικών και των μεθόδων σύνθεσής τους και της δυσκολίας προσδιορισμού του συνόλου των πρόσθετων λειτουργιών που πρέπει να λαμβάνονται υπόψη κατά το στάδιο της μοντελοποίησης. Επιπλέον οι τιμές των διαθέσιμων λογισμικών LCA αγγίζουν τις πολλές χιλιάδες ευρώ ετησίως, με αποτέλεσμα οι ερευνητές να μην έχουν εύκολη πρόσβαση στα εργαλεία αυτά. Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία στόχο έχει να αναπτύξει ένα εργαλείο αποτίμησηςενδεχόμενων κινδύνων για το περιβάλλον και για την ανθρώπινη υγεία που μπορούν να προκύψουν απο τις διεργασίες σύνθεσης νανοϋλικών και από τα νανοϋλικά ως τελικά προϊόντα Πιο συγκεκριμένα, σκοπός της παρούσης μεταπτυχιακής εργασίας είναι ο σχεδιασμός και η ανάπτυξη ενός λογισμικού / εργαλείουLCA ανοιχτής πρόσβασης και γρήγορης αποτίμησης με την βοήθεια του προγράμματος MS Excel. Στόχος του είναι ο προσδιορισμός του περιβαλλοντικού αποτυπώματος των διεργασιών δημιουργίας νανοσωματιδίων καθώς και των νανοσωματιδίων ως τελικό προϊόν ελεύθερης πρόσβασης. Το εργαλείο αυτό θα μοντελοποιήσει και θα δημιουργήσει μια βάση δεδομένων με στόχο μια συνεκτική και περιεκτική απογραφή των αποτυπωμάτων των νανοϋλικών και των διεργασιών δημιουργίας αυτών, στο περιβάλλον και στην ανθρώπινη υγεία κατά την διάρκεια του πλήρους κύκλου ζωής τους.

Κεφάλαιο 1ο

Ανάλυση κύκλου ζωής

1.1 Γενικά

Με την όλο και περισσότερο ευαισθητοποίηση μεγάλου μέρους του πληθυσμού για τα θέματα που αφορούν στο περιβάλλον, η ελαχιστοποίηση των περιβαλλοντικών επιπτώσεων από την παραγωγική διαδικασία έχει γίνει μέρος της προσπάθειας πολλών κρατών και οργανισμών. Ενώ μέχρι τώρα η αύξηση του κέρδους και η βελτίωση της ποιότητας του προϊόντος αποτελούσαν τον μοναδικό στόχο κάθε παραγωγικής διαδικασίας, παράγοντες όπως η ελάττωση των ρύπων και η διαχείριση των αποβλήτων αρχίζουν να παίζουν καθοριστικό ρόλο στην λειτουργία των παραγωγικών μονάδων. Η δραστική ελάττωση της παραγωγής βιομηχανικών αποβλήτων, τοξικών ουσιών και καθ' επέκταση αστικών αποβλήτων μπορεί να γίνει μόνο με τον ανασχεδιασμό των προϊόντων και των φυσικών και χημικών διεργασιών. Για την ενσωμάτωση όλων των περιβαλλοντικών περιορισμών στον σχεδιασμό μιας παραγωγικής διαδικασίας ή κάποιας υπηρεσίας απαιτείται νέα προσέγγιση σχεδιασμού με κύριο στοιχείο την αναγνώριση και την κατάταξη των ρυπογόνων ροών από τις διεργασίες (Κορωναίος, 2016). Η ανάλυση του κύκλου ζωής ενός προιόντος ή μιας διεργασίας, είναι η τεχνική εκτίμησης του αποτυπώματός τους στο περιβάλλον και στην ανρθώπινη υγεία, προσδιορίζοντας και ποσοτικοποιώντας την ενέργεια και τα υλικά που χρησιμοποιούνται καθώς και τα απόβλητα που ελευθερώνονται. Σκοπός αυτής της τεχνικής είναι η αξιολόγηση των δυνατοτήτων περιορισμού των περιβαλλοντικών επιπτώσεων και των επιπτώσεων στην ανθρώπινη υγεία, σε συνδυασμό με την ορθολογική χρήση των πρώτων υλών και της ενέργειας (Rebitzera, και συν., 2004).

Εικόνα 1.1: *Σχηματική περιγραφή της ανάλυσης του κύκλου ζωής* (Profile, 2017)

Η SETAC (Society for Environmental Toxicology and Chemistry, 1991) έχει ορίσει την Ανάλυση Κύκλου Ζωής (LCA) σαν "μια τεχνική εκτίμησης των περιβαλλοντικών επιβαρύνσεων που συνδέονται με κάποιο προϊόν, διεργασία ή δραστηριότητα προσδιορίζοντας και ποσοτικοποιώντας την ενέργεια και τα υλικά που χρησιμοποιούνται, καθώς και τα απόβλητα που απελευθερώνονται στο περιβάλλον, εκτιμώντας τις επιπτώσεις από την χρήση της ενέργειας και των υλικών καθώς και των αποβλήτων και αναγνωρίζοντας και εκτιμώντας τις δυνατότητες περιβαλλοντικών βελτιώσεων" (SETAC, 1993). Στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία θα μελετηθεί ο κύκλος ζωής των διεργασιών σύνθεσης νανουλικών καθώς και της χρήσης των νανουλικών ως τελικό προιόν. Με τα νανοϋλικά, η διεξαγωγή αξιολόγησης του κύκλου ζωής καθίσταται δυσχερέστερη σε σχέση με την αξιολόγηση άλλων υλικών, λόγω έλλειψης διαθέσιμων δεδομένων απογραφής για τα υλικά αυτά, δεδομένου ότι οι διαδικασίες παραγωγής τους είναι καινούριες. Οι απελευθερώσεις των νανοσωματιδίων μπορούν να συμβούν κατά την διάρκεια οποιουδήποτε σταδίου του κύκλου ζωής ενός νανοϋλικού με πιθανές επιπτώσεις τόσο στο περιβάλλον, όσο και στην ανθρώπινη υγεία (Salieri, Turner, & Hischier, 2018).

1.2 Ιστορική Αναδρομή και βασικές αρχές

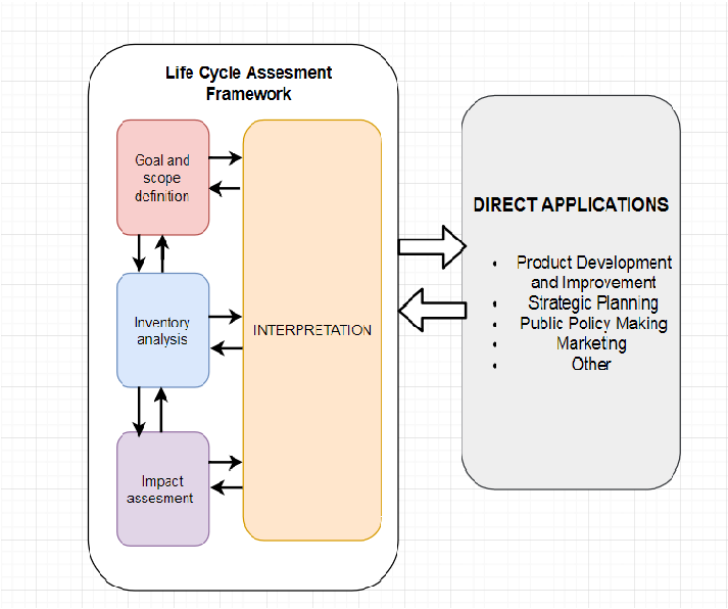
Τα προϊόντα δημιουργούνται για να καλύψουν τις ανθρώπινες ανάγκες και ως γνωστόν κάθε προϊόν έχει έναν κύκλο ζωής, ξεκινώντας απο τον σχεδιασμό του, την δημιουργία του ακολουθούμενη απο εξόρυξη πόρων, την παραγωγή, την χρήση/κατανάλωσή του και τελικά το τέλος της ζωής του (συλλογή, διαλλογή, επαναχρησιμοποίηση, ανακύκλωση, διάθεση αποβλήτων). Η ανάλυση κύκλου ζωής (ΑΚΖ), Life Cycle Analysis (LCA) είναι μια μέθοδος, η οποία ποσοτικοποιεί τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις που συνδέονται με ολόκληρο τον κύκλο ζωής του προϊόντος, της υπηρεσίας ή του τεχνολογικού συστήματος. Οι περιβαλλοντικές επιπτώσεις περιλαμβάνουν τις εκπομπές προς το περιβάλλον μέσα απο την κατανάλωση των πόρων, καθώς και άλλες παρεμβάσεις όπως η χρήση της γης, η εξόρυξη των πόρων κ.α. Αυτές οι εκπομπές και οι καταναλώσεις συμβάλλουν σε ένα ευρύ φάσμα επιπτώσεων, όπως οι κλιματικές μεταβολές, η εξάντληση του στρατοσφαιρικού όζοντος, ο ευτροφισμός, η οξίνιση, η τοξικολογική πίεση στην ανθρώπινη υγεία και τα οικοσυστήματα, η εξάντληση των πόρων καθώς και ο θόρυβος. Έτσι λοιπόν κρίθηκε ως επιτακτική ανάγκη η δημιουργία του εργαλείου του LCA (Rebitzera, et al., 2004). Ένας αποδεκτός ορισμός που μπορεί να αποδοθεί είναι ο ακόλουθος: «Η ανάλυση κύκλου ζωής είναι ένας συστηματικός τρόπος αποτίμησης των περιβαλλοντικών επιπτώσεων από μία μεμονωμένη δραστηριότητα ή μία πλήρη διεργασία παραγωγής, ακολουθώντας μια συγκεκριμένη προσέγγιση. Αυτή η προσέγγιση συνεπάγεται την αναγνώριση και την ποσοτικοποίηση της εκπομπής ρύπων και την κατανάλωση υλικών που επηρεάζουν το περιβάλλον σε όλα τα στάδια του κύκλου ζωής του προϊόντος (ISO, 2006). Το LCA ως μέθοδος εφαρμόζεται και έχει ως σκοπό τον ποσδιορισμό των ευκαιριών βελτίωσης ενός υλικού ή μιας διεργασίας μέσω της αναγνώρισης των περιβαλλοντικά επικίνδυνων σημείων στον κύκλο ζωής αυτού γεγονός που συντελεί στην αειφόρο ανάπτυξη. Επιπλέον, το LCA αναλύει την συμβολή των επιμέρους σταδίων του κύκλου ζωής στο συνολικό περιβαλλοντικό φορτίο, με στόχο την βελτίωση της εκάστοτε διαδικασίας και δημιουργεί

έτσι μια βάση απο τυποποιημένες μετρήσεις με δείκτες απόδοσης που μπορούν να χρησιμοποιηθούν απο επιχειρήσεις για την διαχείριση των υλικών και την λήψη αποφάσεων (Goedkoop, Oele, Leijting, Ponsioen, & Meijer, 2013).

Η ιστορία του εργαλείου αυτού ξεκινάει την δεκαετία του 1960, στις Ηνωμένες Πολιτείες της Αμερικής καθώς παράλληλα και στην Ευρώπη. Στις Ηνωμένες Πολιτείες, η Coca-Cola Company δημιούργησε το λεγόμενο "Resource and Environmental Profile Analysis" (REPA), ένα εργαλείο που υπολόγιζε τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις και την ενέργεια που κατανάλωνε ένα συγκεκριμένο προϊόν της εταιρείας. Μια τέτοια μελέτη ήταν το πρόδρομο στάδιο για την ανάπτυξη της μεθόδου του LCA η οποία πήρε σάρκα και οστά στις αρχές του έτους 1972. Στην Ευρώπη ταυτόχρονα αναπτύχθηκε μια παρόμοια προσέγγιση απο τον Ian Boustead στο Ηνωμένο Βασίλειο. Ο Ian Boustead εφάρμοσε την πρώτη μελέτη του σε μια ποικιλία δοχείων ποτών. Σήμερα, η μέθοδος του LCA είναι ένα καθιερωμένο εργαλείο για την αξιολόγηση των πιθανών επιπτώσεων των προϊόντων στο φυσικό περιβάλλον και στην ανθρώπινη υγεία και εξετάζει ζητήματα διαφορετικά κατά την διάρκεια ολόκληρου του κύκλου ζωής ενός προϊόντος **(Lazarevic & Finnveden, 2013)**.

Η τεχνική του LCA βασίζεται στη δημιουργία ενός μοντέλου, το οποίο διαμορφώνει ο χρήστης προσπαθώντας να περιγράφει όσο το δυνατό πιο ρεαλιστικά ένα σύστημα. Το σύστημα μπορεί να θεωρηθεί ένα στατικό μοντέλο προσομοίωσης που αποτελείται από διεργασίες (unit processes), η κάθε μια από τις οποίες αντιπροσωπεύει μια ή περισσότερες δραστηριότητες. Το LCA ωστόσο παρουσιάζει κάποιες δυσκολίες, η μεγαλύτερη εκ των οποίων είναι η μεγάλη προσπάθεια που απαιτείται για την συλλογή όλων των δεδομένων που χρειάζονται προκειμένου να είναι σε θέση το εργαλείο να δώσει τα σωστά αποτελέσματα (Roland, 2013). Παρά τις δυσκολίες η μέθοδος του LCA χρησιμοποιείται ολοένα και περισσότερο σε παγκόσμιο επίπεδο και στόχο έχει την αξιολόγηση των δυνατοτήτων περιορισμού των περιβαλλοντικών επιπτώσεων σε συνδυασμό με την ορθολογική χρήση των πρώτων υλών και της ενέργειας. Στα αποτελέσματα της LCA θα πρέπει να αξιολογείται η συνέπεια, η πληρότητα και η ευαισθησία των αποτελεσμάτων προκειμένου να εξαχθούν τα συμπεράσματα. Η ανάλυση αβεβαιότητας και η ανάλυση της ποιότητας των δεδομένων πρέπει να περιλαμβάνονται στην τελική αξιολόγηση των αποτελεσμάτων (Sleeswijk, Van Oers, Guinée, Struijs, & Huijbregts, 2008). Στο πλαίσιο μιας μελέτης LCA, μπορούν να διακριθούν τέσσερα διαφορετικά βήματα, εκ των οποίων το πιο χρονοβόρο θεωρείται η ανάλυση και καταγραφή των δεδομένων (Goedkoop, Oele, Leijting, Ponsioen, & Meijer, 2013):

1) Προσδιορισμός στόχου και έκτασης της μελέτης (ISO:14041, 2006)
2) Ανάλυση και καταγραφή δεδομένων για το σύστημα (ISO:14041, 2006)
3) Εκτίμηση των περιβαλλοντικών επιπτώσεων από τη λειτουργία του συστήματος (ISO:14042, 2006)
4) Ερμηνεία μελέτης και εκτίμηση βελτιώσεων του συστήματος (ISO:14043, 2006)



Εικόνα 1.2: *Σχηματική απεικόνιση των βημάτων του LCA*

Τα πρότυπα της μεθόδου LCA σύμφωνα με το ISO είναι τα παρακάτω (ISO, 2006):

• ISO 14040: Αρχές και πλαίσιο
• ISO 14044: Απαιτήσεις και κατευθυντήριες γραμμές

Το ISO 14040 εξετάζει τις αρχές και το πλαίσιο για μια LCA, ενώ το ISO 14044 καθορίζει τις απαιτήσεις και τις κατευθυντήριες γραμμές για τη διεξαγωγή της μελέτης. Τα πρότυπα ISO ορίζονται σε μια μάλλον ασαφή γλώσσα, γεγονός που δυσχεραίνει την μελέτη. Το σημαντικότερο βήμα για τη συμμόρφωση με τα διεθνή πρότυπα ISO είναι η προσεκτική τεκμηρίωση του στόχου, η επιλογή ενός συγκεκριμένου πεδίου εφαρμογής και ο λόγος για τον οποίο πραγματοποιείται αυτή η μελέτη, δηλαδή ποιά είναι τα θέματα που θα εξεταστούν και θα μελετηθούν. Η εκτέλεση μια μελέτης LCA μπορεί να γίνει απο έναν ερευνητή, μια εταιρεία με ποικίλους τρόπους, ωστόσο η αξιολόγηση της ίσως χρειαστεί να γίνει απο ειδικούς μελετητές/εμπειρογνώμονες. Εάν η διαδικασία που θα ακολουθηθεί αποκλίνει απο τα πρότυπα ISO εκ προθέσεως, τότε είναι σαφές οτι τα αποτελέσματα χάνουν την αξιοπιστία τους (Goedkoop, Oele, Leijting, Ponsioen, & Meijer, 2013).

Ο χρήστης του LCA πρέπει να καταγράψει τις εκπομπές και την κατανάλωση πόρων, καθώς και άλλες περιβαλλοντικές ανταλλαγές σε κάθε κρίσιμο στάδιο-φάση του κύκλου ζωής του προϊόντος, από την «κούνια στον τάφο» - συμπεριλαμβανομένων των εξαγώγιμων πρώτων υλών, την κατανάλωση ενέργειας, την κατασκευή, την χρήση, την ανακύκλωση ή την απόλυτη απόρριψη του. Η αντίληψη αυτή αποβλέπει στο να μην αντιμετωπίζονται σε μεμονωμένη βάση κάποια στάδια του κύκλου ζωής, κατά τρόπο ώστε η περιβαλλοντική επιβάρυνση να μη μεταφέρεται σε επόμενο στάδιο. Η εύρεση, κατάταξη και προκαταρκτική ανάλυση όλων των περιβαλλοντικών ανταλλαγών ονομάζεται απογραφή του κύκλου ζωής-

LCI (Rebitzera, et al., 2004). **Life Cycle Inventory Analysis (LCI)** είναι ο ορισμός που χρησιμοποιείται για να περιγράψει τις ενεργειακές εισροές, τις εισροές πρώτων υλών, βοηθητικές εισροές, προϊόντα, παραπροϊόντα, απόβλητα στον αέρα, στο νερό και στο έδαφος, δεδομένα τα οποία προκύπτουν μετά το στάδιο προσδιορισμού του στόχου και του σκοπού που αναφέρθηκε παραπάνω. Υπάρχουν τρεις κύριοι τύποι συστήματος στο LCI (Sleeswijk, Van Oers, Guinée, Struijs, & Huijbregts, 2008):

- Μεταξύ του τεχνικού συστήματος και του περιβάλλοντος,
- Μεταξύ σημαντικών και ασήμαντων διαδικασιών, και
- Μεταξύ του εξεταζόμενου τεχνολογικού συστήματος και άλλων τεχνολογικών συστημάτων

Η συλλογή των δεδομένων αποτελεί την πιο απαιτητική διαδικασία κατά την εκτέλεση μιας LCA καθώς ακόμη και στα λογισμικά που εκτελούν τις μελέτες, όπως για παράδειγμα το SimaPro, δεν είναι διαθέσιμα όλα τα υλικά ή όλα τα δεδομένα. Ωστόσο, όσο περισσότερο χρόνο διαθέτει ένας μελετητής τόσο περισσότερα δεδομένα μπορεί να συλλέξει και ένα συχνό μέσο συλλογής αυτών των δεδομένων αποτελούν τα ερωτηματολόγια. Αυτά τα δεδομένα μπορούν να χωριστούν σε δύο κατηγορίες (Goedkoop, Oele, Leijting, Ponsioen, & Meijer, 2013):

- Νέα δεδομένα: Αναφέρονται σε συγκεκριμένα δεδομένα που πρέπει να αποκτηθούν για τη μοντελοποίηση του συστήματός που εξετάζεται. Τυπικά, πρόκειται για δεδομένα που περιγράφουν ένα συγκεκριμένο σύστημα προϊόντων ή ένα εξειδικευμένο σύστημα παραγωγής.
- Ιστορικά δεδομένα: Αναφέρονται στα δεδομένα που βρίσκονται στην βιβλιογραφία ή στις βάσεις δεδομένων των λογισμικών και αφορούν την δημιουργία των υλικών, την μεταφορά της ενέργειας απο και προς το περιβάλλον, την μεταφορά των προϊόντων και την διαχείριση των αποβλήτων.

Κατά την διαδικασία ορισμού του στόχου και του πεδίου εφαρμογής, πρέπει να διατυπωθούν ερωτήματα και υποθέσεις. Αυτή είναι μια σημαντική φάση δεδομένου ότι η κατάλληλη μέθοδος LCA εξαρτάται από το σκοπό της συγκεκριμένης μελέτης. Έχουν γίνει πολλές προσπάθειες για να περιγραφούν οι κατάλληλοι τύποι LCA. Διακρίνουμε δύο τύπους μεθόδων: την τεκμηριωμένη (attributional) LCA και την επακόλουθη (consequential) LCA. Η attributional LCA εστιάζει στην περιγραφή των φυσικών ροών που σχετίζονται με το περιβάλλον (από και προς αυτό). Η συνεπακόλουθη LCA περιγράφει το τρόπο μεταβολής των σχετικών ροών από και προς το περιβάλλον βάση του στόχου που τίθεται απο τις εταιρείες κατα την λήψη αποφάσεων (Curran, Hellweg, & Beck, 2014). Παρόμοιες διακρίσεις έχουν γίνει σε πολλές άλλες δημοσιεύσεις (Ekvall, 2000). Συχνά χρησιμοποιούνται άλλοι όροι για να υποδηλώσουν τους δύο τύπους LCA, όπως περιγραφικό και προσανατολισμένο LCA και μερικές φορές περιλαμβάνουν περαιτέρω διαχωρισμούς υποκατηγοριών μέσα στους δύο κύριους τύπους LCA (Sleeswijk, Van Oers, Guinée, Struijs, & Huijbregts, 2008). Οι Lundie et αl. (2007a) υποστηρίζουν ότι η επακόλουθη LCA θα πρέπει να χρησιμοποιείται μόνο για τη λήψη αποφάσεων, αλλά όχι όταν η διαφορά μεταξύ των επακόλουθων και των τεκμηριωμένων LCA αποτελεσμάτων

είναι. Όταν δεν υπάρχει απόφαση, πρέπει να χρησιμοποιηθεί η τεκμηριωμένη/attributional LCA, επειδή είναι η ευρύτερα εφαρμοσμένη μέθοδος και επειδή οι συνέπειες των αποφάσεων σε μοντελοποίηση είναι κάπως άχρηστες όταν δεν υπάρχει απόφαση (Lundie, Peters, & Beavis, 2004).

Ένας άλλος χρήσιμος ορισμός είναι το **LCIA (Life Cycle Impact assessment)**, δηλαδή η εκτίμηση των πιθανών επιπτώσεων που βρέθηκαν στο στάδιο της απογραφής των υλικών. Υπάρχουν διάφορες μέθοδοι εκτίμησης. Σύμφωνα με το πρότυπο ISO 14044/14040 είναι υποχρεωτικό να παρουσιάζονται όλες οι ενδεχόμενες επιπτώσεις που προκύπτουν απο το LCI μεμονωμένα, δεν επιτρέπεται δηλαδή η ενοποίηση τους (Parsons, 2016). Λαμβάνοντας τα σημεία προστασίας ως σημείο εκκίνησης, παρατηρείται ότι η LCIA είναι μια ολιστική προσέγγιση των περιβαλλοντικών επιπτώσεων και μια προσπάθεια για μοντελοποίηση όλων των επιπτώσεων που μπορούν να προκύψουν κατά τον κύκλο ζωής ενός προϊόντος και αναμένεται να βλάψουν μία ή περισσότερες περιοχές προστασίας (Finnveden, Hauschild, Ekvall, Guine, & Heijungs, 2009). Σύμφωνα με το πρότυπο ISO για την LCIA (ISO, 2006) πρέπει να ακολουθούνται τα παρακάτω βήματα:

- Επιλογή των κατηγοριών των επιπτώσεων που θα αναλυθούν και ταξινόμηση τους. Περιλαμβάνει τις κατηγορίες των περιβαλλοντικών επιπτώσεων που θα αναλυθούν στην εκάστοτε μελέτη και στην συνέχεια την ταξινόμηση τους ανάλογα με την επικινδυνότητά τους και την πιθανή ικανότητα τους να συμβάλλουν και σε διαφορετικά περιβαλλοντικά προβλήματα.
- Επιλογή μεθόδων χαρακτηρισμού και χαρακτηρισμός των επιπτώσεων. Για παράδειγμα, για την αλλαγή του κλίματος ένας συχνά χρησιμοποιούμενος όρος χαρακτηρισμού είναι το δυναμικό θέρμανσης του πλανήτη για χρόνο 100 έτη (GWP100).
- Κανονικοποίηση των αποτελεσμάτων και συσχέτιση τους με τιμές αναφοράς/συντελεστές. Οι τιμές αναφοράς βρίσκονται σε κλίμακα κοινή για όλους.

Ακολουθεί η δημιουργία του μοντέλου του συστήματος προϊόντος το οποίο είναι συνήθως ένα μοντέλο στατικής προσομοίωσης. Αποτελείται από διαδικασίες μονάδας, οι οποίες εκπροσωπούν μία ή περισσότερες δραστηριότητες, όπως είναι οι διαδικασίες παραγωγής, η διαδικασία της μεταφοράς ή λιανική πώληση κ.α. Για κάθε διαδικασία μονάδας, καταγράφονται οι εισροές των φυσικών πόρων, οι εκπομπές, τα απόβλητα καθώς και άλλες περιβαλλοντικές ανταλλαγές. Οι περιβαλλοντικές ανταλλαγές σχετίζονται γραμμικά με μία από τις ροές προϊόντων της διαδικασίας μονάδας. Όλες οι διαδικασίες μονάδας συνδέονται μέσω ροών με το προϊόν, πράγμα που καθιστά το μοντέλο του συστήματος γραμμικό. Οι επιλογές και οι υποθέσεις που γίνονται κατά την μοντελοποίηση του συστήματος, ειδικά σε σχέση με τα όρια του συστήματος και τις διαδικασίες που πρέπει να συμπεριληφθούν στα όρια αυτά, είναι καθοριστικές για τα αποτελέσματα μιας μελέτης LCA (Rebitzera, et al., 2004).

Συνοπτικά αναφέρουμε ότι υπάρχουν διάφοροι τύποι διαθέσιμων λογισμικών LCA. Τα εργαλεία αυτά παρέχουν στον χρήστη τις απαραίτητες βάσεις δεδομένων, ωστόσο για πιο

συγκεκριμένες διαδικασίες όπως για παράδειγμα η ανάλυση κύκλου ζωής των νανοσωματιδίων ή η επεξεργασία πολύπλοκων ροών αποβλήτων είναι συνήθως πέρα απο το πεδιό της βάσης δεδομένων των λογισμικών. Σε τέτοιες περιπτώσεις χρησιμοποιούνται κάποια ευέλικτα μοντέλα των λογισμικών τα οποία δίνουν την δυνατότητα στον χρήστη να υπολογίσει και να καταγράψει τα δεδομένα που αναζητεί. Μερικά παραδείγματα εργαλείων είναι:

- **Simapro:** Το Simapro χρησιμοποιείται ιδιαίτερα για τον υπολογισμό των αποτυπώσεων άνθρακα και των περιβαλλοντικών επιπτώσεων σε διάφορες περιοχές επιπτώσεων. Το λογισμικό επιτρέπει την παραγωγή εκθέσεων Περιβαλλοντικών Προϊόντων και εκθέσεων Πρωτοβουλίας Παγκόσμιας Πληροφόρησης. Έρχεται με διάφορες βάσεις απογραφής κύκλου ζωής, συμπεριλαμβανομένων των ELCD και Ecoinvent, το λογισμικό περιλαμβάνει την απεικόνιση του Monte Carlo και του Sankey όσον αφορά τον αντίκτυπο του κύκλου ζωής. Η ευρεία χρήση του Simapro επιτρέπει την εύκολη κατανομή των ευρημάτων μεταξύ των ενδιαφερομένων μερών (Goedkoop, Oele, Leijting, Ponsioen, & Meijer, 2013).
- **Gabi:** Το GaBi είναι ένα άλλο κομμάτι ευρέως χρησιμοποιούμενου λογισμικού LCA. Οι διαδρομές ροής διεργασιών μέσω του κύκλου ζωής επιτρέπουν την απεικόνιση του αποθέματος, ωστόσο, ορισμένες τεκμηρίωση υποβάθρου για τα σύνολα δεδομένων είναι άδειες, μερικές φορές δε λείπει διαφάνεια. Το λογισμικό περιλαμβάνει επίσης μια σειρά βάσεων δεδομένων συμπεριλαμβανομένου του Ecoinvent και διατηρεί τα δικά του αποκλειστικά σύνολα δεδομένων. Το λογισμικό LCA και άλλα εργαλεία υποβολής αναφορών σχετικά με την αειφορία που παρέχονται από τον ιδιοκτήτη λογισμικού, Thinkstep, υποστηρίζουν τη μη χρηματοοικονομική πληροφόρηση, τη βελτίωση της αποτελεσματικότητας και τις ανάγκες μείωσης των περιβαλλοντικών επιπτώσεων των επιχειρήσεων (Parsons, 2016).
- **Umberto:** Η Umberto υποστηρίζει τις LCA και τα αποτυπώματα που είναι συμβατά με ISO, με τα γραφήματα Sankey να δείχνουν τις περιοχές με τις μεγαλύτερες περιβαλλοντικές επιπτώσεις. Το εργαλείο υποστηρίζει τα δεδομένα Ecoinvent και GaBi, με αποτελέσματα εξαγόμενα στο Microsoft Excel. Το λογισμικό σας επιτρέπει να διαχειρίζεστε διαφορετικά σενάρια (βελτιώσεις τεχνολογίας, αλλαγές στην τιμολόγηση κ.λπ.) για να βοηθήσετε στον προγραμματισμό - αυτό μπορεί να γίνει για τον υπολογισμό του κύκλου ζωής καθώς και για περιβαλλοντικές επιπτώσεις (Parsons, 2016).
- **OpenLCA:** Το OpenLCA παρέχει μια δωρεάν πλατφόρμα για την LCA. Το λογισμικό προσφέρει επίσης κοστολόγηση κύκλου ζωής και αξιολόγηση βιωσιμότητας PROSUITE ως δωρεάν προσθήκη. Περιλαμβάνει την απεικόνιση Sankey και την ανάλυση Monte Carlo. Το λογισμικό παρέχει κάποιες ελεύθερες βάσεις δεδομένων, άλλες όπως το Ecoinvent που μπορούν να αγοραστούν μέσω του ιστοτόπου τους OpenLCA (Roland, 2013)

Στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία θα αναπτυχθεί ένα νέο λογισμικό / εργαλείο LCA στο οποίο θα υπάρχει ανοιχτή και ελεύθερη πρόσβαση, θα βασιστεί στο λειτουργικό πρόγραμμα MS Excel και θα παρέχει μία εύκολη και γρήγορη εκτίμηση του αποτυπώματος ενός υλικού ή / και μιας διεργασίας.

Κεφάλαιο 2^{ο}

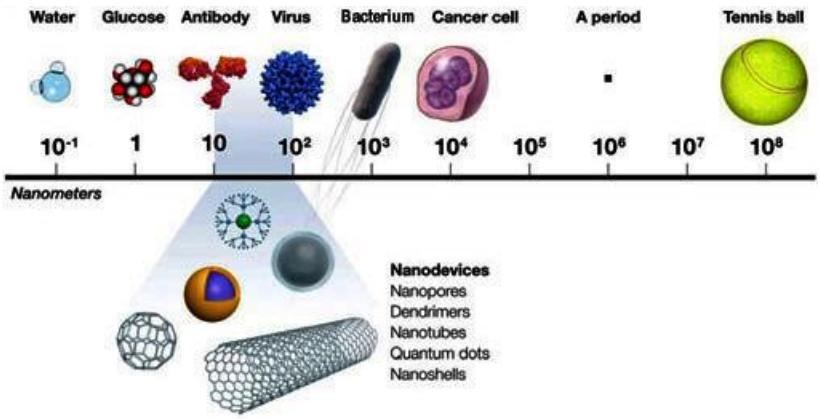
Νανοτεχνολογία & Νανοϋλικά

2.1 Ιστορική αναδρομή

Τα νανοσωματίδια και οι μοναδικές ιδιότητές τους δεν αποτελούν ακριβώς ανακάλυψη της σημερινής εποχής. Σήμερα η τεχνολογία μας έδωσε τη δυνατότητα να τα προσδιορίσουμε και να τα μελετήσουμε καλύτερα. Έτσι κολλοειδής χρυσός, δηλαδή νανοσωματίδια χρυσού χρησιμοποιούνταν από τον 10^{ο} αιώνα π.Χ. ως επικαλύψεις κεραμικών και γυαλιού, όπου ανάλογα με το μέγεθός τους τα νανοσωματίδια αποκτούσαν διαφορετικό χρώμα (Χαριτίδης). Η πρώτη επιστημονική έρευνα του κολλοειδούς χρυσού ξεκίνησε από τον Michael Faraday το 1857. Ο κολλοειδής χρυσός γνωστός και ως «νανοχρυσός», είναι ένα διάλυμα από σωματίδια χρυσού με μικρομετρικές διαστάσεις, σε διαλύτη ο οποίος είναι συνήθως το νερό. Το χρώμα του κολλοειδούς διαλύματος που προκύπτει, είναι συνήθως το έντονο κόκκινο (για σωματίδια χρυσού με διάμετρο μικρότερη των 100nm) ή το ανοιχτό κίτρινο (για σωματίδια χρυσού μεγαλύτερης διαμέτρου). Η σύνθεση των κολλοειδών διαλυμάτων χρυσού ήταν γνωστή από αρχαιοτάτων χρόνων και αρχικά χρησίμευαν στις μεθόδους χρωματισμού των υάλων (Παπαϊωαννίδης, 2010). Ο Wilhelm Ostwald, βραβευμένος με Νόμπελ για τις εργασίες του, που αφορούσαν την κατάλυση και τη χημική σύνθεση, έθεσε πρώτος την έννοια της «παραμελημένης διάστασης» (neglected dimension), εννοώντας τα κολλοειδή συστήματα αποτελούμενα από σωματίδια μεταξύ μορίων και bulk υλικού, με μέγεθος από 1nm μέχρι 1μm σε διασπορά, και ανέφερε τις ξεχωριστές ιδιότητες που παρουσιάζουν (μηχανικές, ηλεκτρικές,οπτικές) (Valery, 2009). Το 1959, ο επίσης βραβευμένος με Νόμπελ, Richard Feynman εισήγαγε την έννοια της νανοτεχνολογίας χωρίς να χρησιμοποιήσει αυτόν τον όρο, στη διάλεξη του (There's plenty room at the bottom), όπου αναφέρθηκε για πρώτη φορά στην δυνατότητα μεταχείρισης οντοτήτων ατομικών διαστάσεων. Ο όρος «νανοτεχνολογία» χρησιμοποιήθηκε πρώτη φορά από τον καθηγητή του Πανεπιστημίου του Τόκιο Norio Taniguchi το 1974 στην διατριβή του με τίτλο «*Σχετικά με την βασική έννοια της Νανοτεχνολογίας»*, αλλά ο πρωτεργάτης στον τομέα αυτόν και για αρκετούς ο πατέρας της νανοτεχνολογίας με την σημερινή της μορφή υπήρξε ο Eric Drexler, που έθεσε τα θεμέλια των νανοσυστημάτων και των νανοκατασκευών. Το 1986 εκδόθηκε το βιβλίο του με τίτλο: «Μηχανές Δημιουργίας: Η επερχόμενη εποχή της Νανοτεχνολογίας», όπου περιέγραψε την ικανότητα αυτό-συναρμολόγησης των ατόμων σε λειτουργικές δομές και ανέφερε τις πιθανές επιπτώσεις αλλά και τους κινδύνους στο περιβάλλον και την οικονομία από τη διάδοση της νανοτεχνολογίας (Drexler, 1986).

2.2 Νανοτεχνολογία

Ως νανοτεχνολογία ορίζεται το πεδίο των εφαρμογών της μηχανικής που χρησιμοποιεί δομές μεγέθους μορίου. Η κλίμακα μέτρησης των δομών αυτών είναι η νανοκλίμακα και αποδίδει τα μεγέθη τους σε νανόμετρα (nm), δηλαδή σε πολλαπλάσια του ενός δισεκατομμυριοστού του μέτρου. Η ανάγκη για νέα λοιπόν προηγμένα υλικά και συστήματα με νέες ιδιότητες και συμπεριφορές, οδήγησε στην δημιουργία των νανοϋλικών, σωματίδιων μηδενικής διάστασης (0D) <100nm όπως νανοσωματίδια και κβαντικές τελείες, μονοδιάστατα (1D) <100nm όπως νανοσωλήνες, ίνες και νανοσύρματα, διδιάστατα (2D) <100 nm όπως λεπτά και υπέρλεπτα υμένια, επικαλύψεις, πολυστρωματικές δομές κλπ (Χαριτίδης). Ως βάση για την ανάπτυξη νανοϋλικών θεωρείται κυρίως είτε η διαδικασία και οι μηχανισμοί της εναπόθεσης των ατόμων ή μορίων από την αέρια φάση στην επιφάνεια ενός στερεού υλικού (bottom-up προσέγγιση) είτε η δημιουργία συγκεκριμένης δομής μέσω π.χ. βομβαρδισμού ιόντων, λιθογραφίας (top down προσέγγιση). Τα υλικά στον τομέα της νανοκλίμακας μπορούν να κατασκευαστούν για να επιδείξουν ορισμένες φυσικές και χημικές ιδιότητες των ελεγχόμενων αλληλεπιδράσεών τους με το περιβάλλον. Επομένως, οι ιδιότητες των κατασκευασμένων νανοϋλικών διαφέρουν σημαντικά από τα υλικά παρόμοιας σύνθεσης, επιβάλλοντας τα νανοϋλικά για να επιτύχουν αξιοσημείωτα πλεονεκτήματα αγωγιμότητας, αντιδραστικότητας και οπτικής ευαισθησίας (Edelstein, 2001).



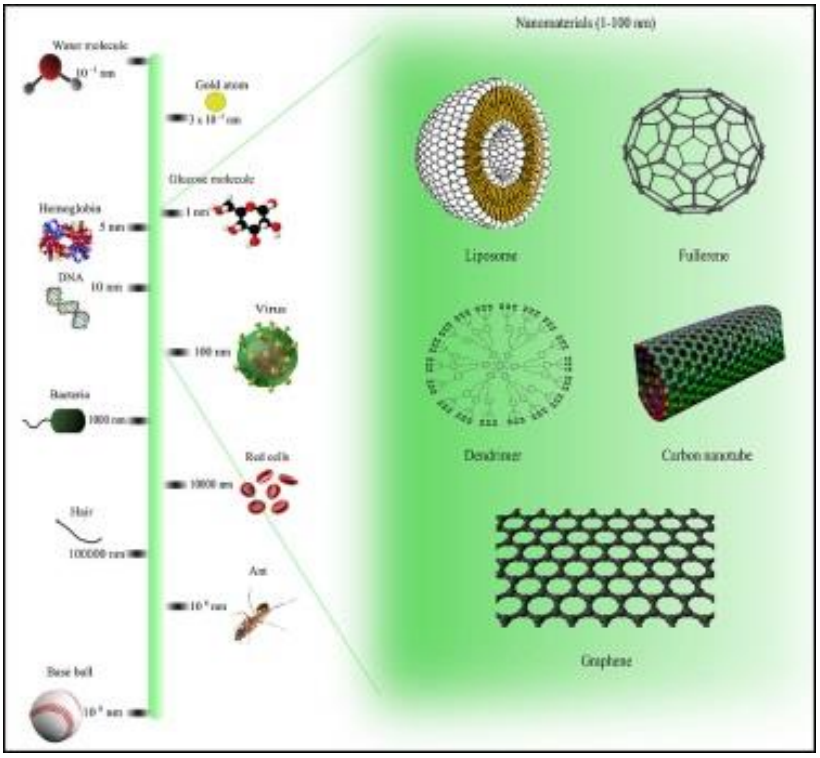
Εικόνα 2.1: *Ένα νανόμετρο 1nm ισοδυναμεί με ένα δισεκατομμυριοστό του μέτρου 1/1.000.000.000m* (Quora, 2012).

Η Νανοτεχνολογία ορίζεται ως η επιστήμη βάσει της οποίας μπορούν να κατασκευαστούν διατάξεις και συστήματα με έλεγχο της ύλης στη νανοκλίμακα, δηλαδή σε κλίμακα μορίων και μοριακών δομών, με στόχο τη δημιουργία μεγαλύτερων δομών με νέα μοριακή οργάνωση που εμφανίζουν καινοτόμες φυσικές, χημικές και βιολογικές ιδιότητες. Η νανοτεχνολογία είναι ένα νέο και αναπτυσσόμενο πεδίο που σχετίζεται σχεδόν με κάθε κλάδο των θετικών επιστημών και της επιστήμης του μηχανικού. Με την ταχεία πρόοδο σε τομείς όπως η μοριακή ηλεκτρονική, η σύνθεση βιομοριακών κινητήρων, η

αυτοσυναρμολόγηση με βάση το DNA, και ο χειρισμός μεμονωμένων ατόμων μέσω ενός μικροσκοπίου σήραγγας, η νανοτεχνολογία έχει καταστεί το κέντρο του ενδιαφέροντος ενός αυξανόμενου αριθμού επιστημόνων και μηχανικών, γεγονός που αυξάνει το ενδιαφέρον αλλά και την φαντασία του κοινού. Το πεδίο αυτό ορίζεται κυρίως από μια μονάδα του μήκους, το νανόμετρο στο οποίο βρίσκεται ο τελικός έλεγχος για τη μορφή και τη λειτουργία των υλικών. Πράγματι, δεδομένου ότι τα είδη των ατόμων και οι θεμελιώδεις ιδιότητές τους περιορίζονται από τους νόμους της κβαντικής φυσικής, η μικρότερη κλίμακα μεγέθους στην οποία έχουμε την ελευθερία να εξασκήσουμε την δημιουργικότητα μας είναι ο συνδυασμός των διαφορετικών αριθμών και ειδών των ατόμων που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή νέων μορφών της ύλης. Αυτό είναι το πεδίο έρευνας της νανοτεχνολογίας: η οικοδόμηση των υλικών και συσκευών για τον έλεγχο μέχρι το επίπεδο των μεμονωμένων ατόμων και μορίων. Αυτές οι ικανότητες της νανοτεχνολογίας έχουν αποτελέσματα στις ιδιότητες και την απόδοση των υλικών πολύ ανώτερες από αυτές των συμβατικών τεχνολογιών και, σε ορισμένες περιπτώσεις, επιτρέπουν την πρόσβαση σε εντελώς νέα φαινόμενα που είναι διαθέσιμα μόνο σε αυτήν την κλίμακα (Edelstein, 2001).

2.3 Νανοϋλικά και τεχνικές σύνθεσής τους

Τα νανοϋλικά μπορεί να είναι είτε συμπαγή είτε σε μορφή νανοδιασποράς. Η πρώτη περίπτωση περιλαμβάνει τα νανοδομημένα υλικά (Moriarty, 2001), δηλαδή, ισοτροπικά υλικά όσον αφορά τη μακροσκοπική τους σύσταση, που αποτελούνται από συνδεδεμένες μονάδες νανοκλίμακας ως επαναλαμβανόμενα δομικά στοιχεία. Αντίθετα οι νανοδιασπορές περιλαμβάνουν ένα ομογενές μέσο διασποράς (κενό, αέριο, υγρό ή στερεό) στο οποίο διασπείρονται οι νανοδομές και απομονώνονται μεταξύ τους. Η απόσταση ανάμεσα στις νανοδομές, σε αυτές τις διασπορές, μπορεί να διαφέρει μέσα σε ένα εύρος από δεκάδες νανόμετρα μέχρι κλάσματα του ενός νανομέτρου. Στην τελευταία περίπτωση, έχουμε να κάνουμε με νανοσκόνες των οποίων οι κόκκοι διαχωρίζονται μεταξύ τους από λεπτά στρώματα ελαφρών ατόμων, που αποτρέπουν την συσσωμάτωση. Τα νανοϋλικά χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες σύμφωνα με τις διαστάσεις τους, στα μαγνητικά πολυστρωματικά υμένια που αποτελούν υλικά μοναδιαίας διάστασης (1D), στους νανοσωλήνες (νανοσωλήνες άνθρακα, nanorods, nanotubes, κλπ.), που αποτελούν υλικά δύο διαστάσεων (2D) και στα υλικά τριών διαστάσεων (3D) όπως τα ανόργανα μαγνητικά νανοσωματίδια που μπορεί να είναι σφαιρικά κ.ά. Στην περίπτωση που τα νανοσωματίδια εμφανίζουν κρυσταλλική ατομική δομή, συνήθως χαρακτηρίζονται ως νανοκρύσταλλοι (nanocrystals) και ως νανοσκόνη (nanopowder) όταν αυτά είναι άμορφα χωρίς ομοιογένεια στο σχήμα και το μέγεθός τους. Η επόμενη κλίμακα είναι η μικροκλίμακα (100nm-1μ) και από εκεί και πάνω μιλάμε πλέον για μακροσκοπικά υλικά "όγκου" (bulk). Ο όρος κβαντική τελεία (quantum dot) περιγράφει ημιαγώγιμα νανοσωματίδια, συνήθως κάτω από τα 10nm, με βασικό τους γνώρισμα το μεγάλο ενεργειακό χάσμα μεταξύ της ζώνης σθένους και της ζώνης αγωγιμότητας, που οδηγεί σε πολύ καλά διαχωρισμένες ενεργειακές καταστάσεις (Gusev & Rempel, 2003).

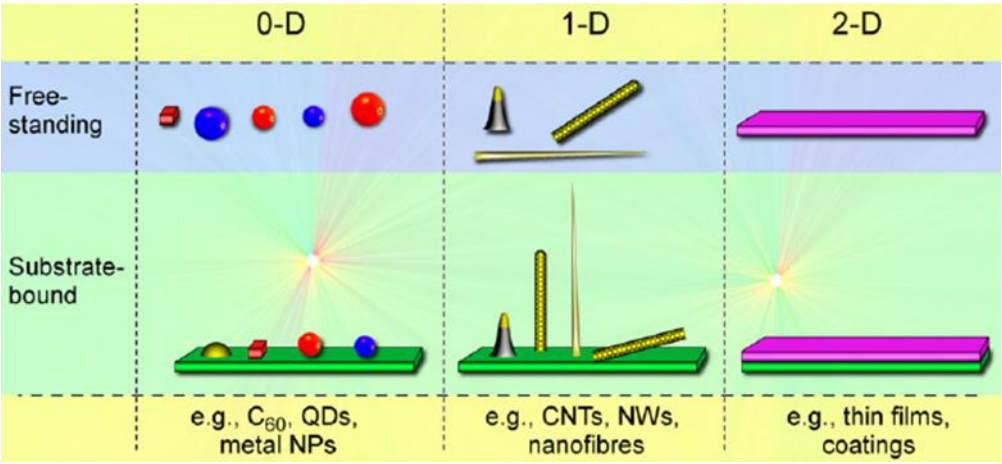


Εικόνα 2.2: *Κλίμακα και ονομασία υλικού* (Wikipedia, 2018)

Μερικοί από τους τομείς που βρίσκουν εφαρμογές τα νανοϋλικά είναι οι εξής: αισθητήρες, βιοτεχνολογία, μικροηλεκτρονική, επιφανειακή κατεργασία-προστασία υλικών, χημικώς ενεργά υλικά (καταλυτικές επικαλύψεις, corrosion resistant coatings, κτλ.), ηλεκτρονικοί υπολογιστές, τηλεπικοινωνίες, οπτοηλεκτρονική, οπτική (ανακλαστικές, αντι-ανακλαστικές επικαλύψεις, απορροφητικές επικαλύψεις, κτλ), εφαρμογές μεγάλης κλίμακας όπως συσκευασία, εύκαμπτες ηλεκτρονικές διατάξεις-επίπεδες οθόνες απεικόνισης, φωτοβολταϊκά στοιχεία κ.α. Οι δυνατότητες εξέλιξης που προσφέρουν τα εργαλεία της νανοτεχνολογίας αφενός υπόσχονται να επιλύσουν πολλές παγκόσμιες προκλήσεις που απασχολούν τον άνθρωπο, όπως ζητήματα βιομηχανικής παραγωγής, προστασίας του περιβάλλοντος, επικοινωνίας, ιατρικής κτλ, αφετέρου όμως, εγείρουν πολλά ερωτήματα σχετικά με το κατά πόσο είναι απόλυτα εφικτή η υπεύθυνη ανάπτυξη της νανοτεχνολογίας στα πλαίσια της καθημερινότητας του ανθρώπου χωρίς την ύπαρξη ηθικά αμφιλεγόμενων εφαρμογών της (Χαριτίδης).

Τα νανοσωματίδια προκαλούν τεράστιο επιστημονικό ενδιαφέρον, ωστόσο η Ευρωπαϊκή Ένωση έχει αρχίσει να εισάγει ειδικές απαιτήσεις για τα νανοϋλικά σε ορισμένες νομοθετικές της διατάξεις. Οι ερωτήσεις που σχετίζονται με τους κινδύνους έκθεσης σε νανοϋλικά δεν έχουν ακόμη αναλυθεί εκτενώς (Rasmussen, Sokull-Kluttgen, Yu, Kanno, Hirose, & Gwinn, 2017). Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία επικεντρώνεται στην ανάλυση του κύκλου ζωής των νανοϋλικών καθώς επίσης και στο αποτύπωμά τους στο περιβάλλον και στην ανθρώπινη υγεία.

Τα νανοϋλικά χωρίζονται σε διάφορες κατηγορίες ανάλογα με το πόσες διαστάσεις τους βρίσκονται στην νανοκλίμακα.



Εικόνα 2.3: *Κατηγορίες νανοϋλικών βάσει της διάστασής τους* (Han, 2011)

Μια δεύτερη κατηγοριοποίηση των νανοϋλικών γίνεται με βάση την φύση τους. Έτσι παρουσιάζονται οι παρακάτω κατηγορίες:

- ✓ Οργανικά: οργανικοί κρύσταλλοι, πολυμερικά λεπτά υμένια και υπερμοριακές δομές
- ✓ Μεταλλικά: κραματικά συμπλέγματα και οξείδια μετάλλων
- ✓ Με βάση τον άνθρακα: γραφένιο και νανοσωλήνες άνθρακα
- ✓ Ημι-αγωγοί: κβαντικές τελείες
- ✓ Βιολογικά: DNA, κυψελίδες και κολλοειδή σωματίδια
- ✓ Σύνθετα και υβριδικά

Είναι σημαντικό να σημειωθεί οτι η μορφολογία τους παρουσιάζει μεγάλη ποικιλία και καθορίζεται από την χρήση για την οποία προορίζονται και απο τις ιδιότητες που πρέπει να προσδοθούν σε αυτά.

Οι τεχνικές σύνθεσης νανοσωματιδίων είναι οι παρακάτω (Χαριτίδης):

- Μέθοδος στερεάς κατάστασης ή μηχανικές διεργασίες (Solid states method ή mechanical processes): Οι μέθοδοι αυτοί χρησιμοποιούνται για την παρασκευή άμορφων και νανοδομημένων υλικών για ένα μεγάλο εύρος κραμάτων, διμεταλλικών ενώσεων, κεραμικών και σύνθετων υλικών. Οι μέθοδοι περιλαμβάνουν: λείανση-άλεση, λειοτρίβηση, μηχανική κραματοποίηση.

- Μέθοδοι αέριας φάσης ή μέθοδοι ατμού (Gas phase synthesis methods or Vapor methods): Η ανάπτυξη στερεών απο ατμούς (συμπύκνωση) στηρίζεται στο μετασχηματισμό φάσης απο την αέρια σε μια κρυσταλλική κατάσταση. Με αυτή τη μέθοδο επιτρέπεται ο έλεγχος της διεργασίας για την παραγωγή νανοδομών με συγκεκριμένο μέγεθος, σχήμα, κρυσταλλικότητα και χημική σύσταση. Η μέθοδος αυτή έχει χαμηλό κόστος και το τελικό προϊόν έχει υψηλή καθαρότητα. Οι μέθοδοι αέριας φάσης περιλαμβάνουν τις εξής υποκατηγορίες: Φυσική εναπόθεση ατμών (PVD), Χημική εναπόθεση ατμών (CVD) και τις τεχνικές ψεκασμού.

- Χημική σύνθεση ή υγρές χημικές διεργασίες (Chemical synthesis ή wet chemical processes): Η χημική σύνθεση επιτρέπει τον χειρισμό της ύλης σε μοριακό επίπεδο και συνεπώς μπορεί να επιτευχθεί ομοιογενής χημική σύσταση. Η χημική σύνθεση μπορεί να γίνει με την πυρηνοποίηση και ανάπτυξη νανοσωματιδίων απο διαλύματα, με την σταθεροποίηση των λεπτόκοκκων σωματιδίων κατά την συσσωμάτωση και με την τεχνική της κολλοειδούς γέλης (Sol-Gel).

Κεφάλαιο 3ο

Ανάλυση κύκλου ζωής στην νανοτεχνολογία στα νανοϋλικά

3.1 Υπολογισμός αποτυπώματος των πρώτων υλών και των διεργασιών παραγωγής των νανοσωματιδίων στην ανθρώπινη υγεία και στο περιβάλλον

Είναι πλέον παγκοσμίως αποδεκτό ότι η ανάλυση του κύκλου ζωής ενός προϊόντος πρέπει να εφαρμόζεται για όλα τα υλικά, συμπεριλαμβανομένων και των νανοϋλικών. Το κύριο πλεονέκτημα της LCA, όπως αναλύθηκε και παραπάνω, είναι ότι ποσοτικοποιεί τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις και τις επιπτώσεις στην ανθρώπινη υγεία, σε διαφορετικά στάδια του κύκλου ζωής του προϊόντος. Ως αποτέλεσμα αυτού, αποφεύγεται η μεταφορά πιθανών προβλημάτων από την μια φάση στην άλλη. Ωστόσο, τα νανοϋλικά παρουσιάζουν τρείς σημαντικές προκλήσεις στις υπάρχουσες τεχνικές LCA.

Μία απο τις προκλήσεις για την κατανόηση των περιβαλλοντικών επιπτώσεων των νανοϋλικών είναι ο χαρακτηρισμός των ίδιων των υλικών. Συγκεκριμένα, για μια φαινομενικά στενή τάξη νανοϋλικών όπως για παράδειγμα, οι νανοσωλήνες άνθρακα μονού τοιχώματος (Single Wall Carbon Nanotubes, SWCNTs), προκειμένου να αποτυπωθούν οι περιβαλλοντικές επιπτώσεις από την χρήση τους, είναι απαραίτητο να προσδιοριστούν η καθαρότητά τους (π.χ. παρουσία μετάλλων και αιθάλης από την διαδικασία σύνθεσής τους), η ομοιογένεια της δομής τους (π.χ. μήκος, διάμετρος, αγωγιμότητα και χειρομορφία), καθώς και η σύνδεση μεταξύ αυτών των ιδιοτήτων και της λειτουργικότητάς τους στην τελική χρήση. Για παράδειγμα, ακόμη και τα νανοϋλικά υψηλής καθαρότητας μπορεί να περιέχουν σημαντικές συγκεντρώσεις μεταλλικού καταλύτη ή άλλου υλικού (π.χ. το SWCNT μπορεί να περιέχει μόλις 10% κατά μάζα πραγματικούς νανοσωληνίνες, με το υπόλοιπο να αποτελείται από αλλοτροπικές μορφές του άνθρακα). Απο το παραπάνω παράδειγμα καθίσταται αντιληπτό ότι η ανάλυση του κύκλου ζωής των νανοϋλικών και των διεργασιών σύνθεσής τους είναι μια διαδικασία σύνθετη, η οποία εξαρτάται από πλήθος διαφορετικών παραμέτρων (Roland, 2013). Σημαντικές προκλήσεις κατά την ανάλυση του κύκλου ζωής των νανοϋλικών είναι οι εξής:

- Η δυσκολία κατηγοριοποίησης των νανοϋλικών και των μεθόδων σύνθεσής τους. Μια ομάδα νανοϋλικών μπορεί να συντεθεί με διάφορες τεχνικές κάθε μία απο τις οποίες μπορεί να έχει διαφορετικές πρώτες ύλες άρα και διαφορετικά παραπροϊόντα.

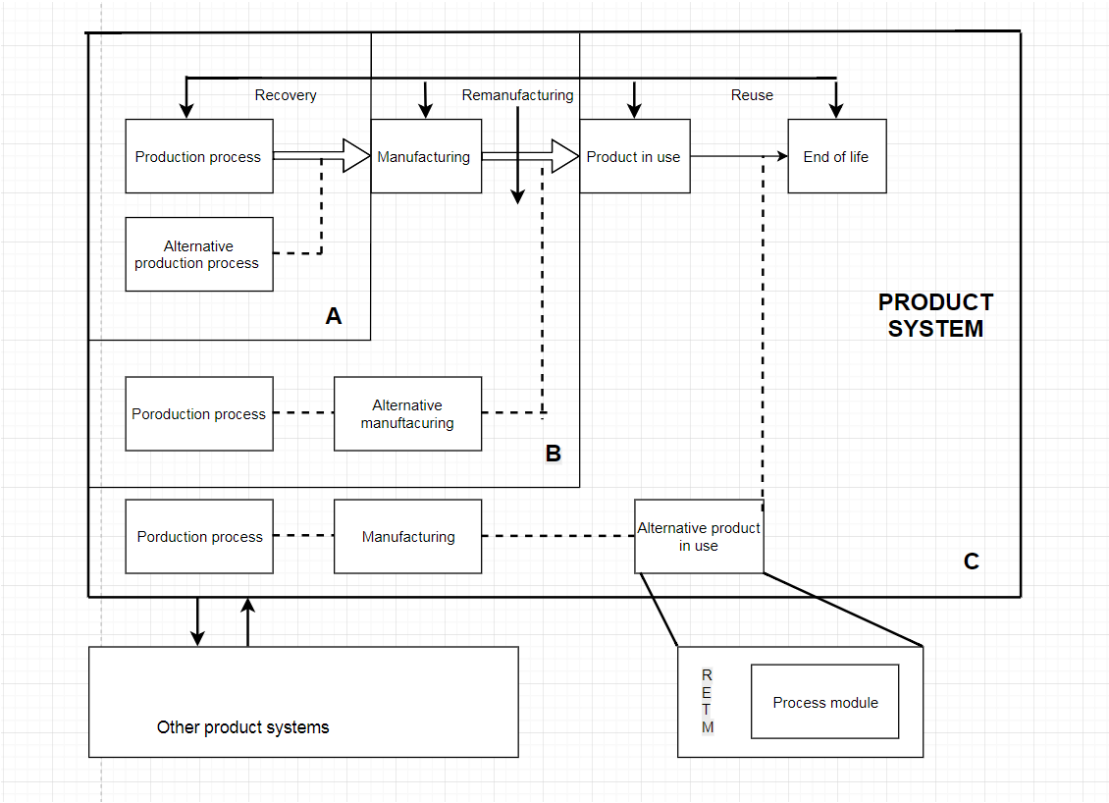
- Η δυσκολία προσδιορισμού του συνόλου των (πρόσθετων) λειτουργιών των νανοϋλικών, που πρέπει να λαβάνονται υπόψη, κατά τη μοντελοποίηση του υλικού αυτού
- Η δυσκολία αξιολόγησης των ενδεχόμενων εκλύσεων των νανοϋλικών στο περιβάλλον τόσο κατά την φάση δημιουργίας τους όσο και για τα νανοϋλικά ως τελικό προϊόν.

Για τον προσδιορισμό των σχετικών ροών και παραμέτρων σε μια LCA απαιτείται μια σαφής μέτρηση, η οποία να επιτρέπει στους ερευνητές να συσχετίζουν την ποσοτικοποιημένη πληροφορία για μια ροή με ένα συγκεκριμένο προϊόν. Στην LCA αυτή η μέτρηση εκφράζεται ως λειτουργική μονάδα και εξυπηρετεί δύο σκοπούς:

- Αποτελεί την μονάδα αναφοράς για όλες τις ροές που πρέπει να λαμβάνονται υπόψη κατά τη διάρκεια του κύκλου ζωής.
- Αποτελεί την βάση ισοδυναμίας για τη σύγκριση διαφορετικών προϊόντων ή εναλλακτικών λύσεων παραγωγής με παρόμοια απόδοση.

Προκειμένου να προσδιοριστεί η λειτουργική μονάδα των νανοϋλικών και να αξιοποιηθεί κατόπιν από τις μελέτες κύκλου ζωής, διακρίνονται διαφορετικές περιπτώσεις εφαρμογής LCA που σχετίζονται με αντίστοιχες εφαρμογές των νανοϋλικών (Roland, 2013).

Η ποσοτική σχέση μεταξύ του συγκεκριμένου συστήματος και της παρεχόμενης λειτουργίας ονομάζεται ροή αναφοράς και εκφράζει πόσο ένα προϊόν είναι απαραίτητο για την εκτέλεση της θεωρημένης λειτουργίας. Επομένως, η επιλογή και ο ορισμός της λειτουργικής μονάδας είναι ουσιώδης και αποτελεί βασική προϋπόθεση για την πραγματοποίηση μιας ουσιαστικής LCA. Το σχήμα 2.1 δείχνει μία σχηματική αλυσίδα επεξεργασίας ενός συστήματος προϊόντος (Roland, 2013). Κάθε μονάδα εντός της αλυσίδας (A, B, C) περιλαμβάνει ένα σύνολο πρώτων υλών (M), τη χρήση ενέργειας (E), συγκεκριμένη ποσότητα για transportation (T) καθώς επίσης και την ανακύκλωση των εξαρτημάτων (R). Οι παραπάνω μονάδες έχουν διαφορετική λειτουργική μονάδα, διαφορετική ροή αναφοράς και διαφέρουν σημαντικά στα στάδια του κύκλου ζωής που εξετάζονται. Τα χαρακτηριστικά των πρώτων συστημάτων παρατίθενται στον παρακάτω πίνακα:



Σχήμα 3.1: *Απλοποιημένο σύστημα παραγωγής*

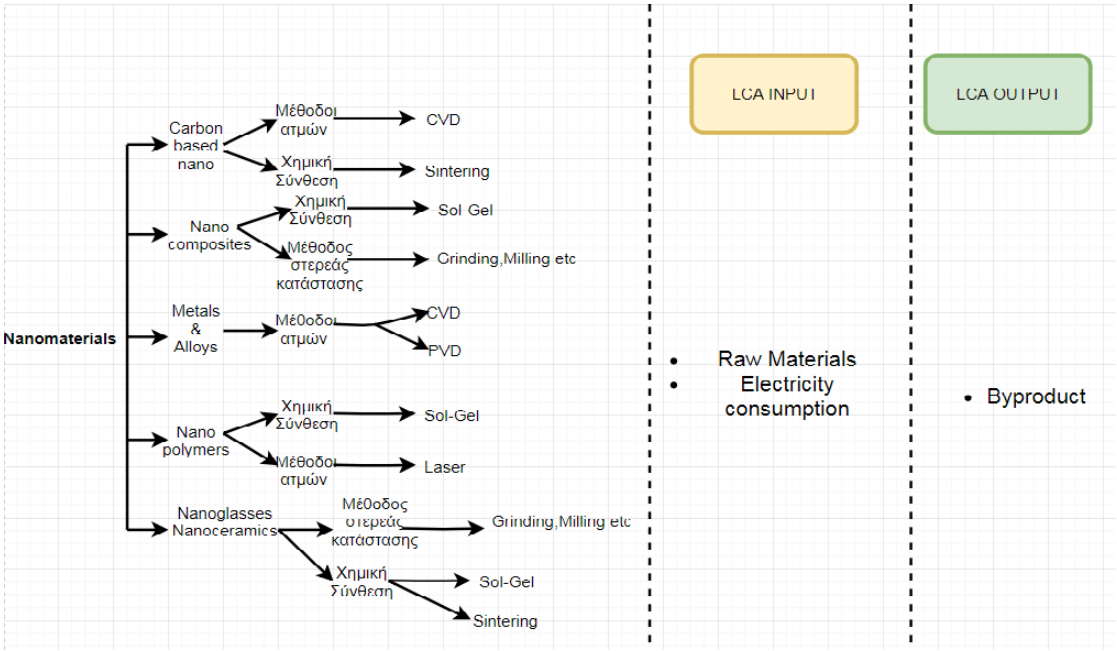
3.2 Μοντελοποίηση διαδικασιών υπολογισμού αποτυπώματος και δημιουργία αλγορίθμου

Μοντελοποίηση των νανοϋλικών

Πολλές δημοσιεύσεις τα τελευταία χρόνια υπογράμμισαν την σημασία της νανοτεχνολογίας στην κοινωνία μας, τόσο θετικά όσο και αρνητικά. Η αξιολόγηση του κύκλου ζωής είναι ένα από τα πιο εδραιωμένα και πιο εξελιγμένα εργαλεία στον τομέα της αξιολόγησης των προϊόντων. Προκειμένου να χρησιμοποιηθεί αυτό το εργαλείο στον τομέα της νανοτεχνολογίας, πρέπει να θεσπιστούν σαφείς κανόνες για τον τρόπο με τον οποίο πρέπει να λαμβάνονται υπόψη οι εκπομπές των νανοϋλικών στο επίπεδο της απογραφής του μοντέλου (LCIA), δηλαδή ποια στοιχεία και ποιες ιδιότητες πρέπει να αναφέρονται ως εκπομπές των νανοϋλικών (Salieri, Turner, & Hischier, 2018). Στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία θα περιγραφεί ένα πλαίσιο για την ολοκληρωμένη καταγραφή του οικολογικού αποτυπώματος των νανοϋλικών καθώς και του αποτυπώματος τους στην ανθρώπινη υγεία.

Κατά το πρώτο βήμα, καθορίζονται δημοφιλή νανοϋλικά με τα οποία θα πραγματευτεί η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία και αντίστοιχα οι πιο διαδεδομένες διεργασίες παραγωγής τους. Στο σχήμα 3.2 παρουσιάζονται σχηματικά οι πέντε μεγάλες ομάδες των νανοϋλικών με τις αντίστοιχες διεργασίες σύνθεσής τους. Για παράδειγμα τα Carbon Based Nanomaterials, δηλαδή τα νανοϋλικά με βάση τον άνθρακα μπορούν να συντεθούν με δύο διαφορετικές μεθόδους. Με την μέθοδο της χημικής εναπόθεσης ατμών (Chemical Vapour

Deposition, CVD) καθώς και με χημική σύνθεση (Sintering). Σε κάθε μια απο αυτές τις μεθόδους χρησιμοποιούνται διαφορετικές «εισροές πρώρων υλών» (raw materials). Επίσης, ανάλογα με την μέθοδο διαφοροποιείται και η κατανάλωση της ενέργειας . Αξιολογώντας τον κύκλο ζωής των Carbon Based Nano θα πρέπει να αποσαφηνιστεί ποια μέθοδος πρόκειται να μελετηθεί-η μέθοδος του CVD ή η μέθοδος του sintering. Ιδανικά, αν ο ερευνητής επιθυμεί να βγάλει ένα γενικό συμπέρασμα για το αποτύπωμα των Carbon Based Nanomaterials στο περιβάλλον και στην ανθρώπινη υγεία θα πρέπει να εξετάσει κάθε πιθανή μέθοδο σύνθεσης και κάθε πιθανή εργαστηριακή διαδικασία για κάθε μέθοδο. Γίνεται έτσι αντιληπτός ο λόγος για τον οποίο η βιβλιογραφία σχετικά με το LCA των νανοϋλικών είναι περιορισμένη.



Σχήμα 3.2: *Σχηματική απεικόνιση των ομάδων νανοσωματιδίων και των διεργασιών τους*

Κατά το δεύτερο βήμα, αφού έχουν επιλεχθεί οι πιο κοινές μέθοδοι παραγωγής σημαντικών ομάδων νανοϋλικών και αφού έχουν βρεθεί από δημοσιεύσεις ή εργαστηριακές μελέτες οι «εισροές των υλικών», η ενέργεια που καταναλώνεται και οι ποσότητες των αποβλήτων της εκάστοτε μεθόδου, πραγματοποιείται ο πλήρης χαρακτηρισμός των εκπομπών στον αέρα, το νερό, το έδαφος για την παραγωγή 1kg νανοϋλικού. Οι απελευθερώσεις τόσο των στοιχείων του input όσο και των στοιχείων του output βρέθηκαν βιβλιογραφικά στους καταλόγους των λογισμικών LCA ανάλυσης και πιο συγκεκριμένα της Recipe2016 (ReCipe, 2016).

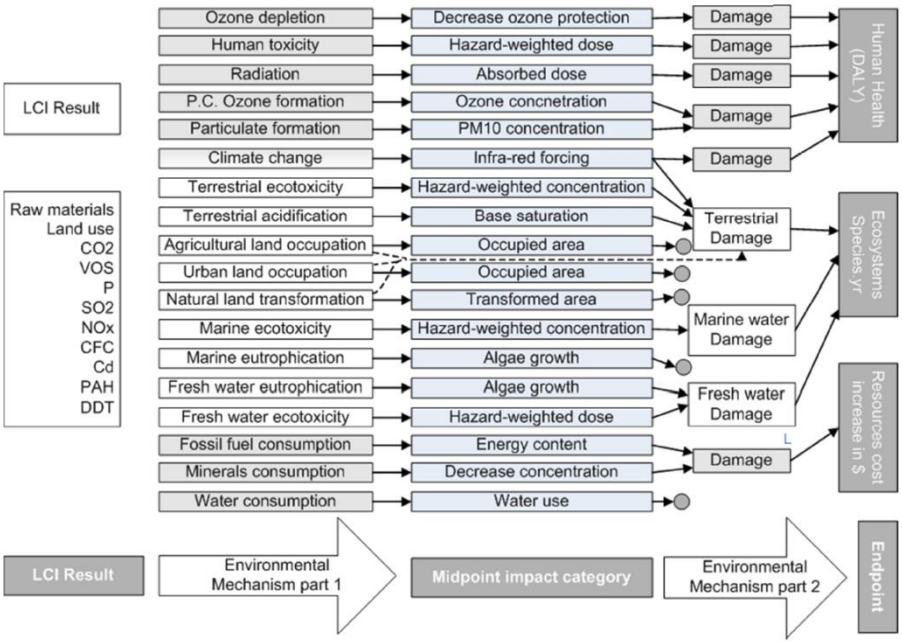
Μέχρι και σήμερα η μοναδική μελέτη που αναφέρει πληροφορίες σχετικά με τις απελευθερώσεις των νανοϋλικών, είναι η μελέτη που βασίζεται εν μέρει στα αποτελέσματα που περιγράφονται απο το μοντέλο του Gottschalk και Nowach, 2011 (Gottschalk & Nowack, 2011). Όλες οι άλλες μελέτες είτε δεν αναφέρουν τίποτα σχετικά με τις απελευθερώσεις των νανοσωματιδίων είτε αναφέρονται μονάχα στις απελευθερώσεις του διοξειδίου του άνθρακα στον αέρα ή τις ποσότητες BOD5 στο νερό (Parsons, 2016). Έτσι στο

τρίτο και τελευταίο βήμα αφού έχουν βρεθεί βιβλιογραφικά οι απελευθερώσεις όλων των στοιχείων, ενώσεων, ενέργειας που συμμετέχουν στην σύνθεση του νανοϋλικού (input) αλλά και οι απελευθερώσεις για κάθε ένα από τα παραπροϊόντα που δημιουργούνται ή τα ανακυκλώσιμα υλικά που μένουν (output) υπολογίζεται το συνολικό αποτύπωμα του νανοϋλικού που δημιουργήθηκε. Ο υπολογισμός αυτός γίνεται πολλαπλασιάζοντας όλα τα input και όλα τα output (σε kg για στοιχεία και ενώσεις ή kWh για ενέργεια) με τον δικό τους συντελεστή απελευθέρωσης (emission factor). Όλα τα αποτελέσματα αθροίζονται και έτσι λαμβάνεται το συνολικό αποτύπωμα του νανοϋλικού σε κάθε μια απο τις παρακάτω κατηγορίες:

- Κλιματική αλλαγή
- Ανθρώπινη υγεία
- Κατανάλωση φυσικών πόρων

Το 2013 ο Goedkoop (Goedkoop, Oele, Leijting, Ponsioen, & Meijer, 2013) ανέπτυξε μια μέθοδο αξιολόγησης του κύκλου ζωής των υλικών και την ονόμασε Recipe2008 η οποία όμως παρουσίαζε ελλείψεις στο κομμάτι των συντελεστών τελικών κατηγοριών των υλικών. Έτσι το 2016 δημιουργήθηκε η νέα έκδοση αυτής της βάσης δεδομένων, η Recipe2016, η οποία παρέχει παράγοντες χαρακτηρισμού πολλών στοιχείων και ενώσεων οι οποίοι είναι αντιπροσωπευτικοί σε παγκόσμιο επίπεδο. Η μεθοδολογία αυτή βρέθηκε να είναι η πιο ολοκληρωμένη τόσο για την πληθώρα περιβαλλοντικών δεικτών όσο και για την ολοκληρωμένη περιγραφή της ανάλυσης-πώς δηλαδή υπολογίζεται τελικά το αποτύπωμα μιας ουσίας ή ενός προϊόντος. Η ReCipe2016 συνδυάζει και ενσαρκώνει τις μεθοδολογίες των Eco-Indicator 99 και CML (ReCipe, 2016). Η εκτίμηση του κύκλου ζωής ποσοτικοποιεί τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις του πλήρους κύκλου ζωής των προϊόντων. Ο κύκλος ζωής ενός προϊόντος είναι συνδεδεμένος σε μεγάλο βαθμό με έναν αριθμό εκπομπών καθώς και με την εξόρυξη πόρων. Κατά την διαδικάσια του LCI (life cycle inventory) γίνεται όπως αναφέρθηκε και παραπάνω η εκτίμηση των επιπτώσεων, μεταφράζονται δηλαδή οι εκπομπές και η εξόρυξη των πόρων αν και εφόσον υπάρχουν, με την βοήθεια ενός συγκεκριμένου πίνακα βαθμολόγησης των περιβαλλοντικών επιπτώσεων (Hauschild & Huijbregts, 2015). Αυτό πραγματοποιείται μέσω των παραγόντων χαρακτηρισμού, οι οποίοι υποδεικνύουν την περιβαλλοντική επίπτωση ανά μονάδα, δηλαδή ανά kg χρησιμοποιούμενου πόρου ή εκπομπής. Υπάρχουν δύο κύριοι τρόποι εξαγωγής των παραγόντων χαρακτηρισμού: στις ενδιάμεσες κατηγορίες (midpoint level) και στις τελικές κατηγορίες (endpoint level) . Οι συντελεστές χαρακτηρισμού των ενδιάμεσων κατηγοριών (CFm) αντιπροσωπεύουν ένα επίπεδο επίδρασης πέραν του οποίου ο περιβαλλοντικός μηχανισμός παραμένει ουσιαστικά αμετάβλητος ανεξάρτητα από τις εισροές της συγκεκριμένης κατηγορίας, ενώ οι συντελεστές χαρακτηρισμού στις τελικές κατηγορίες (CFe) αποτελούν ουσιαστικά μια ομαδοποίηση των ενδιάμεσων κατηγοριών σε τρεις κύριες κατηγορίες (ReCipe, 2016). Στο πλαίσιο της ReCipe περιλαμβάνονται 18 ομάδες ενδιάμεσων κατηγοριών και 3 ομάδες τελικών κατηγοριών (Σχήμα 3.3). Οι τελικές κατηγορίες είναι ουσιαστικά η ομαδοποιημένη αθροιστκή επίπτωση των 18 υποομάδων σε 3 μεγάλες ομάδες. Οι κατηγορίες αυτές είναι οι επιπτώσεις στην ανθρώπινη υγεία, στην καταστροφή του οικοσυστήματος και στην κατανάλωση πόρων. Οι δύο προσεγγίσεις, η ομαδοποίηση στις ενδιάμεσες κατηγορίες και η ομαδοποίηση στις τελικές κατηγορίες είναι

συμπληρωματικές, χρησιμοποιούνται δηλαδή και οι δύο με στόχο την μείωση της αβεβαιότητας.



Σχήμα 3.3: *Σχηματική απεικόνιση των 18 κατηγοριών μεσαίων σημείων και των 3 τελικών σημείων*

Ο υπολογισμός των συντελεστών χαρακτηρισμού στις τελικές κατηγορίες γίνεται με την βοήθεια του παρακάτω τύπου:

$$CFe = CFm \times F_{m \rightarrow e}$$

Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, ως CFe ορίζονται οι συντελεστές χαρακτηρισμού στις τελικές κατηγορίες, ως CFm ορίζονται οι συντελεστές χαρακτηρισμού στις ενδιάμεσες κατηγορίες, ενώ ως F ορίζεται ο συντελεστής μετατροπής των ενδιάμεσων κατηγοριών στις τελικές κατηγορίες. Ο πίνακας με τους συντελεστές μετατροπής βρίσκεται στο παράρτημα. Αφού υπολογιστεί ο συντελεστής χαρακτηρισμού της εκάστοτε ουσίας στην τελική κατηγορία, πολλαπλασιάζεται με την ποσότητα του υλικού που συμμετέχει στην διαδικασία σύνθεσης του τελικού προϊόντος και λαμβάνεται έτσι το αποτύπωμα της ουσίας αυτής σε καθεμιά απο τις τρεις κατηγορίες (εάν και εφόσον υπάρχει). Η διαδικασία επαναλαμβάνεται για όλες τις ουσίες που συμμετέχουν στην διεργασία σύνθεσης του υλικού. Τα αποτυπώματα ανα κατηγορία αθροίζονται και λαμβάνεται έτσι το συνολικό αποτύπωμα του υλικού στις τρεις ομάδες που εξετάζονται (ανθρώπινη υγεία, οικοτοξικότητα, χρήση των πόρων) (Goedkoop, Oele, Leijting, Ponsioen, & Meijer, 2013).

Η ReCipe2016 ορίζει επίσης χρονικούς ορίζοντες μέσα στους οποίους υπολογίζεται κάθε πιθανό επιζήμιο αντίκτυπο μιας ουσία ή μιας διεργασία στο φυσικό περιβάλλον, στην ανθρώπινη υγεία και στους φυσικού πόρους. Οι χρονικοί ορίζοντες που ορίστηκαν απο την Recipe2016 είναι οι παρακάτω (ReCipe, 2016):

- Individualist: Ο χρονικός ορίζοντας που αναφέρεται σε μια βραχυπρόθεσμη μελέτη. Συγκεκριμένα μελετάται το αποτύπωμα του υλικού έπειτα από 20 χρόνια.
- Hierarchist: Ο χρονικός ορίζοντας που στόχο έχει να βρεί το αποτύπωμα του υλικού μετά απο 100 χρόνια.
- Egalitarian: Πρόκειται για το μεγαλύτερο χρονικό πλαίσιο και αναφέρεται ως η πλέον προληπτική προοπτική. Ο χρονικός αυτός ορίζοντας εξετάζει το αποτύπωμα του υλικού μετά τα 1000 χρόνια.

Στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία επιλέχθηκε ο χρονικός ορίζοντας των 20 χρόνων (individualist). Τα νανοϋλικά χρησιμοποιούνται ευρέως στις σύγχρονες κοινωνίες και έτσι μια μελέτη που εξετάζει τις επιπτώσεις των υλικών αυτών στο άμεσο μέλλον, επιδιώκει να ελαχιστοποιήσει κάθε πιθανή επίπτωση τους. Απότερος στόχος, μια πιο βελτιωμένη σύνθεση των υλικών αυτών που θα είναι άκρως φιλικά στο περιβάλλον και στην ανθρώπινη υγεία.

3.3 Case Studies

Στην συνέχεια παρατίθενται δύο μελέτες αξιολόγησης (case studies): LCA ανάλυση της σύνθεσης 50g συμπολυμερούς μεθακρυλικού οξέος διασταυρωμένου με διμεθακρυλικό εστέρα της αιθυλενογλυκόλης και LCA ανάλυση της σύνθεσης 15g CNTs. Στις μελέτες αυτές εφαρμόζεται η ανάλυση του κύκλου ζωής σύμφωνα με την μέθοδο της ReCipe2016 με στόχο την δημιουργία ενός κοινού πλαισίου αξιολόγησης του αποτυπώματος της Νανοτεχνολογίας στο περιβάλλον και στην ανθρώπινη υγεία.

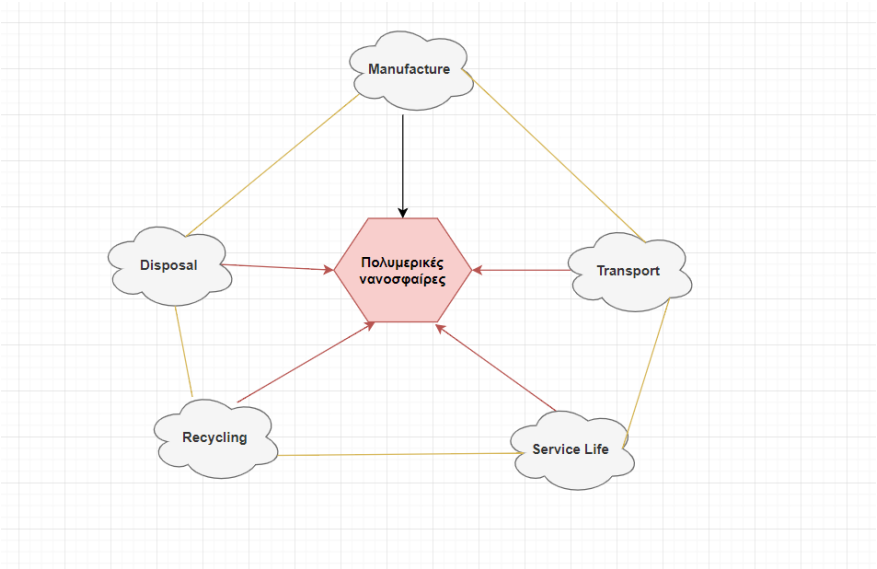
Case study 1: LCA ανάλυση της σύνθεσης 50g συμπολυμερούς πολυμεθακρυλικού οξέος με διμεθακρυλικό εστέρα της αιθυλενογλυκόλης.

Στην εικόνα 3.1 αναφέρονται τα στοιχεία και τις ενώσεις που χρησιμοποιήθηκαν για την παραγωγή 50g πολυμερικών νανοσφαιρών. Να τονιστεί ωστόσο ότι το παρόν δεν αποτελεί “συνταγή” δημιουργίας των νανοσφαιρών. Οι τιμές είναι ενδεικτικές και έχουν βρεθεί βιβλιογραφικά (Εργαστήριο Νανοτεχνολογίας ΕΜΠ). Η διαδικασία δημιουργίας τους δεν αναλύεται καθώς σκοπός της παρούσης μεταπτυχιακής εργασίας είναι καθαρά και μόνο ο υπολογισμός του αποτυπώματος της παρακάτω διεργασίας.

Πίνακας 3.1: *Συνθήκες σύνθεσης 50g P(MAA-co-EGDMA)*

Synthesis process per 50 g of P(MAA-co-EGDMA) nanospheres	Quantities	Comments/assumptions
Input		
Acetonitrile (ACN)	1,173 kg	
Methacrylic Acid (MAA)	0,03264 kg	
Ethylene Glycol Dimethacrylate (EGDMA)	0,0063 kg	
Potassium Persulfate	0,00044 kg	
Nitrogen	0,5145 g	Pre-heating: 0.5 h x 300 mL/min
		Polymerization: 24 h x 300 mL/min
Electricity input (EU-27)	2 kWh	Electricity for magnetic stirrers, heating, sonication & centrifugation
Water (from nature)	7.2 m^3	Water from drilling, used for cooling polymerization apparatus (24 h): 5l/min

Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, η ανθρώπινη υγεία, η ποιότητα των οικοσυστημάτων και η χρήση των φυσικών πόρων επελέγησαν ως οι τρείς τομείς προστασίας. Οι τελικές κατηγορίες, της κάθε ουσίας και της κάθε ένωσης συσχετίζονται με τους τρείς αυτούς τομείς εάν και εφόσον υπάρχουν. Οι επιπτώσεις στην ανθρώπινη υγεία μετρούνται σε DALYs (disability adjusted life years), αντιπροσωπεύουν δηλαδή τα χρόνια ζωής που χάνει ένας άνρθωπος εξαιτίας των επιπτώσεων του υλικού ή αντιπροσωπεύουν μια αναπηρία ή ασθένεια που προκλήθηκε από το υλικό αυτό. Η μονάδα μέτρησης της ποιότητας του οικοσυστήματος είναι η απώλεια των ειδών στην πάροδο του χρόνου (species*year). Τέλος η μονάδα μέτρησης της έλλειψης των πόρων είναι το δολάριο ($) και αντιπροσωπεύει το κόστος που συνεπάγεται μια μελλοντική εξόρυξη των πόρων (ReCipe, 2016). Τα στάδια της συσκευασίας, της μεταφοράς των υλικών στο εργαστήριο καθώς επίσης και η απόρριψη ή ανακύκλωση τους επίσης δεν εξετάζονται στην ανάλυση.



Σχήμα 3.4: *Διάγραμμα ροής των σταδίων του κύκλου ζωής των πολυμερικών νανοσφαιρών*

Συνοπτικά στον πίνακα 3.2 παρουσιάζονται οι ομάδες και οι μονάδες τους στις ενδιάμεσες κατηγορίες. Υπάρχει διαφορά στις μονάδες της κάθε ομάδας και στον συντελεστή χαρακτηρισμού της ενδιάμεσης κατηγορίας (CFm), γεγονός που οφείλεται στο ότι έχει εισαχθεί μια ουσία αναφοράς, διαφορετική για κάθε κατηγορία, έτσι ώστε ο παράγοντας χαρακτηρισμού να είναι ένας αδιάστατος αριθμός.

Πίνακας 3.2: *Κατηγορίες ενδιάμεσων κατηγοριών με τις μονάδες τους και οι συντελεστές χαρακτηρισμού τους με τις μονάδες τους*

Impact Category	Indicator	Unit	CFm	Abbr.	Unit
Climate change	Infra-red Radiative Forcing increse	W*yr/m^3	Global warming potential	GWP	Kg CO_2 to air
Ozone depletion	Stratospheric Ozone decrease	ppt*yr	Ozone depletion potential	ODP	Kg CFE-11 to air
Ionizing radiation	Absorbed Dose increse	man*Sv	Ionizing radiation potential	IRP	kBq Co-60 to air
Fine particulate matter formation	PM2.5 population intake increase	kg	Particulate matter formation potential	PMFP	Kg PM2.5 to air
Photochemical oxidant formation: ecosystem quality	tropospheric ozone increase (AOT40)	ppb.yr	Photochemical oxidant formation potential: ecosystems	EOFP	kg NOx to air
Photochemical oxidant formation: human health	tropospheric ozone population intake increase (M6M)	kg	Photochemical oxidant formation potential: humans	HOFP	kg NOx to air
terrestrial acidification	proton increase in natural soils	yr・m^2・mo l/l	terrestrial acidification potential	TAP	kg SO_2 to air
Freshwater eutrophication	phosphorus increase in fresh water	yr・m^3	freshwater eutrophication potential	FEP	kg P to fresh water
Marine eutrophication	dissolved inorganic nitrogen increase in	yr.kgO_2/kgN	marine eutrophication potential	MEP	Kg N to marine water

	marine water				
human toxicity: cancer	risk increase of cancer disease incidence	-	human toxicity potential	HTPc	kg 1,4-DCB to urban air
human toxicity: non-cancer	risk increase of noncancer disease incidence	-	human toxicity potential	HTPnc	kg 1,4-DCB to urban air
terrestrial ecotoxicity	hazardweighted increase in	$y*m^2$	terrestrial ecotoxicity potential	TETP	kg 1,4-DCB to indus
freshwater ecotoxicity	Hazard weighted increase in fresh waters	$yr\cdot m^3$	freshwater ecotoxicity potential	FETP	kg 1,4-DCB to fresh water
marine ecotoxicity	Hazard weighted increase in marine water	$yr\cdot m^3$	marine ecotoxicity potential	METP	kg 1,4-DCB to marine water
land use	occupation and timeintegrated transformation	$yr\cdot m^2$	agricultural land occupation potential	LOP	m2・yr annual crop land
water use	increase of water consumed	m^3	water consumption potential	WCP	m^3 water consumed
mineral resource scarcity	ore grade decrease	kg	surplus ore potential	SOP	kg Cu
fossil resource scarcity	upper heating value	MJ	fossil fuel potential	FFP	kg oil

Έτσι, αρχικά πραγματοποιήθηκε η προσπάθεια εύρεσης των συντελεστών χαρακτηρισμού στις ενδιάμεσες κατηγορίες (midpoint level) του ακετονιτριλίου, του μεθακρυλικού οξέος, της διμεθακρυλικής αιθυλενογλυκόλης, του υπερθειικού καλίου, του αζώτου, της κατανάλωσης νερού και της κατανάλωσης ηλεκτρικής ενέργειας. Το ακετονιτρίλιο, ο χημικός τύπος του οποίου είναι C_2H_3N, χρησιμοποιείται ως διαλύτης καθώς είναι εύκολα αναμίξιμο με νερό και με μια σειρά από οργανικούς διαλύτες. Βρέθηκαν συντελεστές χαρακτηρισμού στις ενδιάμεσες κατηγορίες του ακετονιτριλίου στις παρακάτω ομάδες:

- Οικοτοξικότητα (Terrestrial ecotoxicity)
- Οικοτοξικότητα του γλυκού νερού (Freshwater ecotoxicity)

- Θαλάσσια οικοτοξικότητα (Marine ecotoxicity)
- Μη καρκινογόνα τοξικότητα (Noncarcinogenic toxicity)

Πίνακας 3.3: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας του ακετονιτριλίου*

	Midpoint factor	Midpoint Category	Unit of midpoint factor
Acetonitrile(ACN)	0,389746418	Terrestrial ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to industrial soil
Acetonitrile(ACN)	0,008734872	Freshwater ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to freshwater
Acetonitrile(ACN)	0,002839128	Marine ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to seawater
Acetonitrile(ACN)	0,876105999	Human noncarcinogenic toxicity (urban air)	1,4-DCB eq. emitted to urban air

Το μεθακρυλικό οξύ ($C_4H_6O_2$), η συντόμευση του οποίου είναι MAA, είναι μια οργανική ένωση άχρωμη και παχύρευστη. Αν και τα μεθακρυλικά οξέα χρησιμοποιούνται ευρέως κατά την παρασκευή πολυμερών δεν βρέθηκαν καταγεγραμμένα στις λίστες με τους συντελεστές χαρακτηρισμού των ενδιάμεσων κατηγοριών, οπότε κρίθηκε αναγκαίο να γίνει μια υπόθεση. Όπως αναφέρθηκε και στο προηγούμενο κεφάλαιο ένας απο τους λόγους που το LCA δεν έχει εφαρμοστεί σε πολλά νανοϋλικά είναι ότι οι συντελεστές χαρακτηρισμού (ή διαφορετικά οι εκπομπές τους) δεν είναι γνωστοί για όλα τα στοιχεία και όλες τις ενώσεις. Κατά συνέπεια, αρχικά γίνονται κοινά αποδεκτές και γνωστές κάποιες υποθέσεις κάθε φορά. Συγκεκριμένα, γίνεται αποδεκτή η υπόθεση ότι μια ουσία που έχει παρόμοιες ιδιότητες με μια άλλη, έχει παρόμοιο συντελεστή χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας. Σχετικά με το μεθακρυλικό οξύ θεωρήθηκε ότι έχει τις παρόμοιες ιδιότητες με το αιθανικό οξύ (acetic acid) και με τα καρβοξυλικά οξέα (carboxylic acids). Τόσο το αιθανικό οξύ, όσο και τα καρβοξυλικά οξέα γενικά, είναι οργανικές ενώσεις που αποτελούνται απο άνθρακα, υδρογόνο και οξυγόνο. Βρέθηκαν οι συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας του αιθανικού οξέος στις ομάδες: σχηματισμός όζοντος βλαβερού για το οικοσύστημα (ecosystem damage ozone formation) και στον σχηματισμό όζοντος βλαβερού για τον άνθρωπο (human damage ozone formation) καθώς και οι συντελεστές χαρακτηρισμού των καρβοξυλικών οξέων στις ομάδες: οικοτοξικότητα (terrestrial ecotoxicity), οικοτοξικότητα γλυκού νερού (freshwater ecotoxicity), θαλάσσια

οικοτοξικότητα (marine ecotoxicity) και στην ομάδα μη καρκηνογόνα οικοτοξικότητα (human non carcinogenic ecotoxicity).

Πίνακας 3.4: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας του μεθακρυλικού οξέος*

	Assumption	Midpoint factor	Midpoint Category	Unit of midpoint factor
Methacrylic Acid (MAA)	Acetic Acid	0,0326390135397477	Human damage ozone formation (air)	kg NOx-eq/kg
Methacrylic Acid (MAA))	Acetic Acid	0,052605074	Ecosystem damage ozone formation (air)	kg NOx-eq/kg
Methacrylic Acid (MAA)	carboxylic acids	0,001585739	Terrestrial ecotoxicity (freshwater)	1,4-DCB eq. emitted to industrial soil
Methacrylic Acid (MAA)	carboxylic acids	0,00639	Freshwater ecotoxicity (rural air)	1,4-DCB eq. emitted to freshwater
Methacrylic Acid (MAA)	carboxylic acids	0,00321	Marine ecotoxicity (urban air)	1,4-DCB eq. emitted to seawater
Methacrylic Acid (MAA)	carboxylic acids	0,0000035249638583251	Human noncarcinogenic toxicity (marine water)	1,4-DCB eq. emitted to urban air

Ο διμεθακρυλικός εστέρας της αιθυλενογλυκόλης (EGDMA) είναι ένας διεστέρας που σχηματίζεται με συμπύκνωση δύο ισοδύναμων μεθακρυλικών οξέων και μιας ισοδύναμης αιθυλενογλυκόλης. Το EGDMA χρησιμοποιείται σε αντιδράσεις σχηματισμού σταυροειδών δεσμών συμπολιμερούς ελευθέρων ριζών. Όπως και το μεθακρυλικό οξύ, έτσι και η διμεθακρυλική αιθυλενογλυκόλη δεν βρέθηκε στις λίστες του ReCipe2016 με αποτέλεσμα να θεωρηθεί ότι έχει τους ίδους συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας με τον οξικό μεθυλεστέρα (Methyl acetate), έναν καρβοξυλικό εστέρα με παρόμοια δομή με τον EGDMA. Βρέθηκαν οι συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσου σημείου του αιθανικού οξέος στις ομάδες: σχηματισμός όζοντος βλαβερού για το οικοσύστημα (ecosystem damage ozone formation) και στον σχηματισμό όζοντος βλαβερού για τον άνθρωπο (human damage ozone formation).

Πίνακας 3.5: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας του* διμεθακρυλικού εστέρα της αιθυλενογλυκόλης

	Midpoint factor	**Midpoint Category**	**Unit of midpoint factor**
Ethylene Glycol Dimethacrylate	0,025385899	Human damage ozone formation	kg NO_x-eq/kg
Ethylene Glycol Dimethacrylate	0,040915058	Ecosystem damage ozone formation	kg NO_x-eq/kg

Το υπερθειικό κάλιο είναι μια ανόργανη ένωση με χημικό τύπο $K_2S_2O_8$. Τόσο το άλας αυτό όσο και το άζωτο, ένα ευγενές αέριο, είναι φιλικά στο περιβάλλον και στην ανθρώπινη υγεία. Το υπερθειικό κάλιο είναι ένα άλας ακίνδυνο, εξετάστηκε όμως το ενδεχόμενο παρουσίας του καλίου και του θείου στους καταλόγους του ReCipe2016 που σχετίζονται με την κατανάλωση πόρων (resource scarity), χωρίς ωστόσο να βρεθεί κάποιος συντελεστής απελευθέρωσης. Συμπεραίνεται ότι ούτε το θειικό κάλιο, ούτε το άζωτο δεν θα εξεταστούν κατά την LCA ανάλυση καθώς δεν είναι βλαβερά για καμία απο τις τρεις κατηγορίες που εξετάζουμε. Οι μεταφορές των ουσιών απο τα εργοστάσια παραγωγής τους στο εργαστήριο είναι επίσης κάτι που δεν εξετάζεται στην παρούσα LCA ανάλυση καθώς επίσης θεωρείται ότι τα παραπροϊόντα της διεργασίας (δηλαδή οι ενώσεις που μένουν) δεν ανακυκλώνονται. Η κατανάλωση του νερού και του ρεύματος θα εξεταστούν ξεχωριστά παρακάτω.

Αφού βρέθηκαν οι συντελεστές ενδιάμεσης κατηγορίας για κάθε μια από τις ενώσεις που συμμετέχουν στην διαδικασία σύνθεσης των πολυμερικών νανοσφαιρών υπολογίστηκε ο συντελεστής στις τελικές κατηγορίες (CFe). Ο συντελεστής τελικού σημείου είναι ο συντελεστής που υποδεικνύει τις εκπομπές της ουσίας ή της ένωσης στις τρεις κατηγορίες που εξετάζονται (κλιματική αλλαγή, ανθρώπινη υγεία, κατανάλωση των πόρων). Η διαδικασία αυτή πραγματοποιήθηκε με την βοήθεια του συντελεστή μετατροπής των ενδιάμεσων κατηγοριών στις τελικές κατηγορίες ($F_{m \rightarrow e}$).

Ο πίνακας με τους συντελεστές μετατροπής βρίσκεται στο παράρτημα της εργασίας. Παρακάτω φαίνονται οι συντελεστές μετατροπής των ενδιάμεσων κατηγοριών στις τελικές κατηγορίες για τις ομάδες που επηρεάζονται από το ακετονιτρίλιο, το μεθακρυλικό οξύ και την διμεθακρυλική αιθυλενογλυκόλη.

Στον πίνακα 3.6 παρουσιάζονται οι συντελεστές μετατροπής του ακετονιτριλίου για τις ομάδες στις οποίες βρέθηκαν συντελεστές ενδιάμεσης κατηγορίας για την ένωση αυτή (midpoint to endpoint factor). Ο υπολογισμός των συντελεστών χαρακτηρισμού στις τελικές κατηγορίες γίνεται πολλαπλασιάζοντας τον εκάστοτε συντελεστή ενδιάμεσης κατηγορίας με τον δικό του συντελεστή μετατροπής. Όπως φαίνεται και στον πίνακα 3.7 το ακετονιτρίλιο έχει εκπομπές που επηρεάζουν την οικοτοξικότητα, την τοξικότητα του

γλυκού νερού και την θαλάσσια τοξικότητα, επομένως αναμένεται να έχει αποτύπωμα στην ομάδα της κλιματικής αλλαγής. Παρατηρείται επίσης ότι έχει απελευθερώσεις που επηρεάζουν (σε μικρότερο βαθμό) και την ανθρώπινη υγεία οπότε αναμένεται να έχει αποτύπωμα και σε αυτή την ομάδα εξέτασης.

Πίνακας 3.6: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) του ακετονιτριλίου*

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT UNITS	MIDPOINT TO ENDPOINT FACTOR	ENDPOINT UNIT
Acetonitrile (ACN)	Terrestrial ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to industrial soil	**1,14E-11**	species*yr/kg 1,4-DBC emitted to industrial soil eq.
Acetonitrile (ACN)	Freshwater ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to freshwater	**6,95E-10**	species*yr/kg 1,4-DBC emitted to freshwater eq.
Acetonitrile (ACN)	Marine ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to seawater	**1,05E-10**	Species*yr/kg 1,4-DBC emitted to sea water eq.
Acetonitrile (ACN)	Human noncarcinogenic toxicity	1,4-DCB eq. emitted to urban air	**2,28E-07**	DALY/kg 1,4-DCB emitted to urban air eq.

Πίνακας 3.7: *Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού του ακετονιτριλίου στις τελικές κατηγορίες*

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT FACTOR	MIDPOINT TO ENDPOINT FACTORS	ENDPOINT FACTOR	UNITS	ENDPOINT CATEGORY
Acetonitrile (ACN)	Terrestrial ecotoxicity	0,389746418	1,14E-11	**4,44311E-12**	Species*yr/kg	Terrestrial ecosystems
Acetonitrile (ACN)	Freshwater ecotoxicity	0,008734872	6,95E-10	**6,07E-12**	Species*yr/kg	Freshwater ecosystems
Acetonitrile (ACN)	Marine ecotoxicity	0,002839128	1,05E-10	**2,98108E-13**	Species*yr/kg	Marine ecosystems
Acetonitrile (ACN)	Human noncarcinogenic toxicity	0,876105999	2,28E-07	**2,00E-07**	Species*yr/kg	Human health

Στον πίνακα 3.8 παρουσιάζονται οι συντελεστές μετατροπής του μεθακρυλικού οξέος για τις ομάδες στις οποίες βρέθηκαν συντελεστές ενδιάμεσης κατηγορίας για την ένωση αυτή (midpoint to endpoint factor). Ο υπολογισμός των συντελεστών χαρακτηρισμού στις τελικές κατηγορίες γίνεται όπως αναφέρθηκε και παραπάνω πολλαπλασιάζοντας τον εκάστοτε συντελεστή ενδιάμεσης κατηγορίας με τον δικό του συντελεστή μετατροπής. Όπως φαίνεται και στον πίνακα 3.9 το μεθακρυλικό οξύ έχει εκπομπές που επηρεάζουν την οικοτοξικότητα, την τοξικότητα του γλυκού νερού και την θαλάσσια τοξικότητα, επομένως αναμένεται να έχει αποτύπωμα στην ομάδα της κλιματικής αλλαγής. Αναμένεται να έχει αποτύπωμα και στην ανθρώπινη υγεία όπως ακριβώς και το ακετονιτρίλιο.

Πίνακας 3.8: *Συντελεστές μετατροπής (Fm→e) του μεθακρυλικού οξέος*

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT UNITS	MIDPOINT TO ENDPOINT CAFTOR	ENDPOINT UNIT
Methacrylic acid (MAA)	Human damage ozone formation (air)	kg NOx-eq/kg	**9,10E-07**	DALY/kg NOx eq.
Methacrylic acid (MAA)	Ecosystem damage ozone formation (air)	kg NOx-eq/kg	**1,29E-07**	Species.year/kg NOx eq.
Methacrylic acid (MAA)	Terrestrial ecotoxicity (freshwater)	1,4-DCB eq. emitted to industrial soil	**1,14E-11**	species*yr/kg 1,4-DBC emitted to industrial soil eq.
Methacrylic acid (MAA)	Freshwater ecotoxicity (rural air)	1,4-DCB eq. emitted to freshwater	**6,95E-10**	species·yr/kg 1,4-DBC emitted to freshwater eq.
Methacrylic acid (MAA)	Marine ecotoxicity (urban air)	1,4-DCB eq. emitted to seawater	**1,05E-10**	species·yr/kg 1,4-DBC emitted to sea water eq.
Methacrylic acid (MAA)	Human noncarcinogenic toxicity (marine water)	1,4-DCB eq. emitted to urban air	**2,28E-07**	DALY/kg 1,4-DCB emitted to urban air eq.

Πίνακας 3.9: *Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού του μεθακρυλικού οξέος στις τελικές κατηγορίες*

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT FACTOR	MIDPOINT TO ENDPOINT FACTORS	ENDPOINT FACTOR	UNITS	ENDPOINT CATEGORY
Methacrylic acid (MAA)	Human damage ozone formation (air)	0,032639014	9,10E-07	**2,97E-08**	DALY/kg	Human health
Methacrylic acid (MAA)	Ecosystem damage ozone formation (air)	0,052605074	1,29E-07	**6,79E-09**	species*yr/kg	Terrestrial ecosystems
Methacrylic acid (MAA)	Terrestrial ecotoxicity (freshwater)	0,001585739	1,14E-11	**1,80774E-14**	species*yr/kg	Freshwater ecosystems
Methacrylic acid (MAA)	Freshwater ecotoxicity (rural air)	0,00639	6,95E-10	**4,44E-12**	species*yr/kg	Freshwater ecosystems
Methacrylic acid (MAA)	Marine ecotoxicity (urban air)	0,00321	1,05E-10	**3,37E-13**	species*yr/kg	Marine ecosystems
Methacrylic acid (MAA)	Human noncarcinogenic toxicity (marine water)	3,52496E-06	2,28E-07	**8,04E-13**	DALY/kg	Human health

Τρίτη και τελευταία ένωση που εξετάστηκε κατα τον ίδιο τρόπο είναι η διμεθακρυλική αιθυλενογλυκόλη. Στον πίνακα 3.10 παρουσιάζονται οι συντελεστές μετατροπής της διμεθακρυλικής αιθυλενογλυκόλης για τις ομάδες στις οποίες βρέθηκαν συντελεστές ενδιάμεσης κατηγορίας για την ένωση αυτή (midpoint to endpoint factor). Ο υπολογισμός των συντελεστών χαρακτηρισμού στις τελικές κατηγορίες γίνεται πολλαπλασιάζοντας τον εκάστοτε συντελεστή ενδιάμεσης κατηγορίας με τον δικό του συντελεστή μετατροπής. Όπως φαίνεται και στον πίνακα 3.11 η διμεθακρυλική αιθυλενογλυκόλη έχει εκπομπές που επηρεάζουν την ανθρώπινη υγεία και την οικοτοξικότητα άρα αναμένεται αποτύπωμα της σε αυτές τις δυο κατηγορίες.

Πίνακας 3.10: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) της* διμεθακρυλικής αιθυλενογλυκόλης

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT UNITS	MIDPOINT TO ENDPOINT CAFTOR	ENDPOINT UNIT
Ethylene Glycol Dimethacrylate	Human damage ozone formation	kg NO_x-eq/kg	**9,10E-07**	DALY/kg NOx eq.
Ethylene Glycol Dimethacrylate	Ecosystem damage ozone formation	kg NO_x-eq/kg	**1,29E-07**	Species.year/kg NOx eq.

Πίνακας 3.11*: Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού της* διμεθακρυλικής αιθυλενογλυκόλης *στις τελικές κατηγορίες*

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT FACTOR	MIDPOINT TO ENDPOINT FACTORS	ENDPOINT FACTOR	UNITS	ENDPOINT CATEGORY
Ethylene Glycol Dimethacrylate	Human damage ozone formation	0,025385899	9,10E-07	**2,31E-08**	DALY/kg	Human health
Ethylene Glycol Dimethacrylate	Ecosystem damage ozone formation	0,040915058	1,29E-07	**5,28E-09**	species*yr/kg	Terrestrial ecosystems

Παρατηρείται ότι για την σύνθεση 50g πολυμερικών νανοσφαιρών καταναλώθηκαν 7,2 m^3 νερού. Σύμφωνα με το ReCipe2016 το νερό έχει συντελεστή ενδιάμεσης κατηγορίας ίσο με 1 (αδιάστατο νούμερο). Επομένως οι συντελεστές για τις τελικές κατηγορίες υπολογίζονται εύκολα εφόσον γνωρίζουμε το συντελεστή μετατροπής της ενδιάμεσης κατηγορίας στην τελική κατηγορία. Ισχύει δηλαδή ο παρακάτω τύπος:

$$CFe_{H2O} = 1 \times F_{m \rightarrow e}$$

Στον πίνακα 3.12 παρουσιάζονται οι συντελεστές μετατροπής των ενδιάμεσων κατηγοριών στις τελικές κατηγορίες για το νερό. Σύμφωνα όμως με όσα αναφέρθηκαν παραπάνω οι αριθμοί του πίνακα 3.12 είναι και οι συντελεστές του νερού στις τελικές κατηγορίες. Οι

τελικές κατηγορίες είναι η οικοτοξικότητα και η ανθρώπινη υγεία. Ανεμένεται λοιπόν να βρεθεί αποτύπωμα της κατανάλωσης νερού σε αυτές τις κατηγορίες.

Πίνακας 3.12: *Συντελεστές μετατροπής της κατανάλωσης νερού*

ENDPOINT CATEGORY	UNITS	MIDPOINT TO ENDPOINT FACTOR FOR WATER CONSUPTION
Human Health	Daly/m^3 consumed	3,10E-09
Terrestrial ecosystems	species.yr/m^3 consumed	0,00E+00
Freshwater ecosystems	species.yr/m^3 consumed	6,04E-13

Τελευταία μελετήθηκε η ενέργεια. Για την δημιουργία 50g πολυμερικών νανοσφαιρών καταναλώθηκαν 2 kWh κατά την διαδικασία της ψύξης της συσκευής πολυμερισμού η οποία δουλεύει για 24 ώρες και καταναλώνει 5 l/min. Το Department for Business, Energy & Industrial Strategy εκδίδει κάθε χρόνο έρευνες σχετικά με την κατανάλωση της ενέργειας και τους συντελεστές απελευθέρωσης της (2018 Government GHG Conversion Factors for company reporting (GOV.UK, 2018). Στην τελευταία έρευνα του 2018 υπολογίστηκε ότι το 1kWh έχει συντελεστή απελευθέρωσης 0,28088 kg CO_2. Το διοξείδιο του άνθρακα έχει επιπτώσεις στην ανθρώπινη υγεία και στην κλιματική αλλαγή. Στον πίνακα 3.13 παρουσιάζονται οι συντελεστές κατανάλωσης της ηλεκτρικής ενέργειας στις τελικές κατηγορίες.

Πίνακας 3.13: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) της κατανάλωσης ηλεκτρικής ενέργειας*

	MIDPOINT FACTOR	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT UNITS	MIDPOINT TO ENDPOINT CAFTOR	ENDPOINT UNIT
Electricity consumption	0,28088	Global Warming - Human health	kg CO_2	**8,12E-08**	DALY/kg CO2 eq.
Electricity consumption	0,28088	Global Warming - Terrestrial ecosystems	kg CO_2	**5,32E-10**	Species.year/kg CO2 eq.

Αφού βρέθηκαν οι συντελεστές απελευθερώσεων για κάθετι που συμμετέχει στην διεργασία σύνθεσης των πολυμερικών νανοσφαιρών και αφού οι συγκεντρώσεις και οι

καταναλώσεις νερού και ενέργειας είναι όλες γνωστές με την βοήθεια του εργαστηρίου της Νανοτεχνολογίας του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, υπολογίστηκε στο MS Excel το τελικό αποτύπωμα της διεργασίας στις 2 απο τις 3 τελικές ομάδες. Οι ομάδες που επηρεάζονται απο της διαδικασία σύνθεσης είναι η ανθρώπινη υγεία και η κλιματική αλλαγή. Η τρίτη ομάδα, που αφορά στην κατανάλωση των πόρων δεν επιβαρύνεται απο την παρούσα διεργασία.

Synthesis process per 50g of P (MAA-co-EGMA)

ECOSYSTEM QUALITY

Material	Quantity (in kg)	Emission Factor	Units	Emissions
ACN (Terrestrial ecotoxicity)	1,173	4,44311E-12	species*year	5,21177E-12
ACN (Freshwater ecotoxicity)	1,173	6,07E-12	species*year	7,12097E-12
ACN (Marine ecotoxicity)	1,173	2,98108E-13	species*year	3,49681E-13
Methacrylic Acid (MAA) (Ecosystem damage ozone fo	0,03264	6,79E-09	species*year	2,21497E-10
Methacrylic Acid (MAA) (Terrestrial ecotoxicity)	0,03264	1,81E-14	species*year	5,90E-16
Methacrylic Acid (MAA) (Freshwater ecotoxicity)	0,03264	4,44E-12	species*year	1,45E-13
Methacrylic Acid (MAA) (Marine ecotoxicity)	0,03264	3,37E-13	species*year	1,10E-14
Ethylene Glycol Dimethacrylate (Ecosystem damage c	0,0063	5,28E-09	species*year	3,32517E-11
				0
				2,67587E-10

HUMAN HEALTH

Material	Quantity (in kg)	Emission Factor	Units	Emissions
ACN (Human noncarcinogenic toxicity)	1,173	2,00E-07	DALY	2,34309E-07
Methacrylic Acid (MAA) (Photochemical ozone format	0,03264	2,97E-08	DALY	9,69457E-10
Methacrylic Acid (MAA) (Human noncarcinogenic toxi	0,03264	8,04E-13	DALY	2,62325E-14
Ethylene Glycol Dimethacrylate (Human damage ozon	0,0063	2,31E-08	DALY	1,45537E-10
				0
				2,35424E-07

ECOSYSTEM QUALITY-water consumption

Material	Quantity (in m3)	Emission Factor	Units	Emissions
Water	7,2	6,04E-13	species*year	4,3488E-12

HUMAN HEALTH-water consumption

Material	Quantity (in m3)	Emission Factor	Units	Emissions
Water	7,2	3,10E-09	DALY	2,23E-08

ECOSYSTEM QUALITY- electricity consumption

Material	Quantity (in kWh)	Emission Factor	Units	Emissions
Electricity	2	1,49428E-10	species*year	2,98856E-10

HUMAN HEALTH-electricity

Material	Quantity (in kWh)	Emission Factor	Units	Emissions
Electricity	2	2,28E-08	DALY	4,56149E-08

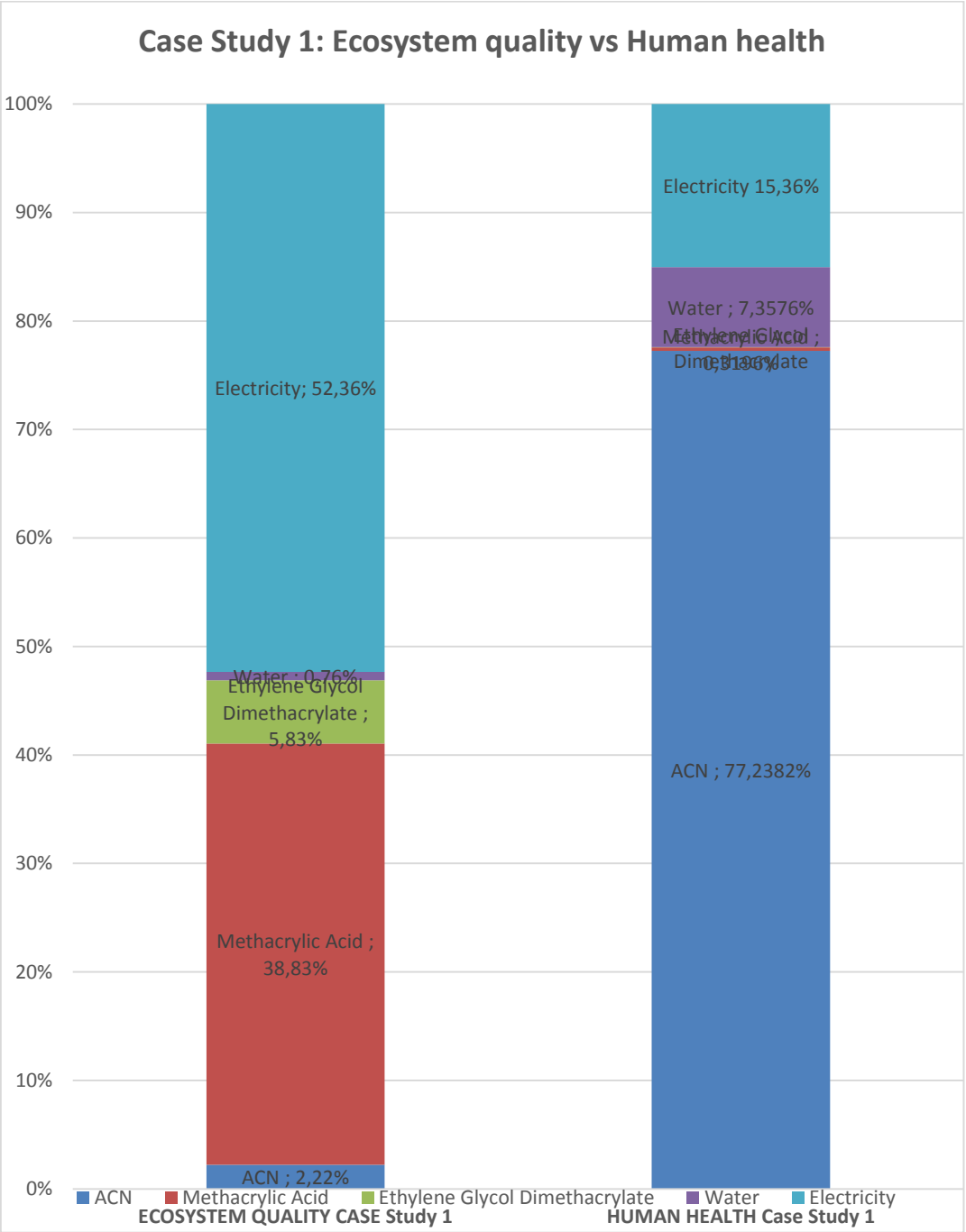
Total emissions in Ecosystem Quality	**5,70793E-10**	**species*year**
Total emissions in Human Health	**3,03E-07**	**DALY**

Εικόνα 3.1: *Υπολογισμός αποτυπώματος 50g πολυμερικών νανοσφαιρών στην κλιματική αλλαγή και στην ανθρώπινη υγεία*

Το συνολικό αποτύπωμα στην ανθρώπινη υγεία των πολυμερικών νανοσφαιρών μετά απο 20 χρόνια είναι 3,03E-07 DALY. Ο αριθμός αυτός αντιπροσωπεύει τα χρόνια ζωής που χάνει ένας άνρθωπος εξαιτίας των επιπτώσεων του νανοϋλικού αυτού ή αντιπροσωπεύουν μια αναπηρία ή ασθένεια που προκλήθηκε από το υλικό αυτό. Το αποτύπωμα των πολυμερικών νανοσφαιρών στην κλιματική αλλαγή είναι πολύ μικρότερο, της τάξεως των 5,70E-10 species*year. Η μονάδα μέτρησης της ποιότητας του οικοσυστήματος είναι η απώλεια των ειδών στην πάροδο του χρόνου (species*year).

Στο διάγραμμα 3.1 παρουσιάζεται ποσοστιαία η αρνητική συνεισφορά κάθε συστατικού που συμμετέχει στην σύνθεση των πολυμερικών νανοσφαιρών στην κλιματική αλλαγή και στην ανρθώπινη υγεία. Παρατηρείται ότι η κατανάλωση ενέργειας είναι το πιο επιβλαβές όσον αφορά το αποτύπωμα της στην κλιματική αλλαγή (52,36%), ενώ το ακετυλένιο είναι

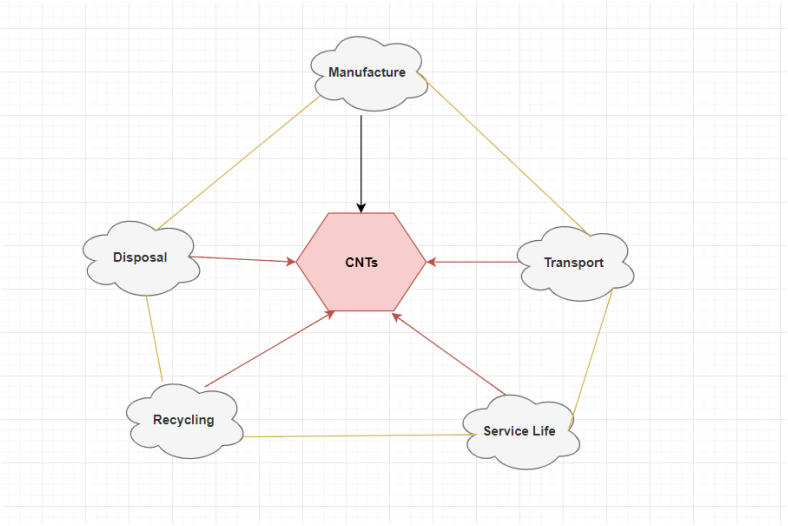
αυτό που έχει το μεγαλύτερο αποτύπωμα στην ανθρώπινη υγεία (77,23%). Δεύτερο μεγαλύτερο αποτύπωμα στην κλιματική αλλαγή παρουσιάζει το μεθακρυλικό οξύ με ποσοστό 38,83%, ενώ στην ανθρώπινη υγεία την δεύτερη θέση κατέχει η κατανάλωση της ηλεκτρικής ενέργειας με ποσοστό 15,36%. Όλες οι υπόλοιπες ενώσεις που εξετάστηκαν παρουσιάζουν πολύ χαμηλότερες τιμές.



Διάγραμμα 3.1: *Ποσοστιαία συνεισφορά των συστατικών σύνθεσης των πολυμερικών νανοσφαιρών στις 2 κατηγορίες εξέτασης*

Case study 2: LCA ανάλυση της διαδικασίας σύνθεσης 15g νανοσωλήνων άνθρακα- CNTs

Οι νανοσωλήνες άνθρακα (Carbon Nanotubes, CNTs), μεταξύ των άλλων νανοϋλικών, παρουσιάζουν τεράστιο επιστημονικό ενδιαφέρον εξαιτίας των μηχανικών και ηλεκτρικών ιδιοτήτων τους.



Σχήμα 3.5: *Διάγραμμα ροής των σταδίων του κύκλου ζωής των CNTs*

Οι κυριότερες τεχνικές σύνθεσης CNTs είναι η ηλεκτρική εκκένωση παρουσία γραφίτη (Arch Discharge), η φωτοδιάσπαση γραφίτη με χρήση laser (Laser Ablation) και η χημική εναπόθεση ατμών (Chemical Vapour Deposition, CVD). Η μέθοδος σύνθεσης με CVD παράγει νανοσωλήνες άνθρακα υψηλής καθαρότητας με ελεγχόμενο τρόπο. Παρά τις ενδιαφέρουσες ιδιότητές τους, τα CNTs μπορούν δυνητικά να συμβάλλουν σε πολλαπλές αρνητικές περιβαλλοντικές επιπτώσεις με αρνητικά αποτελέσματα στα οικοσυστήματα και στην ανθρώπινη υγεία (Trompeta, Koklioti, Perivoliotis, Lynch, & Charitidis, 2016). Η εικόνα 3.3 αναφέρει τις πρώτες ύλες που χρησιμοποιήθηκαν για την παραγωγή 15g νανοσωλήνων άνθρακα καθώς και τα παραπροϊόντα που προέκυψαν απο την σύνθεση.

Πίνακας 3.14: *Σύνθεση 15g νανοσωλήνων άνθρακα*

Synthesis process per 15 g of CNT	Quantities	Comments/assumptions
Input		
Catalytic particles	0.440 g	
Acetylene as carbon source	36.86 g	**Reaction: 8 h x 70 mL/min**
Argon as carrier gas	160.8 g	**Pre-heating: 1 h x 230 mL/min**
		Reaction: 4 h x 230 mL/min
		Cooling: 5 h x 230 mL/min
Electricity input (EU-27)	5 kWh	**Pre-heating: 1 h (25-700 °C)**
		Reaction: 8 h (700 °C)
Output		
Argon as carrier gas	160.8 g	**Mass balance**
Acetylene	3.43 g	**Un-reacted acetylene (50%)**
VOC	2.7 g	**By-products (~40%)**
PAHs	0.034 g	**By-products (~0.5%)**
Soot	0.65 g	**By-products (~9.5%)**

Τα σωματίδια του καταλύτη (catalytic particles) δεν συμπεριλαμβάνονται στην ανάλυση, υποθέτοντας οτι αυτά ενθυλακώνονται στην δομή του CNT (Trompeta, Koklioti, Perivoliotis, Lynch, & Charitidis, 2016). Τα στάδια της συσκευασίας, της μεταφοράς των υλικών στο εργαστήριο καθώς επίσης και η απόρριψη ή ανακύκλωση τους επίσης δεν εξετάζονται στην ανάλυση. Το Αργό είναι ένα ευγενές αέριο, ακίνδυνο για την ανθρώπινη υγεία και το περιβάλλον και δεν μελετάται το αποτύπωμα του. Έτσι σε πρώτη φάση πραγματοποιήθηκε η προσπάθεια εύρεσης των συντελεστών χαρακτηρισμού στις ενδιάμεσες κατηγορίες (midpoint level) του ακετυλενίου, τόσο στην είσοδο όσο και στην έξοδο, των πτητικών οργανικών ενώσεων (VOCs), των πολυκυκλικών αρωματικών υδρογονανθράκων (PAHs), του Soot και της κατανάλωσης ηλεκτρικής ενέργειας. Το ακετυλένιο, παράγωγο του ανθρακασβεστίου χρησιμοποιείται ως πρόδρομη ένωση για την παραγωγή των CNTs. Βρέθηκαν συντελεστές χαρακτηρισμού στις ενδιάμεσες κατηγορίες του ακετυλενίου στις παρακάτω ομάδες:

- Σχηματισμός όζοντος βλαβερού για το οικοσύστημα
- Σχηματισμός όζοντος βλαβερού για τον άνθρωπο

Πίνακας 3.15: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας του ακετυλενίου*

	Midpoint factor	Midpoint Category	Unit of midpoint factor
Acetylene (input)	0,025385899	Human damage ozone formation	kg NO_x-eq/kg
Acetylene (input)	0,04	Ecosystem damage ozone formation	kg NO_x-eq/kg
Acetylene (output)	0,025385899	Human damage ozone formation	kg NO_x-eq/kg
Acetylene (output)	0,04	Ecosystem damage ozone formation	kg NO_x-eq/kg

Η μοντελοποίηση των καυσαερίων που παράγονται κατά την διάρκεια σύνθεσης CNTs με την μέθοδο του CVD φαίνεται να είναι αρκετά περίπλοκη. Οι Plata et al., 2009, ποσοτικοποίησαν τα απορρίματα που απελευθερώθηκαν και διαπίστωσαν ότι υπάρχει άνθρακας που δεν αντέδρασε, πτητικές οργανικές ενώσεις (VOC), πολυκυκλικοί αρωματικοί υδρογονάνθρακες (PAHs) και αιθάλη (Soot) (Trompeta, Koklioti, Perivoliotis, Lynch, & Charitidis, 2016). Οι πτητικές οργανικές ενώσεις (VOCs) είναι οργανικές ενώσεις με υψηλή τάση ατμών σε θερμοκρασία δωματίου. Κάποιες VOCs είναι επικίνδυνες για την ανθρώπινη

υγεία ή βλάπτουν το φυσικό περιβάλλον. Οι ανθρωπογενείς VOCs ρυθμίζονται από νόμους, ιδιαίτερα σε κλειστό χώρο, όπου οι συγκεντρώσεις είναι υψηλές. Οι επιβλαβείς VOCs δεν είναι συνήθως πολύ τοξικές, αλλά έχουν σύνθετες μακροπρόθεσμες επιπτώσεις στην υγεία. Επειδή οι συγκεντρώσεις είναι συνήθως χαμηλές και τα συμπτώματα αργούν να αναπτυχθούν, η έρευνα στις VOCs και στις επιπτώσεις τους είναι δύσκολη (wikipedia, 2017). Σύμφωνα με του καταλόγους του ReCipe2016 βρέθηκαν συντελεστές χαρακτηρισμού στις ενδιάμεσες κατηγορίες των VOCs στις παρακάτω ομάδες:

- Σχηματισμός όζοντος βλαβερού για το οικοσύστημα
- Σχηματισμός όζοντος βλαβερού για τον άνθρωπο

Πίνακας 3.16: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας των VOCs*

	Midpoint factor	Midpoint Category	Unit of midpoint factor
VOCs	1,80E-01	Human damage ozone formation	kg NO_x-eq/kg
VOCs	2,90E-01	Ecosystem damage ozone formation	kg NO_x-eq/kg

Οι πολυκυκλικοί αρωματικοί υδρογονάνθρακες (PAHs) είναι ουσίες που σχηματίζονται κατά την διάρκεια της ατελούς καύσης των οργανικών υλών και αποτελούνται απο τρεις ή περισσότερους αρωματικούς δακτυλίους, ενωμένων μεταξύ τους, έτσι ώστε ορισμένα άτομα άνθρακα να ανήκου σε δύο ή και τρεις δακτυλίους (Βαλαβανίδης & Ευσταθίου, 2012). Παρακάτω παρατίθενται οι ομάδες που επηρεάζονται απο τα PAHs καθώς επίσης και οι συντελεστές ενδιάμεσων κατηγοριών:

- Οικοτοξικότητα (Terrestrial ecotoxicity)
- Οικοτοξικότητα του γλυκού νερού (Freshwater ecotoxicity)
- Θαλάσσια οικοτοξικότητα (Marine ecotoxicity)
- Καρκινογόνα τοξικότητα (Human carcinogenic toxicity)
- Μη καρκινογόνα τοξικότητα (Non carcinogenic toxicity)

Πίνακας 3.17: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας των PAHs*

	Midpoint factor	Midpoint Category	Unit of midpoint factor
PAHs	3,81E+01	Terrestrial ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to industrial soil
PAHs	1,30E+01	Freshwater ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to freshwater
PAHs	1,10E+01	Marine ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to seawater
PAHs	3,25E+01	Human carcinogenic toxicity	1,4-DCB eq. emitted to urban air
PAHs	6,01E+00	Human non carcinogenic toxicity	1,4-DCB eq. emitted to urban air

Τελευταίο καυσαέριο που αναλύθηκε είναι η αιθάλη (Soot). Η Αιθάλη είναι ακάθαρτα σωματίδια άνθρακα που προκύπτουν από την ατελή καύση των υδρογονανθράκων. Σε αυστηρό ορισμό προκύπτει από την καύση αερίων αλλά ο ορισμός αυτός έχει επεκταθεί ώστε να συμπεριλάβει και υπολειμματικά σωματίδια από πυρολυμένο καύσιμο όπως γαιάνθρακες, κάρβουνα, πετρελαίου και ούτω καθ' εξής. Η αιθάλη δεν βρέθηκε στους καταλόγους της ReCipe2016. Δεδομένου ότι οτι η αιθάλη απαρτίζεται απο πολυκυκλικούς αρωματικού υδρογονάνθρακες (PAHs) γνωστούς ως μεταλλαξιογόνα (mutagens), θεωρήθηκε ότι θα έχει τους ίδιους συντελεστές ενδιάμεσου σημείου με τα PAHs (wiki, 2016).

Πίνακας 3.18: *Συντελεστές χαρακτηρισμού ενδιάμεσης κατηγορίας του Soot*

	Midpoint factor	Midpoint Category	Unit of midpoint factor
Soot	3,81E+01	Terrestrial ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to industrial soil
Soot	1,30E+01	Freshwater ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to freshwater
Soot	1,10E+01	Marine ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to seawater
Soot	3,25E+01	Human carcinogenic toxicity	1,4-DCB eq. emitted to urban air
Soot	6,01E+00	Human non carcinogenic toxicity	1,4-DCB eq. emitted to urban air

Αφού βρέθηκαν οι συντελεστές ενδιάμεσης κατηγορίας για κάθε μια από τις ενώσεις που είτε συμμετέχουν είτε προκύπτουν από την σύνθεση των CNTs, υπολογίστηκε ο συντελεστής στις τελικές κατηγορίες (CFe). Ο συντελεστής τελικού σημείου είναι ο συντελεστής που υποδεικνύει τις εκπομπές της ουσίας ή της ένωσης στις τρεις κατηγορίες που εξετάζονται (κλιματική αλλαγή, ανθρώπινη υγεία, κατανάλωση των πόρων). Η διαδικασία αυτή πραγματοποιήθηκε με την βοήθεια του συντελεστή μετατροπής των ενδιάμεσων κατηγοριών στις τελικές κατηγορίες ($F_{m \rightarrow e}$).

Ο πίνακας με τους συντελεστές μετατροπής βρίσκεται στο παράρτημα της εργασίας. Παρακάτω φαίνονται οι συντελεστές μετατροπής των ενδιάμεσων κατηγοριών στις τελικές κατηγορίες για τις ομάδες που επηρεάζονται από το ακετυλένιο, τα VOCs, τα PAHs και το Soot.

Στον πίνακα 3.19 παρουσιάζονται οι συντελεστές μετατροπής του ακετυλένιο ενώ στον πίνακα 3.20 παρουσιάζονται οι συντελεστές τελικών κατηγοριών του ακετυλενίου.

Πίνακας 3.19: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) του ακετυλενίου*

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT UNITS	MIDPOINT TO ENDPOINT CAFTOR	ENDPOINT UNIT
Acetylene (input)	Human damage ozone formation	kg NOx-eq/kg	**9,10E-07**	DALY/kg NOx eq.
Acetylene (input)	Ecosystem damage ozone formation	kg NOx-eq/kg	**1,29E-07**	Species.year/kg NOx eq.
Acetylene (output)	Human damage ozone formation	kg NOx-eq/kg	**9,10E-07**	DALY/kg NOx eq.
Acetylene (output)	Ecosystem damage ozone formation	kg NOx-eq/kg	**1,29E-07**	Species.year/kg NOx eq.

Πίνακας 3.20: *Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού του ακετυλενίου στις τελικές κατηγορίες*

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT FACTOR	MIDPOINT TO ENDPOINT FACTORS	ENDPOINT FACTOR	UNITS	ENDPOINT CATEGORY
Acetylene (input)	Human damage ozone formation	0,025385899	9,10E-07	**2,31E-08**	DALY/kg	Human health
Acetylene (input)	Ecosystem damage ozone formation	0,04	1,29E-07	**5,16E-09**	species*yr/kg	Terrestrial ecosystems
Acetylene (output)	Human damage ozone formation	0,025385899	9,10E-07	**2,31E-08**	DALY/kg	Human health
Acetylene (output)	Ecosystem damage ozone formation	0,04	1,29E-07	**5,16E-09**	species*yr/kg	Terrestrial ecosystems

Στον πίνακα 3.21 παρουσιάζονται οι συντελεστές μετατροπής των VOCs ενώ στον πίνακα 3.22 παρουσιάζονται οι συντελεστές τελικών κατηγοριών των VOCs.

Πίνακας 3.21: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) των VOCs*

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT UNITS	MIDPOINT TO ENDPOINT CAFTOR	ENDPOINT UNIT
VOC	Human damage ozone formation	kg NOx-eq/kg	**9,10E-07**	DALY/kg NOx eq.
VOC	Ecosystem damage ozone formation	kg NOx-eq/kg	**1,29E-07**	Species.year/kg NOx eq.

Πίνακας 3.22*: Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού των VOC στις τελικές κατηγορίες*

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT FACTOR	MIDPOINT TO ENDPOINT FACTORS	ENDPOINT FACTOR	UNITS	ENDPOINT CATEGORY
VOC	Human damage ozone formation	1,80E-01	9,10E-07	**1,64E-07**	DALY/kg	Human health
VOC	Ecosystem damage ozone formation	2,90E-01	1,29E-07	**3,74E-08**	species*yr/kg	Terrestrial ecosystems

Στην συνέχεια αναλύονται οι συντελεστές των PAHs. Στον πίνακα 3.23 παρουσιάζονται οι συντελεστές μετατροπής των συντελεστών ενδιάμεσης κατηγορίας στου συντελεστές τελικών κατηγοριών ενώ στον πίνακα 3.24 παρουσιάζονται οι τελικές κατηγορίες των PAHs.

Πίνακας 3.23: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) των PAHs*

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT UNITS	MIDPOINT TO ENDPOINT CAFTOR	ENDPOINT UNIT
PAHs	Terrestrial ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to industrial soil	**1,14E-11**	species*yr/kg 1,4-DBC emitted to industrial soil eq.
PAHs	Freshwater ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to freshwater	**6,95E-10**	species·yr/kg 1,4-DBC emitted to freshwater eq.
PAHs	Marine ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to seawater	**1,05E-10**	species·yr/kg 1,4-DBC emitted to sea water eq.
PAHs	Marine ecotoxicity Human carcinogenic toxicity	1,4-DCB eq. emitted to urban air	**3,32E-06**	DALY/kg 1,4-DCB emitted to urban air eq.
PAHs	Human non carcinogenic toxicity	1,4-DCB eq. emitted to urban air	**2,28E-07**	DALY/kg 1,4-DCB emitted to urban air eq.

Πίνακας 3.24: *Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού των PAHs στις τελικές κατηγορίες*

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT FACTOR	MIDPOINT TO ENDPOINT FACTORS	ENDPOINT FACTOR	UNITS	ENDPOINT CATEGORY
PAHs	Terrestrial ecotoxicity	3,81E+01	1,14E-11	**4,34E-10**	species*yr/kg	Terrestrial ecosystems
PAHs	Freshwater ecotoxicity	1,30E+01	6,95E-10	**9,04E-09**	species*yr/kg	Terrestrial ecosystems
PAHs	Marine ecotoxicity	1,10E+01	1,05E-10	**1,16E-09**	species*yr/kg	Terrestrial ecosystems
PAHs	Human carcinogenic toxicity	3,25E+01	3,32E-06	**1,08E-04**	DALY/kg	Human health
PAHs	Human non carcinogenic toxicity	6,01E+00	2,28E-07	**1,37E-06**	DALY/kg	Human health

Με τον ίδιο τρόπο αναλύονται οι συντελεστές του Soot. Στον πίνακα 3.25 παρουσιάζονται οι συντελεστές μετατροπής των συντελεστών ενδιάμεσης κατηγορίας στου συντελεστές τελικών κατηγοριών ενώ στον πίνακα 3.26 παρουσιάζονται οι τελικές κατηγορίες των PAHs.

Πίνακας 3.25: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) του Soot*

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT UNITS	MIDPOINT TO ENDPOINT CAFTOR	ENDPOINT UNIT
Soot	Terrestrial ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to industrial soil	**1,14E-11**	species*yr/kg 1,4-DBC emitted to industrial soil eq.
Soot	Freshwater ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to freshwater	**6,95E-10**	species·yr/kg 1,4-DBC emitted to freshwater eq.
Soot	Marine ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to seawater	**1,05E-10**	species·yr/kg 1,4-DBC emitted to sea water eq.
Soot	Marine ecotoxicity Human carcinogenic toxicity	1,4-DCB eq. emitted to urban air	**3,32E-06**	DALY/kg 1,4-DCB emitted to urban air eq.
Soot	Human non carcinogenic toxicity	1,4-DCB eq. emitted to urban air	**2,28E-07**	DALY/kg 1,4-DCB emitted to urban air eq.

Πίνακας 3.26: *Υπολογισμός συντελεστών χαρακτηρισμού του Soot στις τελικές κατηγορίες*

Substance	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT FACTOR	MIDPOINT TO ENDPOINT FACTORS	ENDPOINT FACTOR	UNITS	ENDPOINT CATEGORY
Soot	Terrestrial ecotoxicity	3,81E+01	1,14E-11	**4,34E-10**	species*yr/kg	Terrestrial ecosystems
Soot	Freshwater ecotoxicity	1,30E+01	6,95E-10	**9,04E-09**	species*yr/kg	Terrestrial ecosystems
Soot	Marine ecotoxicity	1,10E+01	1,05E-10	**1,16E-09**	species*yr/kg	Terrestrial ecosystems
Soot	Human carcinogenic toxicity	3,25E+01	3,32E-06	**1,08E-04**	DALY/kg	Human health
Soot	Human non carcinogenic toxicity	6,01E+00	2,28E-07	**1,37E-06**	DALY/kg	Human health

Τελευταία μελετήθηκε η χρήση ηλεκτρικής ενέργειας, ένας απο τους σημαντικότερους συντελεστές στις κατηγορίες επιπτώσεων. Κατα την διαδικασία σύνθεσης των CNTs καταναλώθηκαν 5kWh (προθέρμανση για 1 ώρα στους 25-700°C και 8 ώρες αντίδρασης στους 700 ^{o}C). Στον πίνακα 3.27 παρουσιάζονται οι συντελεστές μετατροπής της ηλεκτρικής ενέργειας στις τελικές κατηγορίες σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν και στο πρώτο case study.

Πίνακας 3.27: *Συντελεστές μετατροπής ($F_{m \rightarrow e}$) της κατανάλωσης ηλεκτρικής ενέργειας*

	MIDPOINT FACTOR	MIDPOINT CATEGORY	MIDPOINT UNITS	MIDPOINT TO ENDPOINT CAFTOR	ENDPOINT UNIT
Electricity consumption	0,28088	Global Warming - Human health	kg CO_2	**8,12E-08**	DALY/kg CO2 eq.
Electricity consumption	0,28088	Global Warming - Terrestrial ecosystems	kg CO_2	**5,32E-10**	Species.year/kg CO2 eq.

Αφού βρέθηκαν οι συντελεστές απελευθερώσεων για κάθετι που συμμετέχει στην διεργασία σύνθεσης των CNTs με την βοήθεια του εργαστηρίου της Νανοτεχνολογίας του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, υπολογίστηκε στο MS Excel το τελικό αποτύπωμα της διεργασίας στις 2 απο τις 3 τελικές ομάδες. Οι ομάδες που επηρεάζονται απο της διαδικασία σύνθεσης είναι η ανθρώπινη υγεία και η κλιματική αλλαγή. Η τρίτη ομάδα, που αφορά στην κατανάλωση των πόρων δεν επιβαρύνεται απο την παρούσα διεργασία.

Synthesis process per 50g of P (MAA-co-EGMA)

ECOSYSTEM QUALITY

Material	Quantity (in kg)	Emission Factor	Units	Emissions
Acetylene as carbon source	0,03686	5,16E-09	species*year	1,90198E-10
Acetylene (output)	0,00343	5,16E-09	species*year	1,76988E-11
VOC	0,0027	3,74E-08	species*year	1,0098E-10
PAHs	0,000034	4,34E-10	species*year	1,4756E-14
PAHs	0,000034	9,04E-09	species*year	3,0736E-13
PAHs	0,000034	1,16E-09	species*year	3,944E-14
Soot	0,00065	4,34E-10	species*year	2,821E-13
Soot	0,00065	9,04E-09	species*year	5,876E-12
Soot	0,00065	1,16E-09	species*year	7,54E-13
				3,1615E-10

HUMAN HEALTH

Material	Quantity (in kg)	Emission Factor	Units	Emissions
Acetylene as carbon source	0,03686	2,31E-08	DALY	8,51E-10
Acetylene (output)	0,00343	2,31E-08	DALY	7,92E-11
VOC	0,0027	1,64E-07	DALY	4,43E-10
VOC	0,0027	1,08E-04	DALY	2,92E-07
VOC	0,0027	1,37E-06	DALY	3,70E-09
PAHs	0,000034	1,08E-04	DALY	3,67E-09
PAHs	0,000034	1,37E-06	DALY	4,66E-11
Soot	0,00065	1,08E-04	DALY	7,02E-08
Soot	0,00065	1,37E-06	DALY	8,91E-10
				3,71E-07

ECOSYSTEM QUALITY- electricity consumption

Material	Quantity (in kWh)	Emission Factor	Units	Emissions
Electricity	5	1,49E-10	species*year	7,4714E-10

HUMAN HEALTH-electricity

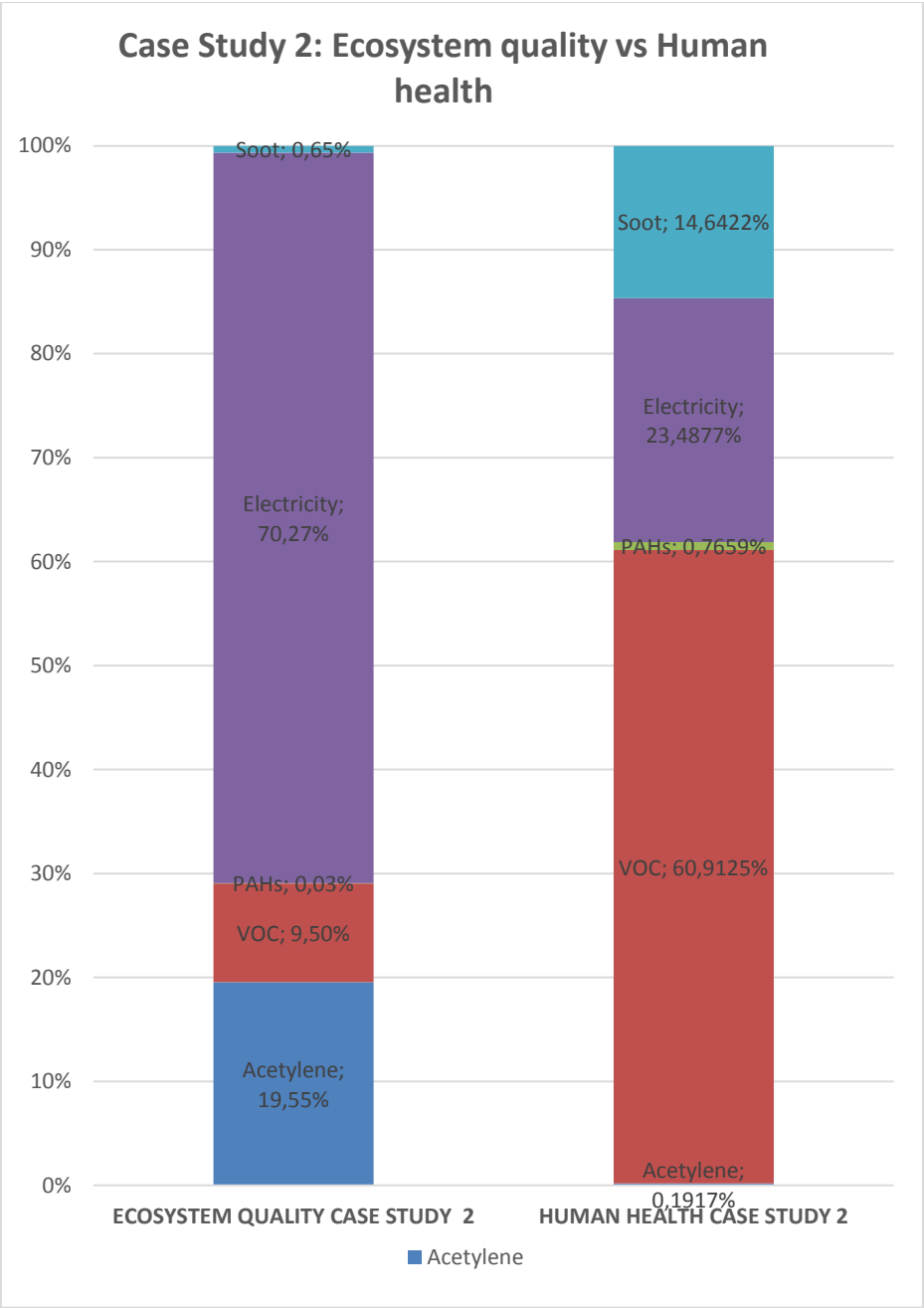
Material	Quantity (in kWh)	Emission Factor	Units	Emissions
Electricity	5	2,28E-08	DALY	1,14E-07

Total Emission in Ecosystem Quality	**1,06329E-09**	**species*year**
Total Emission in Human Health	**4,84629E-07**	**DALY**

Εικόνα 3.2: *Υπολογισμός αποτυπώματος 15g CNTs στην κλιματική αλλαγή και στην ανθρώπινη υγεία*

Το συνολικό αποτύπωμα στην ανθρώπινη υγεία των CNTs μετά απο 20 χρόνια είναι 4,846E-07 DALY. Ο αριθμός αυτός αντιπροσωπεύει τα χρόνια ζωής που χάνει ένας άνρθωπος εξαιτίας των επιπτώσεων του νανοϋλικού αυτού ή αντιπροσωπεύουν μια αναπηρία ή ασθένεια που προκλήθηκε από το υλικό αυτό. Το αποτύπωμα των CNTs στην κλιματική αλλαγή είναι πολύ μικρότερο, της τάξεως των 1,06429-09 species*year. Η μονάδα μέτρησης της ποιότητας του οικοσυστήματος είναι η απώλεια των ειδών στην πάροδο του χρόνου (species*year).

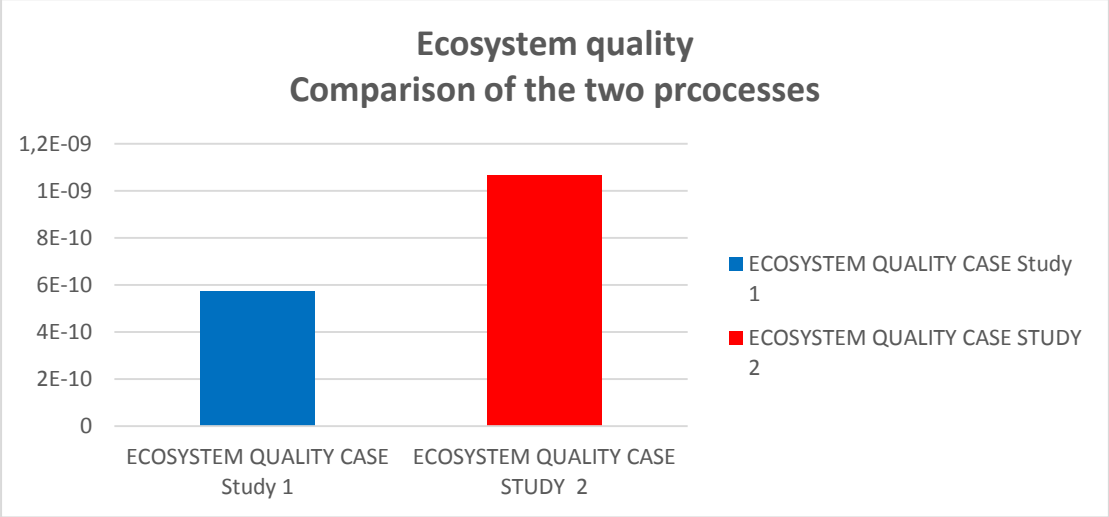
Στο διάγραμμα 3.2 παρουσιάζεται ποσοστιαία η αρνητική συνεισφορά κάθε συστατικού που συμμετέχει στην σύνθεση των CNTs στην κλιματική αλλαγή και στην ανθρώπινη υγεία. Παρατηρείται ότι η κατανάλωση ενέργειας είναι το πιο επιβλαβές όσον αφορά το αποτύπωμα της στην κλιματική αλλαγή με ποσοστό 70,27%, ενώ οι οργανικές πτητικές ενώσεις (VOCs) είναι αυτές που έχουν το μεγαλύτερο αποτύπωμα στην ανθρώπινη υγεία, με ποσοστό 60,91%. Δεύτερο μεγαλύτερο αποτύπωμα στην κλιματική αλλαγή παρουσιάζει το ακετυλένιο με ποσοστό 19,55%, ενώ στην ανθρώπινη υγεία την δεύτερη θέση κατέχει η κατανάλωση της ηλεκτρικής ενέργειας με ποσοστό 23,48%. Όλες οι υπόλοιπες ενώσεις που εξετάστηκαν παρουσιάζουν πολύ χαμηλότερες τιμές, αξιοσημείωτο είναι ωστόσο το γεγονός ότι ενώ τα VOCs είναι πολύ επικίνδυνα για την υγεία, το αποτύπωμα τους στην κλιματική αλλαγή αγγίζει μόλις το 9,50%. Το ίδιο παρατηρείται και με το Soot το οποίο επηρεάζει την κλιματική αλλαγή μόλις 0,65%, ενώ στην ανθρώπινη υγεία επηρεάζει κατά 14,64% του συνολικού αποτυπώματος.



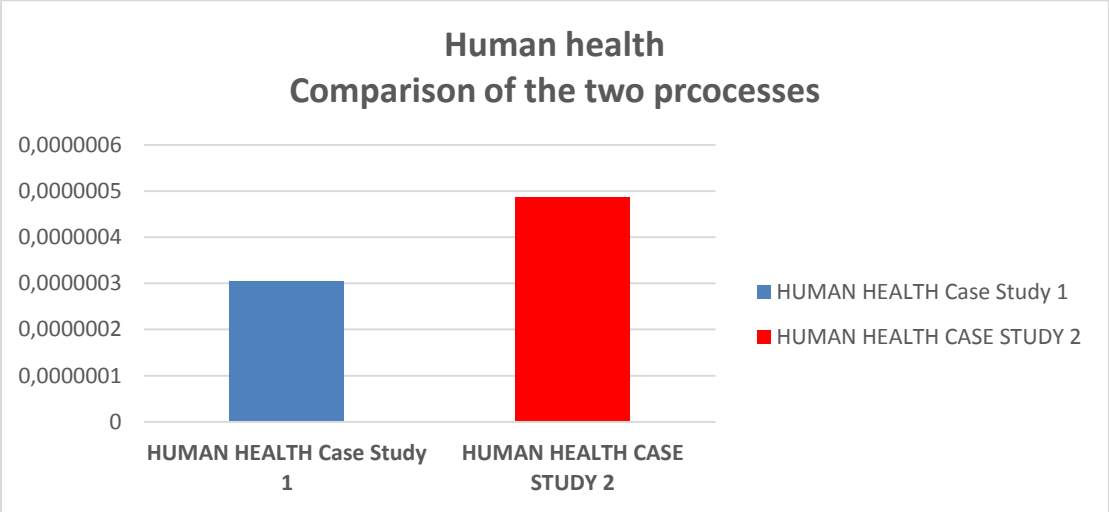
Διάγραμμα 3.2: *Ποσοστιαία συνεισφορά των συστατικών σύνθεσης των CNTs στις 2 κατηγορίες εξέτασης*

Σύγκριση αποτελεσμάτων

Συγκρίνοντας τις δύο διαδικασίες σύνθεσης που αναλύθηκαν παραπάνω προκύπτει ότι η σύνθεση 15gr CNTs έχει μεγαλύτερο αποτύπωμα τόσο στο περιβάλλον όσο και στην ανθρώπινη υγεία από την σύνθεση 50gr πολυμερικών νανοσφαιρών.



Διάγραμμα 3.3: *Σύγκριση αποτυπώματος των CNTs με τα πολυμερικά νανοσφαιρίδια στο περιβάλλον*



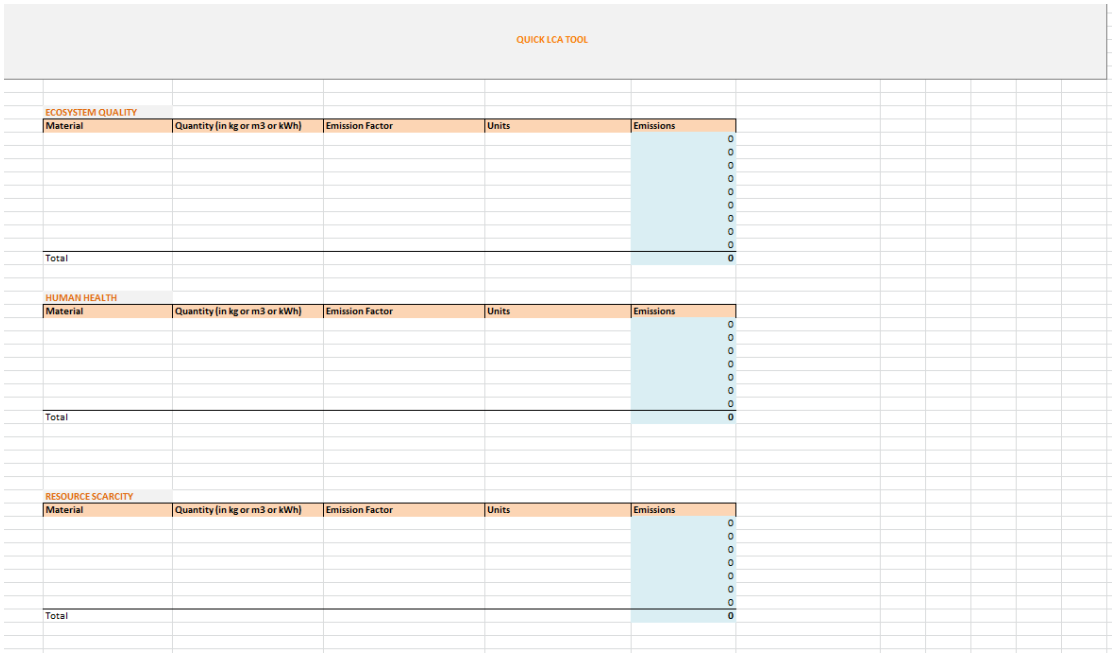
Διάγραμμα 3.4: *Σύγκριση αποτυπώματος των CNTs με τα πολυμερικά νανοσφαιρίδια στην ανθρώπινη υγεία*

Αβεβαιότητα

Παρά το γεγονός ότι τα νανοσωματίδια έχουν εισέλθει στην αγορά και στις ζωές των ανθρώπων, δεν έχουν περιγραφεί αναλυτικά οι μέθοδοι παραγωγής τους λόγω του ότι οι τεχνολογίες σύνθεσής τους είναι πολλαπλές και σύνθετες. Ως εκ τούτου η εισαγωγή της αβεβαιότητας στο μοντέλο του LCA μπορεί να οδηγήσει στην λήψη λανθασμένων αποτελεσμάτων και αποφάσεων. Τα εξαιρετικά υψηλά επίπεδα αβεβαιότητας στην ανάλυση κύκλου ζωής των νανοϋλικών απαιτούν πιο προσεκτική επεξεργασία απο ότι συνήθως εφαρμόζεται σε άλλα προϊόντα. Η ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας αναπτύχθηκε από τους Frischknecht et al. (2004) και αξιολογεί τις παραμέτρους αβεβαιότητας σε επίπεδο διεργασίας. Η ποσοτικοποίηση αυτή πραγματοποιείται με την βοήθεια του μοντέλου προσομοίωσης Monte Carlo που εξετάζει 1000 διαδρομές με ποσοστό ακρίβειας 95% (Trompeta, Koklioti, Perivoliotis, Lynch, & Charitidis, 2016).

Κεφάλαιο 4^{ο} -Σχεδιασμός εργαλείου LCA

Τα λογισμικά SimaPro και Gabi αποτελούν τα σημαντικότερα λογισμικά ανάλυσης και υπολογισμού του αποτυπώματος των προϊόντων στις διάφορες κατηγορίες. Είναι όμως γεγονός οτι τόσο το SimaPro όσο και το Gabi είναι αρκετά δαπανηρά, με αποτέλεσμα μονάχα μεγάλα πανεπιστήμια και πολυεθνικές εταιρείες να μπορούν να τα αποκτήσουν. Χαρακτηριστικά, η τιμή του Gabi αγγίζει τα 10.000 € ετησίως, ενώ η τιμή του SimaPro αγγίζει τα 2.000 € ετησίως. Τα αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν και σχολιάστηκαν στο 3^{ο} κεφάλαιο της μεταπτυχιακής εργασίας υπολογίστηκαν με την βοήθεια του εργαλείου που δημιουργήθηκε στο πρόγραμμα MS Excel. Το εργαλείο αυτό επιτρέπει ελεύθερη πρόσβαση (open access tool) σε κάθε χρήστη ώστε να μπορεί να αξιολογήσει εύκολα και γρήγορα το αποτύπωμα προϊόντων και ουσιών στην ανθρώπινη υγεία, στην κλιματική αλλαγή και στους φυσικούς πόρους. Ο ερευνητής γνωρίζοντας την σύσταση του προϊόντος που θέλει να μελετήσει και βρίσκοντας βιβλιογραφικά τους συντελεστές τελικών κατηγοριών των συστατικών του προϊόντος, μπορεί με την βοήθεια αυτού του εργαλείου να υπολογίσει το γρήγορα και εύκολα το αποτύπωμα του προϊόντος.



QUICK LCA TOOL

ECOSYSTEM QUALITY

Material	Quantity (in kg or m3 or kWh)	Emission Factor	Units	Emissions
				0
				0
				0
				0
				0
				0
				0
				0
				0
Total				0

HUMAN HEALTH

Material	Quantity (in kg or m3 or kWh)	Emission Factor	Units	Emissions
				0
				0
				0
				0
				0
				0
				0
Total				0

RESOURCE SCARCITY

Material	Quantity (in kg or m3 or kWh)	Emission Factor	Units	Emissions
				0
				0
				0
				0
				0
				0
				0
Total				0

Εικόνα 4.1: *Εργαλείο MS Excel*

Αφού αρχικά βρεθούν όλα τα δεδομένα για το προϊόν που εξετάζονται (Εικόνες 4.2), εισάγονται στο εργαλείο οι ποσότητες των υλικών που συμμετέχουν στη σύνθεση του τελικού προϊόντος καθώς και οι συντελεστές απελευθέρωσής τους. Το πρόγραμμα πολλάπλασιάζει αυτές τις δύο κατηγορίες και προκύπτει έτσι το αποτύπωμα της εκάστοτε ουσίας ή ένωσης που συμμετέχει. Το εργαλείο έχει τις τρεις κατηγορίες (ανθρώπινη υγεία, κλιματική αλλαγή και χρήση των φυσικών πορών) που εξετάζονται ξεχωριστά λόγω του ότι η κάθεμια απο αυτές έχει διαφορετικές μονάδες. Λαμβάνεται έτσι ένα αποτέλεσμα για

κάθεμια απο αυτές τις κατηγορίες. Στη παρούσα μεταπτυχιακή εργασία δεν υπολογίστηκε αποτύπωμα για την επιβάρυνση των φυσικών πόρων καθώς θεωρήθηκε ότι κανένα απο τα στοιχεία που συμμετέχουν στις συνθέσεις δεν έχουν αντίκτυπο στην ομάδα αυτή. Το τελικό αποτέλεσμα προκύπτει απο το άθροισμα των επιμέρους συστατικών που επηρεάζουν αρνητικά την κάθε κατηγορία (Εικόνα 4.3).

Synthesis process per 50g of P (MAA-co-EGMA)									
INPUT		Quantities		MIDPOINT FACTOR		Units	MIDPOINT TO ENDPOINT FACTOR	UNITS
Acetonitrile (ACN)	C2H3N	1,173	kg	0,389746418	Terrestrial ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to industrial soil	1,14E-11	species*yr/kg 1,4-DBC emitted to industrial soil
Acetonitrile (ACN)	C2H3N	1,173	kg	0,008734872	Freshwater ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to freshwater	6,95E-10	species-yr/kg 1,4-DBC emitted to freshwater eq.
Acetonitrile (ACN)	C2H3N	1,173	kg	0,002839128	Marine ecotoxicity	1,4-DCB eq. emitted to seawater	1,05E-10	species-yr/kg 1,4-DBC emitted to sea water eq.
Acetonitrile (ACN)	C2H3N	1,173	kg	0,876105999	Human noncarcinogenic toxicity (u	1,4-DCB eq. emitted to urban air	2,28E-07	DALY/kg 1,4-DCB emitted to urban air eq.
Methacrylic Acid (MAA)	C4H6O2	0,03264	kg	0,032639014	Human damage ozone formation (a	kg NOx-eq/kg	9,10E-07	DALY/kg NOx eq.
Methacrylic Acid (MAA)	C4H6O2	0,03264	kg	0,052605074	Ecosystem damage ozone formatio	kg NOx-eq/kg	1,29E-07	Species.year/kg NOx eq.
Methacrylic Acid (MAA)	C4H6O2	0,03264	kg	0,001585739	Terrestrial ecotoxicity (freshwater)	1,4-DCB eq. emitted to industrial soil	1,14E-11	species*yr/kg 1,4-DBC emitted to industrial soil
Methacrylic Acid (MAA)	C4H6O2	0,03264	kg	0,00639	Freshwater ecotoxicity (rural air)	1,4-DCB eq. emitted to freshwater	6,95E-10	species-yr/kg 1,4-DBC emitted to freshwater eq.
Methacrylic Acid (MAA)	C4H6O2	0,03264	kg	0,00321	Marine ecotoxicity (urban air)	1,4-DCB eq. emitted to seawater	1,05E-10	species-yr/kg 1,4-DBC emitted to sea water eq.
Methacrylic Acid (MAA)	C4H6O2	0,03264	kg	3,52496E-06	Human noncarcinogenic toxicity (m	1,4-DCB eq. emitted to urban air	2,28E-07	DALY/kg 1,4-DCB emitted to urban air eq.
Ethylene Glycol Dimethacrylate	C10H14O4	0,0063	kg	0,025385899	Human damage ozone formation	kg NO_x-eq/kg	9,10E-07	DALY/kg NOx eq.
Ethylene Glycol Dimethacrylate	C10H14O4	0,0063	kg	0,040915058	Ecosystem damage ozone formatio	kg NO_x-eq/kg	1,29E-07	Species.year/kg NOx eq.
Potassium Persulfate	$K_2S_2O_8$	0,00044	kg	No				
Nitrogen	N2	0,5145	kg	No				
				MIDPOINT FACTOR		Units	MIDPOINT TO ENDPOINT FACTOR	UNITS
Water from nature		7,2	m3	1	human health	no units	3,10E-09	Daly/m^3 consumed
Water from nature		7,2	m3	1	freshwater ecosystems	no units	6,04E-13	species.yr/m^3 consumed
Electricity		2	kWh	0,28088	human health	kg CO_2	8,12E-08	DALY/kg CO2 eq.
Electricity		2	kWh	0,28088	freshwater ecosystems	kg CO_2	5,32E-10	Species.year/kg CO2 eq.

MIDPOINT TO ENDPOINT FACTOR	UNITS	ENDPOINT FACTORS	UNITS
1,14E-11	species*yr/kg 1,4-DBC emitted to industrial soil	4,44311E-12	species*yr/kg
6,95E-10	species-yr/kg 1,4-DBC emitted to freshwater eq.	6,07E-12	species*yr/kg
1,05E-10	species-yr/kg 1,4-DBC emitted to sea water eq.	2,98108E-13	species*yr/kg
2,28E-07	DALY/kg 1,4-DCB emitted to urban air eq.	2,00E-07	DALY/kg
9,10E-07	DALY/kg NOx eq.	2,97E-08	DALY/kg
1,29E-07	Species.year/kg NOx eq.	6,79E-09	species*yr/kg
1,14E-11	species*yr/kg 1,4-DBC emitted to industrial soil	1,80774E-14	species*yr/kg
6,95E-10	species-yr/kg 1,4-DBC emitted to freshwater eq.	4,44E-12	species*yr/kg
1,05E-10	species-yr/kg 1,4-DBC emitted to sea water eq.	3,37E-13	species*yr/kg
2,28E-07	DALY/kg 1,4-DCB emitted to urban air eq.	8,04E-13	DALY/kg
9,10E-07	DALY/kg NOx eq.	2,31E-08	DALY/kg
1,29E-07	Species.year/kg NOx eq.	5,28E-09	species*yr/kg

MIDPOINT TO ENDPOINT FACTOR	UNITS	ENDPOINT FACTORS	UNITS
3,10E-09	Daly/m^3 consumed	3,10E-09	Daly/m^3 consumed
6,04E-13	species.yr/m^3 consumed	6,04E-13	species.yr/m^3 consumed
8,12E-08	DALY/kg CO2 eq.	2,28075E-08	DALY/kg
5,32E-10	Species.year/kg CO2 eq.	1,49428E-10	species*yr/kg

2. Synthesis process per 15g of CNT													
INPUT		Quantities		Category	MIDPOINT FACTOR	UNIT	MIDPOINT TO ENDPOINT	UNITS	ENDPOINT FACTOR	UNITS			
Catalytic particles		0,00044	kg	-	-	-	-	-	-	-			
Acetylene	C2H2	0,03686	kg	Human damage ozone formati	0,025385899	kg NO_x-eq/kg	9,10E-07	DALY/kg NOx eq.	2,31E-08	DALY/kg	2,31E-08		
Acetylene	C2H2	0,03686	kg	Ecosystem damage ozone forn	0,04	kg NO_x-eq/kg	1,29E-07	Species.year/kg NO	5,16E-09	species*yr/kg	5,16E-09		
Argon as	Ar	0,1608	kg	-	-	-	-	-	-	-			
Electricity input		5	kWh	human health	0,28088	kg CO_2	8,12E-08	DALY/kg CO2 eq.	2,28075E-08	DALY/kg	2,28E-08		
Electricity input		5	kWh	freshwater ecosystems	0,28088	kg CO_2	5,32E-10	ecies.year/kg CO2 e	1,49428E-10	species*yr/kg	1,49E-10		
OUTPUT													
Argon as	Ar	0,1608	kg	-	-	-	-	-	-	-			
Acetylene	C2H2	0,00343	kg	Human damage ozone formati	0,025385899	kg NO_x-eq/kg	9,10E-07	DALY/kg NOx eq.	2,31E-08	DALY/kg	2,31E-08		
Acetylene	C2H2	0,00343	kg	Ecosystem damage ozone forn	0,04	kg NO_x-eq/kg	1,29E-07	Species.year/kg NO	5,16E-09	species*yr/kg	5,16E-09		
VOC		0,0027	kg	Human damage ozone formati	1,80E-01	kg NO_x-eq/kg	9,10E-07	DALY/kg NOx eq.	1,64E-07	DALY/kg	1,64E-07		
VOC		0,0027	kg	Ecosystem damage ozone forn	2,90E-01	kg NO_x-eq/kg	1,29E-07	Species.year/kg NO	3,74E-08	species*yr/kg	3,74E-08		
PAHs		0,000034	kg	Terrestrial ecotoxicity	3,81E+01	1,4-DCB eq. emitted	1,14E-11	species*yr/kg 1,4-D	4,34E-10	species*yr/kg	4,34E-10		
PAHs		0,000034	kg	Freshwater ecotoxicity	1,30E+01	1,4-DCB eq. emitted	6,95E-10	species-yr/kg 1,4-DE	9,04E-09	species*yr/kg	9,04E-09		
PAHs		0,000034	kg	Marine ecotoxicity	1,10E+01	1,4-DCB eq. emitted	1,05E-10	species-yr/kg 1,4-DE	1,16E-09	species*yr/kg	1,16E-09		
PAHs		0,000034	kg	Human carcinogenic toxicity	3,25E+01	1,4-DCB eq. emitted	3,32E-06	DALY/kg 1,4-DCB em	1,08E-04	DALY/kg	1,08E-04		
PAHs		0,000034	kg	Human non carcinogenic toxi	6,01E+00	1,4-DCB eq. emitted	2,28E-07	DALY/kg 1,4-DCB em	1,37E-06	DALY/kg	1,37E-06		
Soot		0,00065	kg	Human carcinogenic toxicity	3,25E+01	1,4-DCB eq. emitted	3,32E-06	DALY/kg 1,4-DCB em	1,08E-04	DALY/kg	1,08E-04		
Soot		0,00065	kg	Human non carcinogenic toxi	6,01E+00	1,4-DCB eq. emitted	2,28E-07	DALY/kg 1,4-DCB em	1,37E-06	DALY/kg	1,37E-06		
Soot		0,00065	kg	Terrestrial ecotoxicity	3,81E+01	1,4-DCB eq. emitted	1,14E-11	species*yr/kg 1,4-D	4,34E-10	species*yr/kg	4,34E-10		
Soot		0,00065	kg	Freshwater ecotoxicity	1,30E+01	1,4-DCB eq. emitted	6,95E-10	species-yr/kg 1,4-DE	9,04E-09	species*yr/kg	9,04E-09		
Soot		0,00065	kg	Marine ecotoxicity	1,10E+01	1,4-DCB eq. emitted	1,05E-10	species-yr/kg 1,4-DE	1,16E-09	species*yr/kg	1,16E-09		

Εικόνα 4.2: *Συλλογή δεδομένων στο εργαλείο MS Excel*

Synthesis process per 50g of P (MAA-co-EGMA)

ECOSYSTEM QUALITY

Material	Quantity (in kg)	Emission Factor	Units	Emissions
ACN (Terrestrial ecotoxicity)	1,173	4,44311E-12	species*year	5,21177E-12
ACN (Freshwater ecotoxicity)	1,173	6,07E-12	species*year	7,12097E-12
ACN (Marine ecotoxicity)	1,173	2,98108E-13	species*year	3,49681E-13
Methacrylic Acid (MAA) (Ecosystem damage ozone fo	0,03264	6,79E-09	species*year	2,21497E-10
Methacrylic Acid (MAA) (Terrestrial ecotoxicity)	0,03264	1,81E-14	species*year	5,90E-16
Methacrylic Acid (MAA) (Freshwater ecotoxicity)	0,03264	4,44E-12	species*year	1,45E-13
Methacrylic Acid (MAA) (Marine ecotoxicity)	0,03264	3,37E-13	species*year	1,10E-14
Ethylene Glycol Dimethacrylate (Ecosystem damage	0,0063	5,28E-09	species*year	3,32517E-11
				0
				2,67587E-10

HUMAN HEALTH

Material	Quantity (in kg)	Emission Factor	Units	Emissions
ACN (Human noncarcinogenic toxicity)	1,173	2,00E-07	DALY	2,34309E-07
Methacrylic Acid (MAA) (Photochemical ozone forma	0,03264	2,97E-08	DALY	9,69457E-10
Methacrylic Acid (MAA) (Human noncarcinogenic tox	0,03264	8,04E-13	DALY	2,62325E-14
Ethylene Glycol Dimethacrylate (Human damage ozo	0,0063	2,31E-08	DALY	1,45537E-10
				0
				2,35424E-07

ECOSYSTEM QUALITY-water consumption

Material	Quantity (in m3)	Emission Factor	Units	Emissions
Water	7,2	6,04E-13	species*year	4,3488E-12

HUMAN HEALTH-water consumption

Material	Quantity (in m3)	Emission Factor	Units	Emissions
Water	7,2	3,10E-09	DALY	2,23E-08

ECOSYSTEM QUALITY- electricity consumption

Material	Quantity (in kWh)	Emission Factor	Units	Emissions
Electricity	2	1,49428E-10	species*year	2,98856E-10

HUMAN HEALTH-electricity

Material	Quantity (in kWh)	Emission Factor	Units	Emissions
Electricity	2	2,28E-08	DALY	4,56149E-08

Total emissions in Ecosystem Quality	**5,70793E-10**	**species*year**
Total emissions in Human Health	**3,03E-07**	**DALY**

Synthesis process per 50g of P (MAA-co-EGMA)

ECOSYSTEM QUALITY

Material	Quantity (in kg)	Emission Factor	Units	Emissions
Acetylene as carbon source	0,03686	5,16E-09	species*year	1,90198E-10
Acetylene (output)	0,00343	5,16E-09	species*year	1,76988E-11
VOC	0,0027	3,74E-08	species*year	1,0098E-10
PAHs	0,000034	4,34E-10	species*year	1,4756E-14
PAHs	0,000034	9,04E-09	species*year	3,0736E-13
PAHs	0,000034	1,16E-09	species*year	3,944E-14
Soot	0,00065	4,34E-10	species*year	2,821E-13
Soot	0,00065	9,04E-09	species*year	5,876E-12
Soot	0,00065	1,16E-09	species*year	7,54E-13
				3,1615E-10

HUMAN HEALTH

Material	Quantity (in kg)	Emission Factor	Units	Emissions
Acetylene as carbon source	0,03686	2,31E-08	DALY	8,51E-10
Acetylene (output)	0,00343	2,31E-08	DALY	7,92E-11
VOC	0,0027	1,64E-07	DALY	4,43E-10
VOC	0,0027	1,08E-04	DALY	2,92E-07
VOC	0,0027	1,37E-06	DALY	3,70E-09
PAHs	0,000034	1,08E-04	DALY	3,67E-09
PAHs	0,000034	1,37E-06	DALY	4,66E-11
Soot	0,00065	1,08E-04	DALY	7,02E-08
Soot	0,00065	1,37E-06	DALY	8,91E-10
				3,71E-07

ECOSYSTEM QUALITY- electricity consumption

Material	Quantity (in kWh)	Emission Factor	Units	Emissions
Electricity	5	1,49E-10	species*year	7,4714E-10

HUMAN HEALTH-electricity

Material	Quantity (in kWh)	Emission Factor	Units	Emissions
Electricity	5	2,28E-08	DALY	1,14E-07

Total Emission in Ecosystem Quality	**1,06329E-09**	**species*year**
Total Emission in Human Health	**4,84629E-07**	**DALY**

Εικόνα 4.3: *Αποτελέσματα στο εργαλείο MS Excel*

Κεφάλαιο 5ο-Συμπεράσματα

Συμπερασματικά μπορούμε να σημειώσουμε ότι στα πλαίσια της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας:

- **Διαμορφώθηκε και αναπτύχθηκε λογισμικό / εργαλείο LCA ανοιχτής πρόσβασης και γρήγορης αποτίμησης του περιβαλλοντικού αποτυπώματος διεργασιών σύνθεσης νανοσωματιδίων καθώς και των νανοσωματιδίων ως τελικά προϊόντα με την βοήθεια του προγράμματος MS Excel.**

- **Χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό / εργαλείο LCA που αναπτύχθηκε για την αποτίμηση του περιβαλλοντικού αποτυπώματος των πολυμερικών νανοσφαιρών και των CNTs. Από την σύγκριση των δύο διεργασιών προέκυψε οτι τα CNTs ως νανοϋλικά είναι πιο επιβλαβή για τον άνθρωπο και το περιβάλλον συγκριτικά με τα πολυμερικά νανοσφαιρίδια.**

- **Συγκρίνοντας βιβλιογραφικά την επικινδυνότητα των πολυμερικών νανοσφαιρών και των CNTs προκύπτει ότι τα CNTs είναι πιο επικίνδυνα για την υγεία και το περιβάλλον συγκριτικά με τα πολυμερικά νανοσφαιρίδια, γεγονός που προκύπτει και απο τα αποτελέσματα της παρούσας μεταπτυχιακής.**

Κεφάλαιο 6ο- Προτάσεις για το μέλλον

Ως συνέχεια της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας προτείνονται τα παρακάτω:

- Η εκτίμηση της ανάλυσης του κύκλου ζωής με το εργαλείο που διαμορφώθηκε στα πλαίσια της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας, για τις πολυμερικές νανοσφαίρες και τα CNTs που μελετήθηκαν σε αυτήν, να μελετηθούν όχι μόνο για τον χρονικό ορίζοντα των 20 χρόνων αλλά και για τον χρονικό ορίζοντα των 100 και των 10000 χρόνων. Έτσι ολοκληρώνεται η καταγραφή του οικολογικού αποτυπώματος των συγκεκριμένων υλικών

- Η εκτίμηση της ανάλυσης του κύκλου ζωής με το εργαλείο που διαμορφώθηκε στα πλαίσια της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας για περισσότερα υλικά.

- Προτείνεται επίσης κατά την ανάλυση του κύκλου ζωής να λαμβάνονται υπόψη δεδομένα από την μεταφορά των υλικών απο το εργοστάσιο στο εργαστήριο και απο το εργαστήριο προς τον ΧΥΤΑ (transportation), καθώς επίσης και από την ανακύκλωση των παραπροϊόντων.

Παράρτημα

Παράρτημα 1: Συντελεστές ενδιάμεσων κατηγοριών σύμφωνα με το ReCipe2016

Water consumption			
	Individualist	Hierarchist	Egalitarian
Water consumption	1,00E+00	1,00E+00	1,00E+00

Terrestrial ecotoxicity			ETPterrestrial	ETPterrestrial	ETPterrestrial
			1,4-DCB eq. emitted to industrial soil	1,4-DCB eq. emitted to industrial soil	1,4-DCB eq. emitted to industrial soil
CAS	name	emission compartment	Individualistic	Hierarchic	Egalitarian
69409945	FLUVALINATE	rural air	3,13E+04	3,14E+04	3,14E+04
70124775	FLUCYTHRINATE	rural air	7,96E+05	7,96E+05	7,96E+05
709988	PROPANIL	rural air	2,59E+03	2,59E+03	2,59E+03
71363	1-Butanol	rural air	4,68E-02	4,68E-02	4,68E-02
71556	1,1,1-Trichloroethane	rural air	2,02E-01	2,03E-01	2,03E-01
72208	ENDRIN	rural air	1,87E+04	1,87E+04	1,87E+04
72435	Methoxychlor	rural air	9,30E+02	9,30E+02	9,30E+02
72559	p,p'-DDE	rural air	5,10E+02	5,10E+02	5,10E+02
72560	1,1-DICHLORO-2,2-BIS(ETHYLPHENYL)ET	rural air	6,24E+01	6,24E+01	6,24E+01
7287196	PROMETRYNE	rural air	1,01E+04	1,01E+04	1,01E+04
732116	PHOSMET	rural air	7,14E+04	7,14E+04	7,14E+04
732263	2,4,6-TRI(TERT-BUTYL)PHENOL	rural air	#N/A	2,13E+01	2,13E+01
74051802	Sethoxydim	rural air	1,60E+02	1,60E+02	1,60E+02
74223646	METSULFURON-METHYL	rural air	1,09E+06	1,09E+06	1,09E+06
74839	Methyl bromide	rural air	5,71E+00	5,71E+00	5,71E+00
75058	Acetonitrile	rural air	3,90E-01	3,90E-01	3,90E-01
75150	CARBON DISULFIDE	rural air	9,61E-01	9,62E-01	9,62E-01
75218	Ethylene oxide	rural air	1,81E+00	1,81E+00	1,81E+00
75252	tribromomethane	rural air	4,41E+00	4,41E+00	4,41E+00
75274	bromodichloromethane	rural air	#N/A	1,83E-01	1,83E-01
75354	1,1-Dichloroethylene	rural air	3,22E-03	3,22E-03	3,22E-03
75478	IODOFORM	rural air	#N/A	2,00E+02	2,00E+02
75650	tert-Butyl alcohol	rural air	6,23E-02	6,23E-02	6,23E-02
759944	EPTC	rural air	6,52E+00	6,52E+00	6,52E+00
76017	pentachloroethane	rural air	2,20E+00	2,22E+00	2,22E+00
76062	Chloropicrin	rural air	#N/A	5,31E+02	5,31E+02
76448	Heptachlor	rural air	1,27E+00	1,27E+00	1,27E+00
76578148	QUIZALOFOP-ETHYL	rural air	1,62E+03	1,62E+03	1,62E+03
76738620	PACLOBUTRAZOL	rural air	6,74E+02	6,74E+02	6,74E+02

Human damage ozone formation / Particulate matter formation / Ecosyste damage ozone formation / Terrestrial acidification / Freshwater eutrophication / Marine eutrophication / Terrestrial ecotoxicity

Terrestrial acidification	AP	AP	AP
	kg SO2-eq/kg	kg SO2-eq/kg	kg SO2-eq/kg
Substance name	Individualist	Hierarchist	Egalitarian
NOx	3,60E-01	3,60E-01	3,60E-01
NH3	1,96E+00	1,96E+00	1,96E+00
SO2	1,00E+00	1,00E+00	1,00E+00
NO	5,52E-01	5,52E-01	5,52E-01
NO2	3,60E-01	3,60E-01	3,60E-01
NO3	2,70E-01	2,70E-01	2,70E-01
SO	1,33E+00	1,33E+00	1,33E+00
SOx	1,00E+00	1,00E+00	1,00E+00
SO3	8,00E-01	8,00E-01	8,00E-01
H2SO4 (sulphuric acid)	6,50E-01	6,50E-01	6,50E-01

Stratospheric ozone depletion		ODP20	ODP100	ODPinfinite
		(kg CFC11-eq/	(kg CFC11-eq/	(kg CFC11-eq/ kg ODS)
Name	**Alternative name (=name in emission datab**	**Individualist**	**Hierarchist**	**Egalitarian**
Annex A-I				
CFC-11		1	1	1
CFC-12		0,421	0,587	0,82
CFC-113		0,504	0,664	0,85
CFC-114		0,165	0,27	0,58
CFC-115		0,032	0,061	0,57
Annex A-II				
Halon-1301	H-1301	11,841	14,066	15,9
Halon-1211	H-1211	15,053	8,777	7,9
Halon-2402	H-2402	22,2	14,383	13
Annex B-II				
CCl_4	tetrachloromethane (carbon tetrachloride)	1,203	0,895	0,82
Annex B-III				
CH_3CCl_3	1,1,1,-trichloroethane (methyl chloroform)	0,396	0,178	0,16
Annex C-I				
HCFC-22		0,085	0,045	0,04
HCFC-123		0,025	0,011	0,01
HCFC-124		0,049	0,022	0,02
HCFC-141b		0,275	0,134	0,12
HCFC-142b		0,111	0,067	0,06
HCFC-225ca		0,05	0,022	0,02
HCFC-225cb		0,073	0,033	0,03
Annex E				
CH_3Br		1,649	0,734	0,66
Others				
Halon-1202		4,247	1,892	1,7
CH_3Cl		0,05	0,022	0,02
N_2O	dinitrogen oxide (nitrous oxide)	0,007	0,011	0,017

Version | Midpoint to endpoint factors | Global Warming | **Stratospheric ozone depletion** | Ionizing radiation | Human damage ozone formation

Photochemical ozone formation				HOFP	HOFP	HOFP
				kg NO_x-eq/kg	kg NO_x-eq/kg	kg NO_x-eq/kg
CAS nr	Substance name			I	H	E
NO_x	nitrogen oxides (as nitrogen dioxide)		air	1,00E+00	1,00E+00	1,00E+00
NMVOC (non-	NMVOC (non-methane volatile		air	1,80E-01	1,80E-01	1,80E-01
	NO		air	1,53E+00	1,53E+00	1,53E+00
	NO3		air	7,40E-01	7,40E-01	7,40E-01
000074-84-0	Ethane		air	0,03	0,03	0,03
000074-98-6	Propane		air	0,05	0,05	0,05
000106-97-8	Butane		air	0,11	0,11	0,11
000075-28-5	i-Butane		air	0,10	0,10	0,10
000109-66-0	Pentane		air	0,15	0,15	0,15
000078-78-4	i-Pentane		air	0,12	0,12	0,12
000463-82-1	Neopentane		air	0,07	0,07	0,07
000110-54-3	Hexane		air	0,15	0,15	0,15
000107-83-5	2-Methylpentane		air	0,15	0,15	0,15
000096-14-0	3-Methylpentane		air	0,16	0,16	0,16
000075-83-2	2,2-Dimethylbutane		air	0,08	0,08	0,08
000079-29-8	2,3-Dimethylbutane		air	0,18	0,18	0,18
000142-82-5	Heptane		air	0,13	0,13	0,13
000591-76-4	2-Methylhexane		air	0,12	0,12	0,12
000589-34-4	3-Methylhexane		air	0,15	0,15	0,15
000111-65-9	Octane		air	0,12	0,12	0,12
000592-27-8	2-Methylheptane		air	0,12	0,12	0,12
000589-81-1	3-Methylheptane		air	0,13	0,13	0,13
000111-84-2	Nonane		air	0,12	0,12	0,12
	2-Methyloctane		air	0,12	0,12	0,12
	3-Methyloctane		air	0,12	0,12	0,12
	4-Methyloctane		air	0,13	0,13	0,13
	3,4-Dimethylheptane		air	0,13	0,13	0,13
000124-18-5	Decane		air	0,13	0,13	0,13

Version | Midpoint to endpoint factors | Global Warming | Stratospheric ozone depletion | Ionizing radiation | **Human damage ozone formation**

Marine eutrophication		
		kg N-eq to marine water/kg
Substance name	emission compartment	all perspectives
N	freshwater	0,30
NH4+	freshwater	0,23
NH3	freshwater	0,24
NO	freshwater	0,14
NO2	freshwater	0,09
NO3	freshwater	0,07
NOx	freshwater	0,09
N	agricultural soil	0,13
NH4+	agricultural soil	0,10
NH3	agricultural soil	0,10
NO	agricultural soil	0,06
NO2	agricultural soil	0,04
NO3	agricultural soil	0,03
NOx	agricultural soil	0,04
N	seawater	1
NH4+	seawater	0,78
NH3	seawater	0,82
NO	seawater	0,47
NO2	seawater	0,30
NO3	seawater	0,23
NOx	seawater	0,30

Marine ecotoxicity				ETPmarine	ETPmarine	ETPmarine
				1,4-DCB eq. emitted to seawater	1,4-DCB eq. emitted to seawater	1,4-DCB eq. emitted to seawater
CAS	name		emission com	I	H	E
69409945	FLUVALINATE	air	rural air	5,18E+02	5,27E+02	5,27E+02
70124775	FLUCYTHRINATE	air	rural air	6,17E+03	6,17E+03	6,17E+03
709988	PROPANIL	air	rural air	1,48E+00	1,50E+00	1,50E+00
71363	1-Butanol	air	rural air	7,78E-04	7,78E-04	7,78E-04
71556	1,1,1-Trichloroethane	air	rural air	6,91E-02	6,89E-02	6,89E-02
72208	ENDRIN	air	rural air	9,60E+02	9,77E+02	9,77E+02
72435	Methoxychlor	air	rural air	1,04E+02	1,07E+02	1,07E+02
72559	p,p'-DDE	air	rural air	6,30E+01	6,40E+01	6,40E+01
72560	1,1-DICHLORO-2,2-BI	air	rural air	2,00E+01	2,00E+01	2,00E+01
7287196	PROMETRYNE	air	rural air	7,54E+00	7,59E+00	7,59E+00
732116	PHOSMET	air	rural air	4,15E+00	4,13E+00	4,13E+00
732263	2,4,6-TRI(TERT-BUTYL	air	rural air	#N/A	3,57E+01	3,57E+01
74051802	Sethoxydim	air	rural air	1,64E-01	1,64E-01	1,64E-01
74223646	METSULFURON-METI	air	rural air	2,98E+02	3,00E+02	3,00E+02
74839	Methyl bromide	air	rural air	6,17E-01	6,25E-01	6,25E-01
75058	Acetonitrile	air	rural air	2,84E-03	2,84E-03	2,84E-03
75150	CARBON DISULFIDE	air	rural air	1,49E-01	1,48E-01	1,48E-01
75218	Ethylene oxide	air	rural air	1,95E-02	1,95E-02	1,95E-02
75252	tribromomethane	air	rural air	2,23E-01	2,23E-01	2,23E-01
75274	bromodichlorometha	air	rural air	#N/A	1,60E-02	1,60E-02
75354	1,1-Dichloroethylene	air	rural air	4,14E-05	4,14E-05	4,14E-05
75478	IODOFORM	air	rural air	#N/A	2,12E+00	2,12E+00
75650	tert-Butyl alcohol	air	rural air	8,46E-04	8,46E-04	8,46E-04
759944	EPTC	air	rural air	9,26E-02	9,24E-02	9,24E-02
76017	pentachloroethane	air	rural air	7,88E-01	8,43E-01	8,43E-01
76062	Chloropicrin	air	rural air	#N/A	4,69E+01	4,69E+01
76448	Heptachlor	air	rural air	2,49E+00	2,49E+00	2,49E+00
76578148	QUIZALOFOP-ETHYL	air	rural air	2,67E+00	2,67E+00	2,67E+00
76738620	PACLOBUTRAZOL	air	rural air	4,12E-01	4,15E-01	4,15E-01

Particulate matter formation / Ecosyste damage ozone formation / Terrestrial acidification / Freshwater eutrophication / Marine eutrophication / Terrestrial ecotoxicity / F

Ionizing radiation				IRP	IRP	IRP
				kBq Co-60 to air	kBq Co-60 to a	kBq Co-60 to air eq/kBq
Name	Alternative name	Concatenated na	Emission compartment	Individualist	Hierarchist	Egalitarian
Am-241	Americium 241	Americium 241ma	marine water	4,73E-02	4,82E-02	4,82E-02
C-14	Carbon 14	Carbon 14marine	marine water	2,73E-02	2,73E-02	2,73E-02
Cm alpha[a]			marine water	0	0	3,45E+00
Co-60	Cobalt 60	Cobalt 60marine	marine water	2,36E-02	2,36E-02	2,36E-02
Cs-134	Caesium 134	Caesium 134mar	marine water	4,73E-03	4,73E-03	4,73E-03
Cs-137	Caesium 137	Caesium 137mar	marine water	5,82E-03	5,82E-03	5,82E-03
H-3	Tritium	Tritiummarine wa	marine water	3,60E-06	4,05E-06	4,05E-06
I-129	Iodine 129	Iodine 129marine	marine water	2,22E-02	3,00E-02	1,55E+02
Pu alpha[a]			marine water	0	0	4,45E+00
Pu-239	Plutonium 239	Plutonium 239ma	marine water	5,27E-03	5,36E-03	5,73E-03
Ru-106	Ruthenium 106	Ruthenium 106ma	marine water	1,09E-03	1,09E-03	1,09E-03
Sb-125	Antimony 125	Antimony 125mar	marine water	8,91E-04	8,91E-04	8,91E-04
Sr-90	Strontium 90	Strontium 90mari	marine water	4,55E-04	4,55E-04	4,55E-04
Tc-99	Technetium 99	Technetium 99ma	marine water	7,82E-05	7,91E-05	1,09E-04
U-234[a]	Uranium 234	Uranium 234mari	marine water	0	0	1,36E-03
U-235[a]	Uranium 235	Uranium 235mari	marine water	0	0	2,03E-03
U-238[a]	Uranium 238	Uranium 238mari	marine water	0	0	8,33E-04
Actinides, unspecified			marine water	4,30E-04	4,38E-04	4,61E-04

Human non-carcinogenic toxicity				CFhuman-mid-ncarc	CFhuman-mid-ncarc	CFhuman-mid-ncarc
				1,4-DCB eq. emitted to urban air	1,4-DCB eq. emitted to urban air	1,4-DCB eq. emitted to urban ai
CAS	name		emission com	I	H	E
6923224	AZODRIN	air	urban air	4,78E+03	4,78E+03	4,78E+03
69327760	Buprofezin	air	urban air	1,47E+01	1,47E+01	1,47E+01
693981	1H-IMIDAZOLE, 2-MET	air	urban air	#N/A	#N/A	#N/A
69409945	FLUVALINATE	air	urban air	6,71E+01	6,71E+01	6,71E+01
70124775	FLUCYTHRINATE	air	urban air	5,91E+01	5,91E+01	5,91E+01
709988	PROPANIL	air	urban air	3,72E+01	3,72E+01	3,72E+01
71363	1-Butanol	air	urban air	4,31E-01	4,31E-01	4,31E-01
71556	1,1,1-Trichloroethane	air	urban air	3,20E-01	3,21E-01	3,21E-01
72208	ENDRIN	air	urban air	7,98E+02	7,99E+02	7,99E+02
72435	Methoxychlor	air	urban air	1,91E+00	1,91E+00	1,91E+00
72559	p,p'-DDE	air	urban air	#N/A	#N/A	#N/A
72560	1,1-DICHLORO-2,2-BIS	air	urban air	#N/A	#N/A	#N/A
7287196	PROMETRYNE	air	urban air	7,90E+00	7,90E+00	7,90E+00
732116	PHOSMET	air	urban air	1,28E+01	1,28E+01	1,28E+01
732263	2,4,6-TRI(TERT-BUTYL	air	urban air	#N/A	#N/A	#N/A
74051802	Sethoxydim	air	urban air	2,73E+00	2,73E+00	2,73E+00
74223646	METSULFURON-METH	air	urban air	1,27E+01	1,27E+01	1,27E+01
74839	Methyl bromide	air	urban air	1,53E+03	1,53E+03	1,53E+03
75058	Acetonitrile	air	urban air	8,76E-01	8,76E-01	8,76E-01
75150	CARBON DISULFIDE	air	urban air	8,22E+02	8,23E+02	8,23E+02
75218	Ethylene oxide	air	urban air	#N/A	#N/A	#N/A
75252	tribromomethane	air	urban air	7,24E+00	7,24E+00	7,24E+00
75274	bromodichloromethar	air	urban air	3,35E+01	3,35E+01	3,35E+01
75354	1,1-Dichloroethylene	air	urban air	1,92E+00	1,92E+00	1,92E+00
75478	IODOFORM	air	urban air	#N/A	#N/A	#N/A
75650	tert-Butyl alcohol	air	urban air	#N/A	#N/A	#N/A
759944	EPTC	air	urban air	6,46E+00	6,46E+00	6,46E+00
76017	pentachloroethane	air	urban air	#N/A	#N/A	#N/A
76062	Chloropicrin	air	urban air	#N/A	#N/A	#N/A

Human carcinogenic toxicity				CFhuman-mid-carc	CFhuman-mid-carc	CFhuman-mid-carc
				1,4-DCB eq. emitted to urban air	1,4-DCB eq. emitted to urban air	1,4-DCB eq. emitted to urban air
CAS	name		emission com	I	H	E
756796	Phosphonic acid, met	air	rural air	#N/A	3,13E-01	3,13E-01
597251	DMMPA	air	rural air	#N/A	1,21E-01	1,21E-01
551928	1,2-DIMETHYL-5-NITI	air	rural air	#N/A	2,34E+01	2,34E+01
1095905	Methadone Hydrochl	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
58151	AMINOPYRINE	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
24448940	2,4,6(1H,3H,5H)-PYRII	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
57976	7,12-Dimethylbenz(a)	air	rural air	#N/A	4,07E+02	4,07E+02
1643205	N,N-DIMETHYLDODE	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
26049694	2-(2,2-DIMETHYLHYD	air	rural air	#N/A	9,37E+02	9,37E+02
513371	1-CHLORO-2-METHYI	air	rural air	2,67E-01	2,67E-01	2,67E-01
55380342	2,6-DIME-N,N'-DINITI	air	rural air	#N/A	1,01E+02	1,01E+02
25321146	DINITROTOLUENE	air	rural air	#N/A	5,94E+00	5,94E+00
971153	Piperidine, 1,1'-(hexat	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
13256069	N-NITROSODIAMYLA	air	rural air	#N/A	7,27E-01	7,27E-01
74317	N,N'-DIPHENYL-P-BEI	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
86293	DIPHENYLACETONITI	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
102090	CARBONIC ACID, DIPI	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
25265718	DIPROPYLENE GLYCO	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
142461	1,2-HYDRAZINECARB	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
150389	Edetate Trisodium	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
476664	Ellagic Acid	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
518821	EMODIN	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
13838169	ETHRANE [HALOETHE	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
8015303	ENOVID	air	rural air	#N/A	2,27E+03	2,27E+03
6381777	Sodium erythorbate	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
29975164	Estazolam	air	rural air	#N/A	#N/A	#N/A
140670	Benzene, 1-methoxy-	air	rural air	#N/A	2,86E-02	2,86E-02
536334	Ethionamide	air	rural air	#N/A	9,55E+00	9,55E+00
150696	Dulcin	air	rural air	#N/A	5,67E-01	5,67E-01

Terrestrial acidification / Freshwater eutrophication / Marine eutrophication / Terrestrial ecotoxicity / Freshwater ecotoxicity / Marine ecotoxicity / **Human carcinogenic toxicity**

Global Warming			GWP20	GWP100	GWP1000	
			(kg CO2eq/ kg (	(kg CO2ec	(kg CO2eq/ kg GHG)	
Name	Alternative name (=name in emission database if different)	Formula	Individualist	Hierarchist	Egalitarian	
Carbon dioxide		CO2	1	1	1	
Methane		CH4	84	34	4,8	
Fossil methane		CH4	85	36	4,9	GHG: Green house gas
Nitrous oxide	dinitrogen oxide (nitrous oxide)	N2O	264	298	78,8	
Chlorofluorocarbons						
CFC-11		CCl3F	6.900	5.352	875,4	
CFC-12		CCl2F2	10.800	11.547	2709,4	
CFC-13		CClF3	10.900	15.451	12684,1	
CFC-113		CCl2FCClF2	6.490	6.586	1409,5	
CFC-114		CClF2CClF2	7.710	9.615	3492,3	
CFC-115		CClF2CF3	5.860	8.516	8578,8	
Hydrochlorofluorocarbons						
HCFC-21		CHCl2F	543	179	24,6	
HCFC-22		CHClF2	5.280	2.106	295,9	
HCFC-122		CHCl2CF2Cl	218	72	9,9	
HCFC-122a		CHFClCFCl2	945	312	43,2	
HCFC-123		CHCl2CF3	292	96	13,3	
HCFC-123a		CHClFCF2Cl	1.350	447	61,9	
HCFC-124		CHClFCF3	1.870	635	88,2	
HCFC-132c		CH2FCFCl2	1.230	409	56,6	
HCFC-141b		CH3CCl2F	2.550	938	130,9	
HCFC-142b		CH3CClF2	5.020	2.345	332,5	
HCFC-225ca		CHCl2CF2CF3	469	155	21,4	
HCFC-225cb		CHClFCF2CClF2	1.860	633	87,8	
(E)-1-Chloro-3,3,3-trifluoroprop-1-ene		trans-CF3CH=CHCl	5	2	0,3	
Hydrofluorocarbons						
HFC-23		CHF3	10.800	13.856	5664,5	
HFC-32		CH2F2	2.430	817	113,3	

Version / Midpoint to endpoint factors / **Global Warming** / Stratospheric ozone depletion / Ionizing radiation / Human damage ozone formation / Particulate matter formation / Ecosyste damage ozone formation / Terrestrial ac

Freshwater eutrophication		FEP	FEP	FEP
		kg P-eq. to freshwater/kg	kg P-eq. to freshwater/kg	kg P-eq. to freshwater/kg
Substance name	**emission compartmer**	**Individualist**	**Hierarchist**	**Egalitarian**
Phosphorus (P)	freshwater	1	1	1
Phosphate (PO_4^{3-})	freshwater	0,33	0,33	0,33
Phosphoric acid	freshwater	0,32	0,32	0,32
Phosphorus pentoxide	freshwater	0,22	0,22	0,22
Phosphorus (P)	agricultural soil	0,1	0,1	0,1
Phosphate (PO_4^{3-})	agricultural soil	0,033	0,033	0,033
Phosphoric acid	agricultural soil	0,032	0,032	0,032
Phosphorus pentoxide	agricultural soil	0,022	0,022	0,022
Phosphorus (P)	sea water	0	0	0
Phosphate (PO_4^{3-})	sea water	0	0	0
Phosphoric acid	sea water	0	0	0
Phosphorus pentoxide	sea water	0	0	0

Freshwater ecotoxicity				ETPfw	ETPfw	ETPfw
				1,4-DCB eq. emitted to freshwater	1,4-DCB eq. emitted to freshwater	1,4-DCB eq. emitted to freshwater
CAS	name		emission com	I	H	E
69409945	FLUVALINATE	fresh wate	freshwater	1,17E+04	1,17E+04	1,17E+04
70124775	FLUCYTHRINATE	fresh wate	freshwater	1,79E+05	1,80E+05	1,80E+05
709988	PROPANIL	fresh wate	freshwater	2,20E+01	2,20E+01	2,20E+01
71363	1-Butanol	fresh wate	freshwater	1,83E-02	1,83E-02	1,83E-02
71556	1,1,1-Trichloroethane	fresh wate	freshwater	1,20E-01	1,20E-01	1,20E-01
72208	ENDRIN	fresh wate	freshwater	7,67E+03	7,68E+03	7,68E+03
72435	Methoxychlor	fresh wate	freshwater	1,80E+03	1,81E+03	1,81E+03
72559	p,p'-DDE	fresh wate	freshwater	2,86E+02	2,86E+02	2,86E+02
72560	1,1-DICHLORO-2,2-BIS(I	fresh wate	freshwater	1,68E+02	1,68E+02	1,68E+02
7287196	PROMETRYNE	fresh wate	freshwater	2,38E+02	2,38E+02	2,38E+02
732116	PHOSMET	fresh wate	freshwater	4,54E+02	4,54E+02	4,54E+02
732263	2,4,6-TRI(TERT-BUTYL)F	fresh wate	freshwater	#N/A	2,51E+02	2,51E+02
74051802	Sethoxydim	fresh wate	freshwater	7,41E+00	7,41E+00	7,41E+00
74223646	METSULFURON-METHY	fresh wate	freshwater	5,07E+03	5,07E+03	5,07E+03
74839	Methyl bromide	fresh wate	freshwater	3,33E+00	3,33E+00	3,33E+00
75058	Acetonitrile	fresh wate	freshwater	8,73E-03	8,74E-03	8,74E-03
75150	CARBON DISULFIDE	fresh wate	freshwater	3,49E-01	3,49E-01	3,49E-01
75218	Ethylene oxide	fresh wate	freshwater	4,82E-02	4,82E-02	4,82E-02
75252	tribromomethane	fresh wate	freshwater	4,29E-01	4,29E-01	4,29E-01
75274	bromodichloromethane	fresh wate	freshwater	#N/A	4,20E-02	4,20E-02
75354	1,1-Dichloroethylene	fresh wate	freshwater	6,10E-02	6,10E-02	6,10E-02
75478	IODOFORM	fresh wate	freshwater	#N/A	5,93E+00	5,93E+00
75650	tert-Butyl alcohol	fresh wate	freshwater	6,70E-03	6,70E-03	6,70E-03
759944	EPTC	fresh wate	freshwater	3,47E+00	3,47E+00	3,47E+00
76017	pentachloroethane	fresh wate	freshwater	5,09E-01	5,09E-01	5,09E-01
76062	Chloropicrin	fresh wate	freshwater	#N/A	1,17E+02	1,17E+02
76448	Heptachlor	fresh wate	freshwater	2,53E+02	2,53E+02	2,53E+02
76578148	QUIZALOFOP-ETHYL	fresh wate	freshwater	6,93E+01	6,93E+01	6,93E+01
76738620	PACLOBUTRAZOL	fresh wate	freshwater	6,67E+00	6,67E+00	6,67E+00

Particulate matter formation | Ecosyste damage ozone formation | Terrestrial acidification | Freshwater eutrophication | Marine eutrophication | Terrestrial ecotoxicity

Παράρτημα2: Συντελεστές μετατροπής ενδιάμεσων κατηγοριών στις τελικές κατηγοριών σύμφωνα με το ReCipe2016

A	B	C	D	E
Midpoint to endpoint conversion factor	**unit**	**Individualistic**	**Hierarchic**	**Egalitarian**
Human health				
Global Warming - Human health	DALY/kg CO2 eq.	8,12E-08	9,28E-07	1,25E-05
Stratospheric ozone depletion - Human health	DALY/kg CFC11 eq.	2,37E-04	5,31E-04	1,34E-03
Ionzing Radiation - Human health	DALY/kBq Co-60 emitted to air eq.	6,80E-09	8,50E-09	1,40E-08
Fine particulate matter formation - Human health	DALY/kg PM2.5 eq.	6,29E-04	6,29E-04	6,29E-04
Photochemical ozone formation - Human health	DALY/kg NOx eq.	9,10E-07	9,10E-07	9,10E-07
Toxicity - Human health (cancer)	DALY/kg 1,4-DCB emitted to urban air eq.	3,32E-06	3,32E-06	3,32E-06
Toxicity - Human health (non-cancer)	DALY/kg 1,4-DCB emitted to urban air eq.	2,28E-07	2,28E-07	2,28E-07
Water consumption - human health	Daly/m3 consumed	3,10E-06	2,22E-06	2,22E-06
Terrestrial ecosystems				
Global Warming - Terrestrial ecosystems	Species.year/kg CO2 eq.	5,32E-10	2,80E-09	2,50E-08
Photochemical ozone formation - Terrestrial ecosyste	Species.year/kg NOx eq.	1,29E-07	1,29E-07	1,29E-07
Acidification - Terrestrial ecosystems	Species.year/kg SO2 eq.	2,12E-07	2,12E-07	2,12E-07
Toxicity - Terrestrial ecosystems	species*yr/kg 1,4-DBC emitted to industrial soil eq.	1,14E-11	1,14E-11	1,14E-11
Water consumption - terrestrial ecosystems	species.yr/m3 consumed	0,00E+00	1,35E-08	1,35E-08
Land use - occupation and transformation	Species/(m2·annual crop eq)	8,88E-09	8,88E-09	8,88E-09
Freshwater ecosystems				
Global Warming - Freshwater ecosystems	Species.year/kg CO2 eq.	1,45E-14	7,65E-14	6,82E-13
Eutrophication - Freshwater ecosystems	Species.year/kg P to freshwater eq.	6,71E-07	6,71E-07	6,71E-07
Toxicity - Freshwater ecosystems	species·yr/kg 1,4-DBC emitted to freshwater eq.	6,95E-10	6,95E-10	6,95E-10
Water consumption -aquatic ecosystems	species.yr/m3 consumed	6,04E-13	6,04E-13	6,04E-13
Marine ecosystems				
Toxicity - Marine ecosystems	species·yr/kg 1,4-DBC emitted to sea water eq.	1,05E-10	1,05E-10	1,05E-10
Eutrophication - Marine ecosystems	Species.year/kg N to marine water eq.	1,70E-09	1,70E-09	1,70E-09

Marine ecosystems				
Toxicity - Marine ecosystems	species·yr/kg 1,4-DBC emitted to sea water eq.	1,05E-10	1,05E-10	1,05E-10
Eutrophication - Marine ecosystems	Species.year/kg N to marine water eq.	1,70E-09	1,70E-09	1,70E-09

Resources				
Mineral resource scarcity	USD2013/kg Cu	1,59E-01	2,31E-01	2,31E-01
Fossil resource scarcity		**Endpoint characterisation factors**		
Crude oil	USD2013/kg	0,46	0,46	0,46
Hard coal	USD2013/kg	0,03	0,03	0,03
Natural gas	USD2013/Nm3	0,30	0,30	0,30
Brown coal	USD2013/kg	-	-	0,03
Peat	USD2013/kg	-	-	0,03

Βιβλιογραφία

Curran, M., Hellweg, S., & Beck, J. (2014). Is there any empirical support for biodiversity offset policy? 617-632.

Drexler, E. (1986). *Engines of Creation.* USA.

Edelstein, A. S. (2001). Science and Technology. *Encyclopedia of Materials*.

Ekvall, T. (2000). *Moral philosophy, economics, and life cycle inventory analysis. Proceedings of Total Life Cycle Conference and Exposition.* Detroit: Society of Automotive Engineers.

Finnveden, G., Hauschild, M. Z., Ekvall, J., Guine, J., & Heijungs, R. (2009). Recent developments in Life Cycle Assessment. 1-21.

Goedkoop, M., Oele, M., Leijting, J., Ponsioen, T., & Meijer, E. (2013). *Introduction to LCA with SimaPro.* The Netherlands: PRE.

Gottschalk, E., & Nowack, B. (2011). The release of engineered nanomaterials to the environment. 1145-1155.

GOV.UK. (2018, 06 08). *GOV.UK.* Ανάκτηση από https://www.gov.uk/government/collections/government-conversion-factors-for-company-reporting

Gusev, A. I., & Rempel, A. A. (2003). *Nanocrystalline Materials.* Cambridge International Science Publishing Ltd.

Han, Z. J. (2011). Ανάκτηση από https://www.researchgate.net/figure/The-classification-and-examples-of-nanomaterials-with-0D-1D-and-2D-structures_fig2_230991381

Hauschild, M. Z., & Huijbregts, M. A. (2015). Introducing Life Cycle Impact Assessment. *Life Cycle Impact Assessment*, 1-16.

ISO. (2006). *Environmental Management - Life Cycle Assessment - Requirements and Guidelines.* Geneva: Internation Standardisation Organisation.

Lazarevic, D., & Finnveden, G. (2013). *Life cycle aspects of nanomaterials. In: Environmental Strategies Research KTH.* Stockholm: Royal Institute of Technology.

Lundie, S., Peters, G., & Beavis, P. C. (2004). Life Cycle Assessment for Sustainable Metropolitan Water Systems Planning. *Environmental Science and Technology*, 3465-3473.

Moriarty, P. (2001). Nanostructured materials. *Reports on Progress in Physics*.

Parsons, S. (2016). *Interpreting Life Cycle Assessment for Decision-Making on Emerging Materials.* Surrey: University of Surrey.

Profile, U. (2017). *Union Profile*. Ανάκτηση από Union Profile: https://www.unionprofile.gr/el/analisi-kiklou-zois-ke-energiaki-simansi-koufomaton/

Quora. (2012). *Quora*. Ανάκτηση από https://www.quora.com/Are-nanoparticles-potentially-dangerous-to-human-health#

Rasmussen, K., Sokull-Kluttgen, B., Yu, J., Kanno, J., Hirose, A., & Gwinn, M. R. (2017). *Adverse Effects of Engineered Nanomaterials (Second Edition).* Academic Press.

Rebitzera, G., Ekvallb, T., Frischknechtc, R., Hunkelerd, D., Norrise, G., Rydbergf, T., και συν. (2004). Framework, goal and scope definition, inventory analysis and applications. *30*, 701-720.

ReCipe. (2016). *A harmonized life cycle impact assessment method at midpoint and endpoint level.* National Institute for Public Health and the Environment.

Roland, R. (2013). *Life cycle assessment of manufactured nanomaterials Inventory modelling rules and application example.* Zurich: ETH.

Salieri, B., Turner, D. A., & Hischier, R. (2018). Life cycle assessment of manufactured nanomaterials: Where are we? 108-120.

SETAC. (1993). *Guidelines for Life Cycle Assessment: A code of Practice. .* Pensacola: SETAC Foundation for Environmental Education.

Sleeswijk, A. W., Van Oers, L. F., Guinée, J. B., Struijs, J., & Huijbregts, M. A. (2008). Normalisation in product life cycle assessment: An LCA of the global and European economic systems in the year 2000. *Science of the Total Environment*, 227-240.

Trompeta, A., Koklioti, M. A., Perivoliotis, D. K., Lynch, I., & Charitidis, K. A. (2016). Towards a holistic environmental impact assessment of carbon. *Journal of Cleaner Production*, 384-394.

Valery, P. (2009, 12 09). *CONVERGING TECHNOLOGIES IN NANOTECHNOLOGY EDUCATION.* Ανάκτηση από NANOTECHNOLOGY.CZ: http://www.nanotechnology.cz/view.php?cisloclanku=2007100010

wiki. (2016, 10 16). *wiki*. Ανάκτηση από https://el.wikipedia.org/wiki/Αιθάλη

wikipedia. (2017, 11 18). Ανάκτηση από https://el.wikipedia.org/wiki/πτητική_οργανική_ένωση

Wikipedia. (2018). *Wikipedia*. Ανάκτηση από https://en.wikipedia.org/wiki/Nanotechnology

Βαλαβανίδης, Θ., & Ευσταθίου, Κ. (2012, 05). *Η χημική ένωση του μήνα*. Ανάκτηση από http://195.134.76.37/chemicals/chem_benzopyrene.htm

Κορωναίος, Χ. (2016). *Η ολοκληρωμένη Περιβαλλοντική Προσέγγιση στην Ολοκληρωμένη Ανάπτυξη.* ΑΘΗΝΑ: Μεταπτυχιακή εργασία.

Παπαϊωαννίδης, Δ. (2010). *Μελέτη νανοσωματιδίων χρυσού με φασματοσκοπία Raman και εφαρμογές.* Θεσσαλονίκη: ΙΚΕΕ.

Χαριτίδης, Κ. Α. (n.d.). *ΔΟΜΕΣ & ΝΑΝΟΫΛΙΚΑ - Σύνθεση, Ιδιότητες & Εφαρμογές .* Αθήνα.