

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl

Produktname: Thermolyseöl
 Ausgangsstoff: Reifengummi
 Herstellungsprozess: Pyrum-Thermolyse

Autor	Dipl.-Chem. David Hafner	Erstellt am	05.11.2018
Dok.-Nr.	901	Version	6.0
Seitenanzahl	19	© 2018 Pyrum Innovations AG	
Revisionsindex	Datum	Beschreibung	
Version 1.0	06.07.2017	Erstellung des SSB	
Version 2.0	20.07.2017	Einarbeitung Anteile Siedebereich und Kettenlängen	
Version 3.0	08.09.2017	Datenerweiterung	
Version 4.0	25.09.2017	H+P Sätze	
Version 5.0	02.07.2018	NMR-, UV-Vis- und IR-Spektroskopie	
Version 6.0	05.11.2018	Zweidimensionale Gaschromatographie	

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl



Inhaltsverzeichnis





1	Sicherheitsinformation	3
2	Physikalische Eigenschaften	4
3	Chemische Eigenschaften	6
4	Chemische Analyse	6
4.1	NMR-Spektroskopie	6
4.1.1	¹ H-NMR Spektroskopie	6
4.1.2	¹³ C-NMR Spektrum	8
4.1.3	Zusammenfassung	10
4.2	UV-Vis Spektroskopie	10
4.2.1	Methodenbeschreibung	10
4.2.2	Ergebnisse	11
4.3	IR-Spektroskopie	12
4.3.1	Methodenbeschreibung	12
4.3.2	Ergebnisse	12
5	Physiologische Eigenschaften	14
6	Zusammensetzung	14
6.1	Anteile an Stoffgruppen und C-Kettenlänge	15
6.1.1	Aromatische Bestandteile	15
6.1.2	Nicht-aromatische Bestandteile	15
6.1.3	Anteile einzelner Stoffe/Moleküle	16
6.2	Atomare Zusammensetzung	17
6.3	Verunreinigungen	18
7	Anwendungsbeispiele	18
8	Sonstige Angaben	18
8.1	Relevante Gefahrenhinweise	18
8.2	Relevante Sicherheitshinweise	19

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl

1 Sicherheitsinformation

Tabelle 1: Relevante Gefahrenkennzeichnung für Verpackungen und Sicherheitsdatenblätter nach GHS

			
H225; H226; H228	H312; H315; H319; H332; H335; H336	H340; H350; H351; H361d; H373	H400; H410; H411; H412

P-Sätze: P201; P210; P260; P261; P273; P280; P301+P310; P301+P312+P330; P304+P340+P312;
P304+P340+P312; P331; P370+P378; P391; P403+P235; P501

Tabelle 2: Empfohlene persönliche Schutzausrüstung





			
PSA - lange Sicherheitskleidung	Geschlossene Sicherheitsschuhe	Schutzbrille	Beständige Handschuhe

Tabelle 3: Relevante Warnhinweise und Verbote für technische Anwendungen

			
Giftiger Stoff	Gefahr einer explosionsgefährlichen Atmosphäre	Keine offenen Flammen	Nicht mit Wasser löschen

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl



Gefahrgut ADR/RID/ADN 1993 ENTZÜNDBARER FLÜSSIGER STOFF, N.A.G. (BENZEN, TOLUEN), UMWELTGEFÄHRDEND

Alle gegebenen Sicherheitsinformationen basieren auf Erfahrungswerte und dienen lediglich der Information und der Sensibilisierung auf bestimmte Sicherheitsaspekte. Diese ersetzen keine eigene Risiko- und Gefahrenbetrachtung des Anwenders.

2 Physikalische Eigenschaften

Aggregatzustand:	flüssig (unter Normbedingungen)		
Farbe:	braun-gelb		
pH-Wert:	7,5 bis 9		DIN 38404C5
Dichte bei 20 °C	810 bis 910	kg/m ³	pyknometrisch, EN ISO 12185
Heizwert H _o :	35 bis 45	MJ/kg	DIN EN 15400
kin. Viskosität bei 20 °C:	2,5 bis 4,5	mm ² /s	NF RN ISO3104
kin. Viskosität bei 40 °C:	1,1 bis 2,6	mm ² /s	NF RN ISO3104
kin. Viskosität bei 50 °C:	1,6	mm ² /s	DIN 51366
kin. Viskosität bei 60 °C:	2,0 bis 2,6	mm ² /s	NF RN ISO3104
kin. Viskosität bei 75 °C:	1,1	mm ² /s	DIN 51366
dyn. Viskosität bei 20 °C:	2,5 bis 5,5	mPas	ASTM D7042
dyn. Viskosität bei 40 °C:	2,6	mPas	ASTM D7042
dyn. Viskosität bei 40 °C:	0,8 bis 1,5	mPas	Ph. Eur. 2.2.10
dyn. Viskosität bei 60 °C:	1,7 bis 2,1	mPas	ASTM D7042
Flammpunkt:	<-20 bis 40	°C	Pensky Martens, DIN51755, EN22719
Zündtemperatur	> 200	°C	Schätzwert
Siedebereich	70 bis 550	°C	ASTM D2887 Extended

Ein Beispiel für den Siedebereich ist in Abbildung 1 dargestellt.

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl

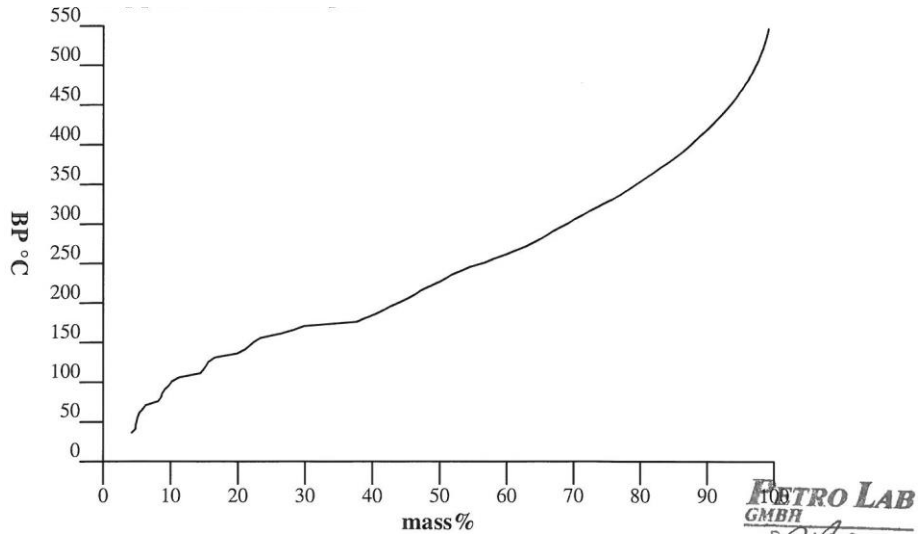


Abbildung 1: Siedebereich (Siedepunktverteilung = BP) gemäß einer simulierten Destillation nach ASTM D2887 Ext. Beispiel

Die Anteile der jeweiligen Siedefraktion mit Ihren Abweichungen zeigt Abbildung 2.

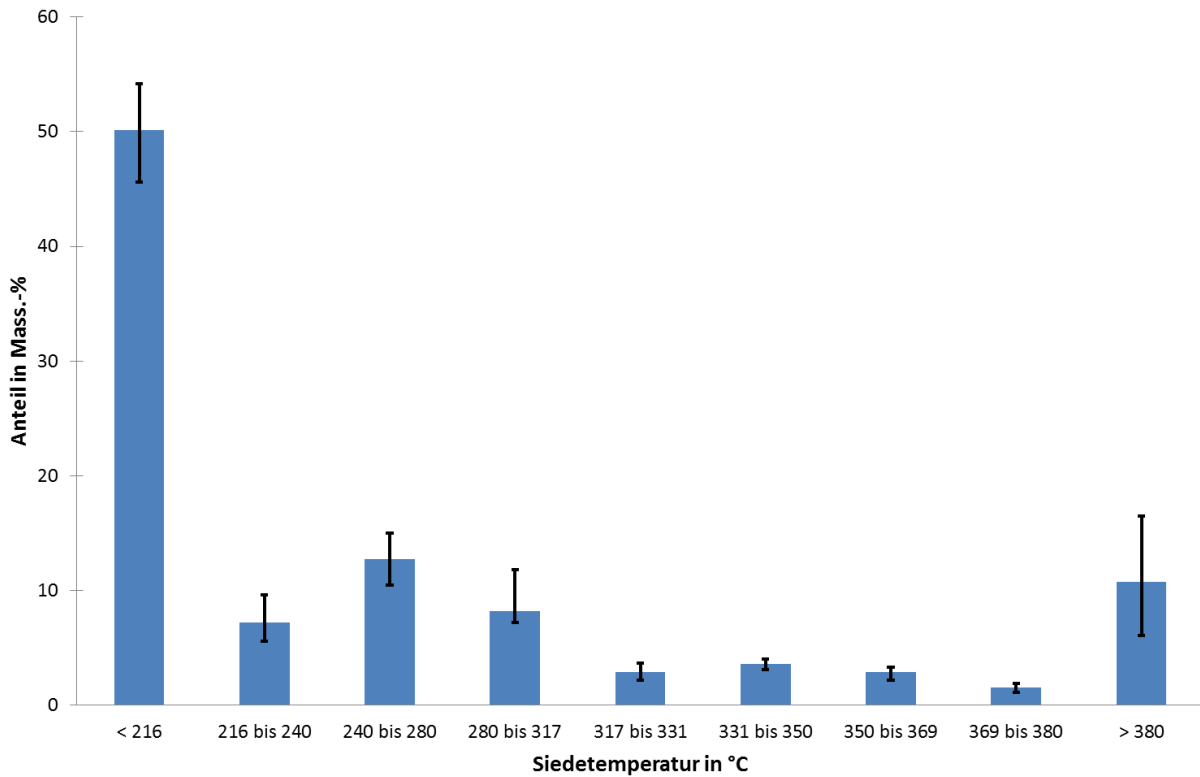


Abbildung 2: Anteile der jeweiligen Siedefractionen

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl



3 Chemische Eigenschaften

- Korrosiv gegenüber nicht passivierte Stähle
- Löst Polystyrol
- Quellend für viele Kunststoffe

4 Chemische Analyse

4.1 NMR-Spektroskopie

4.1.1 ¹H-NMR Spektroskopie

4.1.1.1 Methodenbeschreibung

NMR-Spektrometer: Jeol JNM ECS400 mit 5 mm probe 40TH5AT/FG, Fieldgradient-System und Auto-Tuning

Parameter:

Frequency/Field: 400 MHz / 9.38 Tesla

X_offset: 7.0 ppm

X_sweep: 8.5 kHz

X_points: 32768

X_angle: 45°

Relaxation delay: 1 sec

X_acq_time: 3.85 sec

Repetition_time: 4.85 sec

Scans: 16

Temperature Raumtemperatur

Lösungsmittel: Chloroform (CDCl₃)

Referenz: Tetramethylsilan (TMS) TMS dient als interne Referenz für die chemische Verschiebung (TMS = 0.00 ppm).

Probenvorbereitung: 0,2 ml der Probe werden in 2 ml Lösungsmittel gelöst.

Stoffsteckbrief Thermolyseöl



4.1.1.2 Ergebnisse

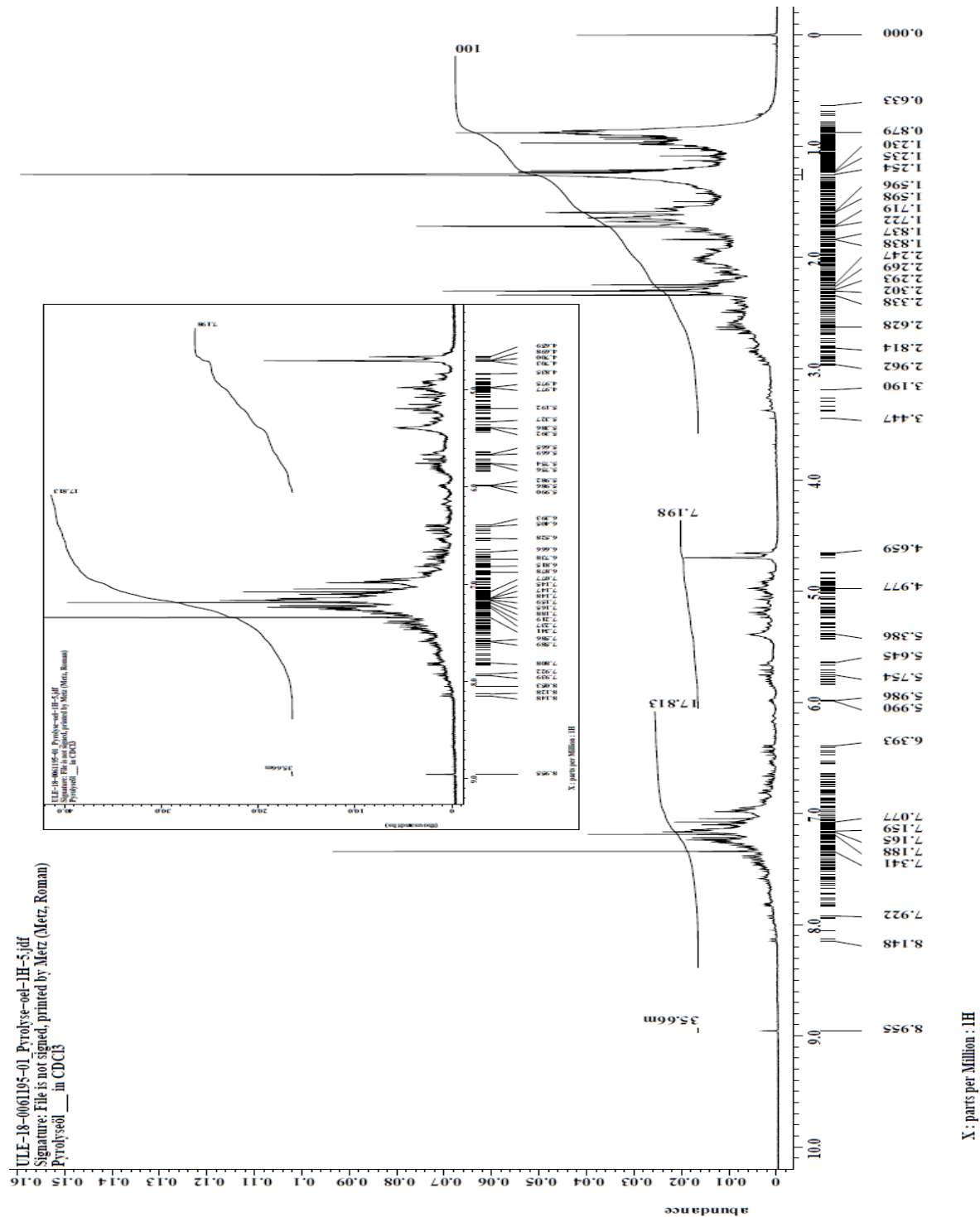


Abbildung 3: ¹H-NMR- Spektrum des Pyrolyseöls mit deuteriertem Chloroform (CDCl₃) als Lösungsmittel und Tetramethylsilan (TMS) als Referenz

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl



Tabelle 4: Ergebnisse der Zuordnung der Signale im ¹H-NMR Spektrum

	Chemical Shift [ppm]	Signal splitting	Integration der Signale [/]	Zuordnung
Pyrolyseöl	6.2 – 8.2	Überlagerte Signale, Multipletts	18	Aromatische Protonen Olefinische Protonen
	4.5 – 6.2		7.2	
	0.5 – 3.5	Überlagerte Signale, Multipletts	100	Aliphatische Protonen
	7.1 – 7.6	Singulett	---	Lösungsmittel CDCl ₃ Überlagertes Signal mit der Probe

4.1.2 ¹³C-NMR Spektrum

4.1.2.1 Methodenbeschreibung

NMR-Spektrometer: Jeol JNM ECS400 mit 5 mm probe 40TH5AT/FG, Fieldgradient-System und Auto-Tuning

Parameter:

Frequency/Field: 100 MHz / 9.38 Tesla
 X_offset: 105 ppm
 X_sweep: 28.9 kHz
 X_points: 32768
 X_angle: 45°
 Relaxation delay: 2 sec
 X_acq_time: 1.13 sec
 Repetition_time: 3.13 sec
 Scans: 256
 Temperatur: Raumtemperatur
 Lösungsmittel: Chloroform (CDCl₃)
 Referenz: Lösungsmittel

Probenvorbereitung: 0,2 ml der Probe werden in 2 ml Lösungsmittel gelöst.

Stoffsteckbrief Thermolyseöl



4.1.2.2 Ergebnisse

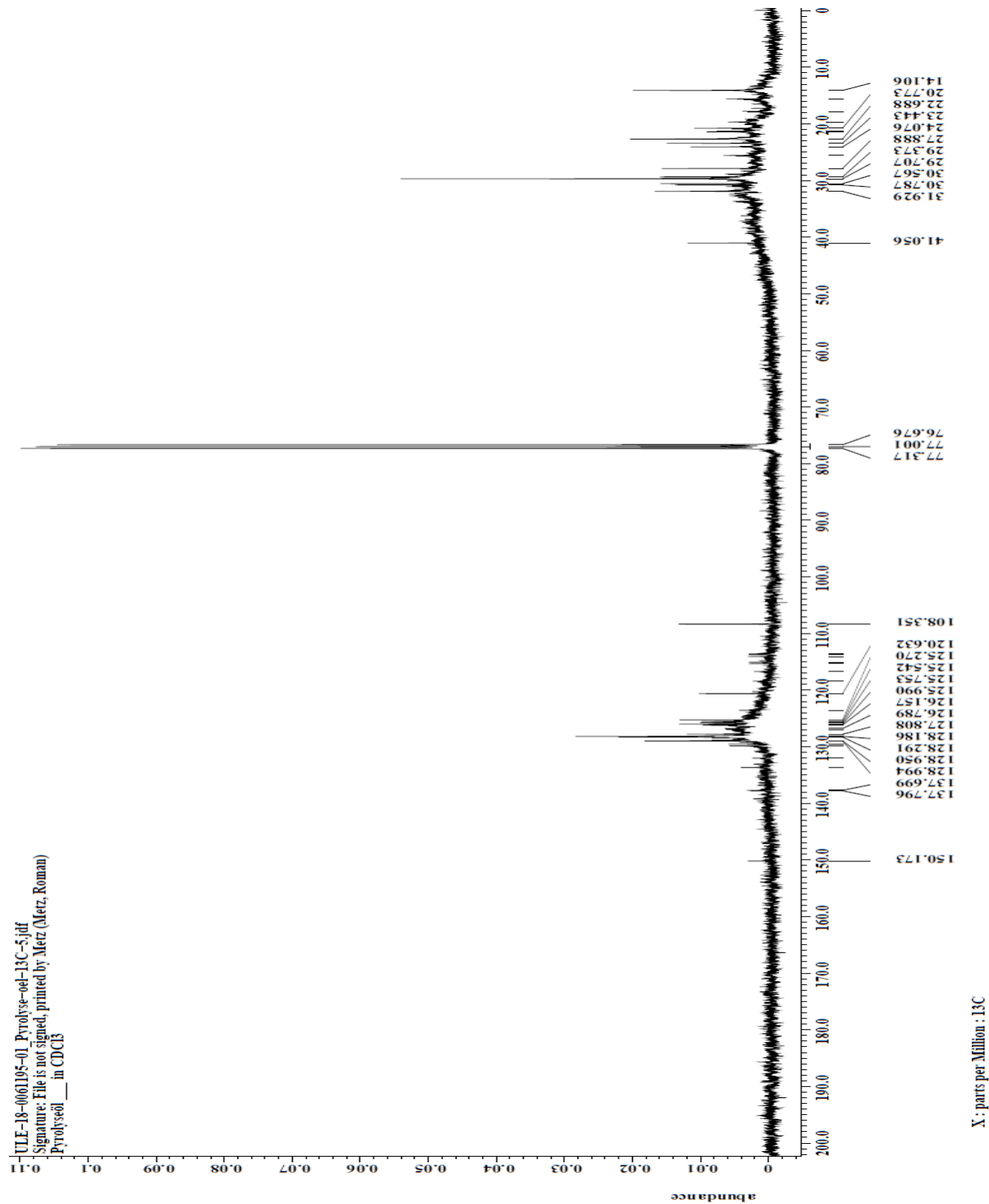


Abbildung 4: ¹³H-NMR- Spektrum des Pyrolyseöls mit deuteriertem Chloroform (CDCl₃) als Lösungsmittel

Tabelle 5: Ergebnisse der Zuordnung der Signale im ^{13}C -NMR Spektrum

	Chemical Shift [ppm]	Zuordnung
Pyrolyseöl	100 - 150	Aromatische und olefinische Kohlenstoffe
	10 - 50	CH, CH ₂ , CH ₃
	77	Lösungsmittel CDCl ₃

4.1.3 Zusammenfassung

Aufgrund der komplexen Zusammensetzung des Pyrolyseöls können keine näheren Aussagen über die Zusammensetzung getroffen werden. Das ^1H -NMR Spektrum zeigt im gesamten Bereich des Spektrums Signale (Aromaten, gesättigte und ungesättigte Aliphaten) und entspricht somit einer UVCB (Substances of unknown or variable composition) Substanz.

4.2 UV-Vis Spektroskopie

4.2.1 Methodenbeschreibung

Spektrometer: Specord 50 Analytik Jena GmbH

Für die Messung wurde die Pyrolyseöl-Probe im Verhältnis 1:50000 in *n*-Hexan gelöst. Die Referenz-Küvette wurde ebenfalls mit *n*-Hexan befüllt.

Spektrale Bandweite: 1.4 nm

Incremente: 1 nm

Küvette: 10 mm Quarzglas

Software: WinASPECT®

4.2.2 Ergebnisse

In Abbildung 5 ist das UV-Vis Spektrum des Pyrolyseöls, gelöst in *n*-Hexan (1:50000) im Bereich von 200 – 800 nm. Im sichtbaren Bereich (400 nm – 800 nm) weist die Probe keine Absorption auf.

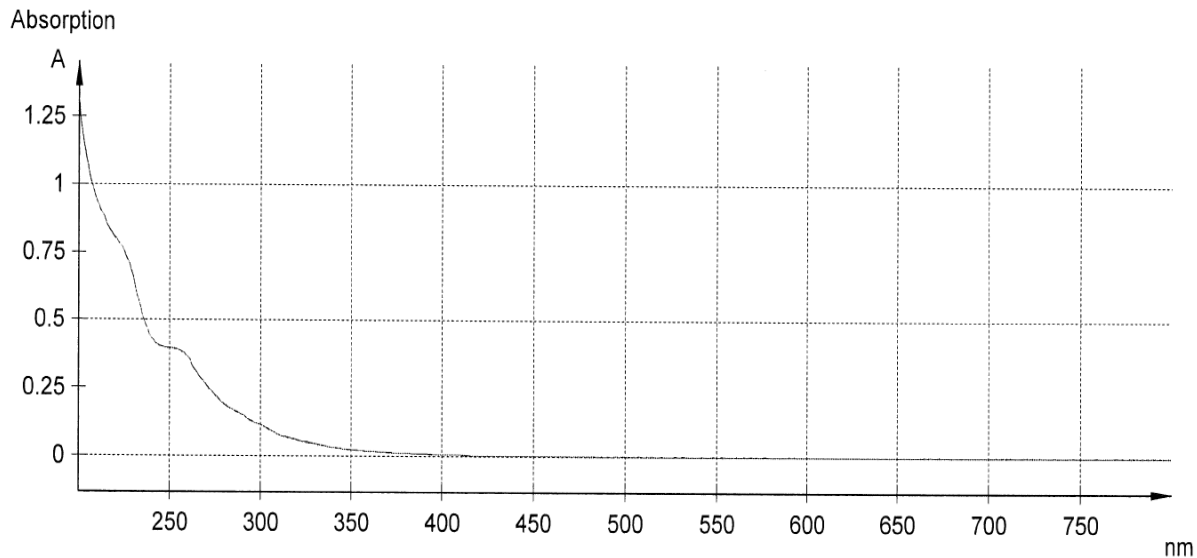


Abbildung 5: UV-Vis Spektrum des Pyrolyseöls im Bereich von 200 nm bis 800 nm, gelöst in *n*-Hexan (1:50000)

In Abbildung 6 ist der Bereich von 200 nm bis 400 nm dargestellt. Im Bereich von 240 nm bis 270 nm ist die charakteristische Absorption der Aromaten zu erkennen. Diese hat ihr theoretisches Maximum bei einer Wellenlänge von 255 nm durch den verbotenen $p \rightarrow p^*$ Übergang.

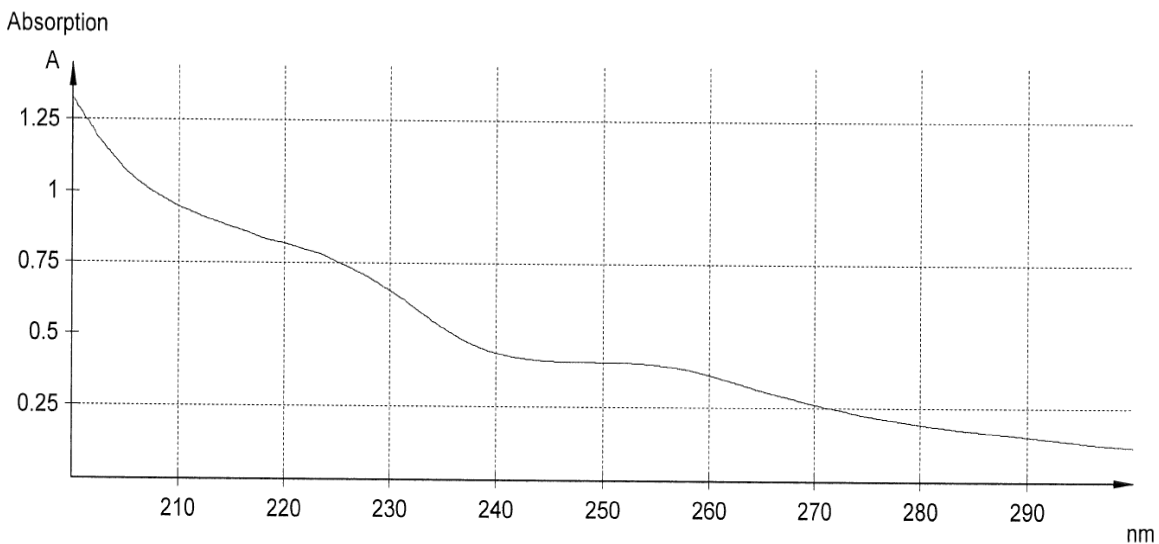


Abbildung 6: UV-Vis Spektrum des Pyrolyseöls im Bereich 200 nm bis 400 nm gelöst in *n*-Hexan (1:50000)

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl



4.3 IR-Spektroskopie

4.3.1 Methodenbeschreibung

Die qualitative IR Analyse wurde mittels (ATR) IR Spektroskopie durchgeführt.

Spektrometer: Alpha with sample compartment RT-DLaTGS, Bruker
Accessory: ATR platinum Diamond 1 Refl
Software: OPUS 7.5

4.3.2 Ergebnisse

In Abbildung 7 ist das IR-Spektrum des Pyrolyseöls in Transmission dargestellt.

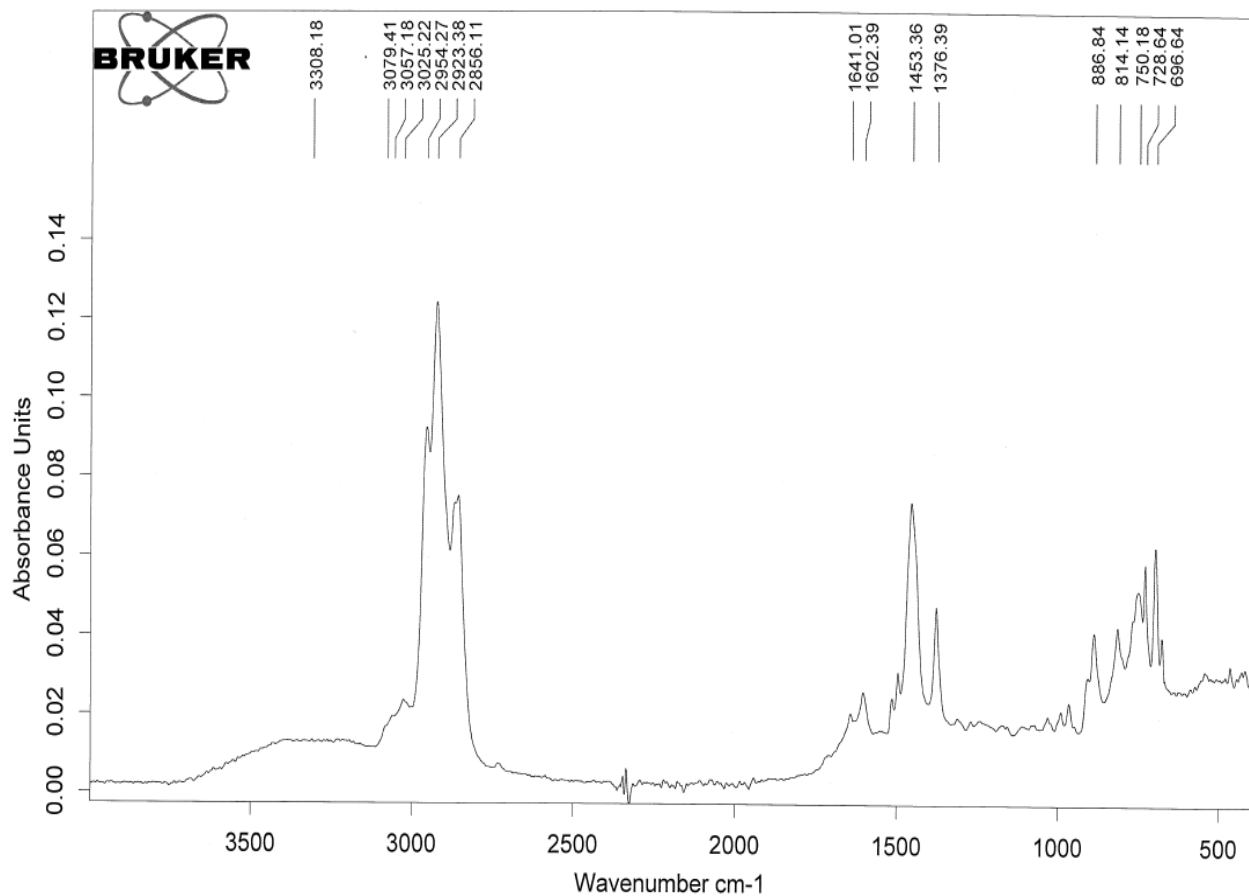


Abbildung 7: IR-Spektrum des Pyrolyseöls

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl



Tabelle 6: Charakteristische Schwingungsbanden und die zugehörige Struktureinheit des Pyrolyseöls

Wavenumber (cm ⁻¹)	Struktureinheit
3057.18	=C-H (Stretching, Olefine)
3025.22	=C-H (Stretching, Aromaten)
2954.27	CH ₃ (Stretching)
2923.38	CH ₂ (Stretching)
2856.11	CH (Stretching)
1641.01	C=C (Stretching, Olefine)
1602.39	C=C (Stretching, Aromaten)
1453.36	CH ₃ , CH ₂ , CH (Bending)
1376.39	CH ₃ (Bending)
990-660	=C-H (Bending, Olefine)
900-600	C-H (Bending, Aromaten)

Aus Tabelle 6 geht hervor, dass sowohl gesättigte als auch ungesättigte Kohlenwasserstoffe im Pyrolyseöl vorhanden sind. Des Weiteren sind die Schwingungen der aromatischen Verbindungen stark ausgeprägt, was auf einen erhöhten Aromatengehalt hindeutet. Das Fehlen einer ausgeprägten OH-Schwingung im Bereich von 3700 cm⁻¹ bis 3200 cm⁻¹ deutet darauf hin, dass keine Alkohole oder sonstige Struktureinheiten mit Hydroxygruppe vorhanden sind.

Tabelle 7: Erfahrungswerte zur Beständigkeit ausgewählter Materialien gegenüber Thermolyseöl; gute Beständigkeit (+); mittlere Beständigkeit (o); geringe bis keine Beständigkeit (-)

Material	Beständigkeit	Langzeitstabilität
Edelstahl: 1.4571, 1.4828, o.ä.	+	gegeben
Graphit (z.B. in Flachdichtungen)	+	gegeben
NBR	-	
Polystyrol	-	
Oxim-Silikon	o	n.b.
PTFE	+	gegeben
Kupfer	+	gegeben
S235JR	-	korrosionsanfällig

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl



5 Physiologische Eigenschaften

Geruch: mineralölartig, schwefelig
 Toxizität: siehe Sicherheitsdatenblatt

6 Zusammensetzung

Die angegebenen Werte entsprechen, wenn nicht anderes angegeben, dem jeweils bestimmten Maximalgehalt einer Komponente.

Durchführung: Die Pyrolyseölprobe wird mit Dichlormethan versetzt und anschließend mit einer zweidimensionalen Gaschromatographie aufgetrennt. Die Detektion erfolgt über ein Massenspektrometer (MS) und einem Flammenionisationsdetektor (FID). Bei den Säulen handelt es sich um eine Rx1-ms Säule (30m x 0.25mm x 0.25µm) und eine BIPX50-Säule (1m x 0.15mm x 0.15µm). In Abbildung 8 ist die Zusammensetzung des Pyrolyseöls dargestellt.

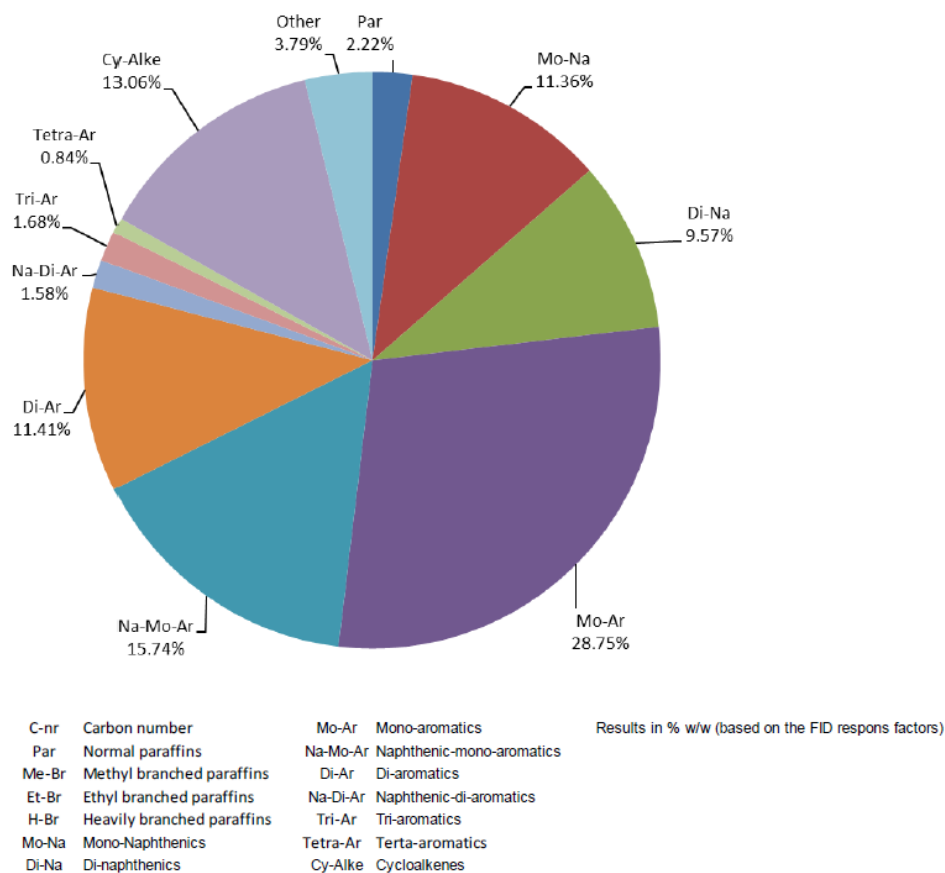


Abbildung 8: Zusammensetzung des Pyrolyseöls, bestimmt durch zweidimensionale Gaschromatographie

Abbildung 8: Zusammensetzung des Pyrolyseöls, bestimmt durch zweidimensionale Gaschromatographie

6.1 Anteile an Stoffgruppen und C-Kettenlänge

Mineralöl-KW (C5-C50):	350	mg/L	DIN EN 93677-2
PCB:	< 0,01	mg/kg	DIN EN 15308
PAK gesamt:	1500	mg/kg	DIN EN 15527
PAK gesamt:	24	Ma-%	EN 590

6.1.1 Aromatische Bestandteile

Phenole:	150	mg/L	DIN 38409H16
----------	-----	------	--------------

Tabelle 8: Aromatengehalt des Pyrolyseöls

	Min. [m%]	Max. [m%]	Typisch [m%]
Monoaromaten	10	60	45
Diaromaten	5	25	13
Tri+-Aromaten	0	15	3
Polyaromaten	10	25	15
Gesamtaromaten	15	75	60

6.1.2 Nicht-aromatische Bestandteile

Tabelle 9: Nicht-aromatische Bestandteile des Pyrolyseöls

	Min. [m%]	Max. [m%]	Typisch [m%]
Paraffine	0	10	2
Mono-Naphthene	0	20	10
Di-Naphthene	0	20	10
Cycloalkene	0	25	13
Andere	0	15	4

Bei dem Öl handelt es sich vor allem um aromatische Verbindungen, sowie Olefine und Paraffine. Die Anteile der C-Kettenlängen sind in Abbildung 9 dargestellt.

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl

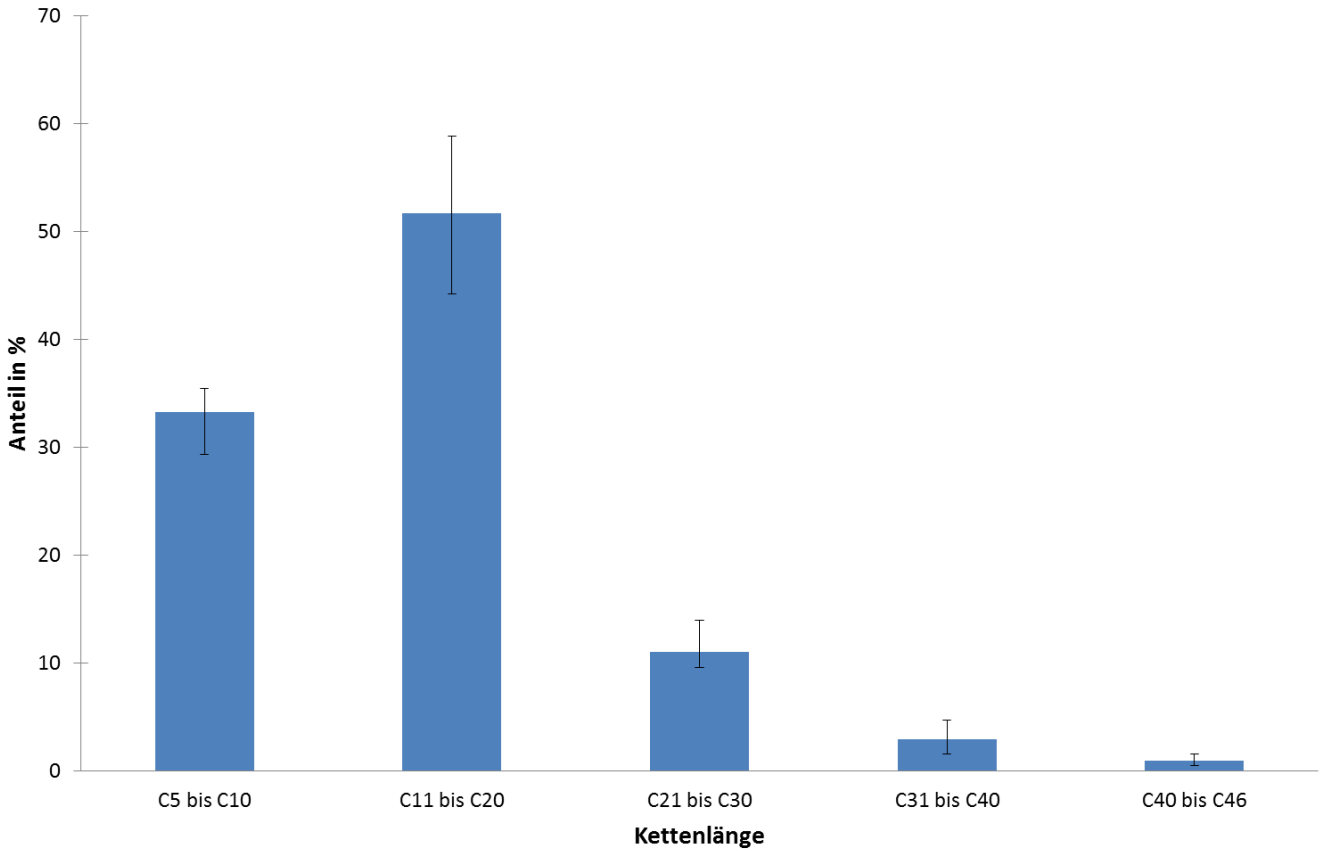


Abbildung 9: Anteile C-Kettenlänge

6.1.3 Anteile einzelner Stoffe/Moleküle

Tabelle 10: Einzelbestimmungen der jeweiligen aromatischen Verbindungen

	Min. [m%]	Max. [m%]	Typisch [m%]	DIN Norm
BTEX	5	25	15	DIN 38407F9
Benzol	1	5	2,5	DIN 38407F9
Toluol	2	10	5	DIN 38407F9
Ethylbenzol	0	5	1,5	DIN 38407F9
Xylol	0	10	5	DIN 38407F9
Styrol	0	0,4	1	DIN 38407F9

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl



Tabelle 11: Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK)

	Menge [mg/kg]	DIN EN Norm
Naphthalin:	900	DIN EN 15527
Acenaphtylen:	15	DIN EN 15527
Acenaphten:	15	DIN EN 15527
Fluoranthen:	45	DIN EN 15527
Phenanthren:	250	DIN EN 15527
Anthracen:	65	DIN EN 15527
Fluoranthen:	40	DIN EN 15527
Pyren:	65	DIN EN 15527
Benz(a)anthracen:	45	DIN EN 15527
Chrysen:	40	DIN EN 15527
Benzo(b)fluoranth.:	15	DIN EN 15527
Benzo(k)fluoranth.:	15	DIN EN 15527
Benzo(a)pyren:	15	DIN EN 15527
Indeno(1,2,3-c,d)pyren:	5	DIN EN 15527
Dibenzo(a,h)anthr.:	5	DIN EN 15527
Benzo(g,h,i)perylen:	5	DIN EN 15527
Limonen	n.b.	

6.2 Atomare Zusammensetzung

C-Anteil:	85	Ma.-%	Elementaranalyse
H-Anteil:	12	Ma.-%	Elementaranalyse
N-Anteil:	2	Ma.-%	Elementaranalyse
O-Anteil:	n.b.		
S-Anteil:	1	Ma.-%	Elementaranalyse
Cl-Anteil:	< 0,4	g/kg	Altöl Anlage 2 Nr.3

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl



6.3 Verunreinigungen

Wasser:	1470	mg/kg	DIN 51777-2
Koksstaub	in geringen Anteilen möglich		

7 Anwendungsbeispiele

Brennstoff für Asphaltbrenner

Rohölersatzstoff für die Verarbeitung in einer Raffinerie

Brennstoff zur Energieerzeugung

8 Sonstige Angaben

8.1 Relevante Gefahrenhinweise

H225	Flüssigkeit und Dampf leicht entzündbar.
H226	Flüssigkeit und Dampf entzündbar.
H228	Entzündbarer Feststoff.
H302	Gesundheitsschädlich bei Verschlucken.
H304	Kann bei Verschlucken oder Eindringen in die Atemwege tödlich sein.
H312	Gesundheitsschädlich bei Einatmen.
H315	Verursacht Hautreizungen.
H319	Verursacht schwere Augenreizung.
H332	Gesundheitsschädlich bei Einatmen.
H335	Kann Atemwege reizen.
H336	Kann Schläfrigkeit und Benommenheit verursachen.
H340	Kann genetische Defekte verursachen.
H350	Kann Krebs erzeugen.
H351	Kann vermutlich Krebs erzeugen.
H361d	Kann vermutlich das Kind im Mutterleib schädigen.
H372	Schädigt die Hörorgane bei längerer oder wiederholter Exposition.

Stoffsteckbrief

Thermolyseöl



H373	Kann das zentrale Nervensystem und die Hörorgane schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition. Expositionsweg: Einatmen Inhalation.
H400	Sehr giftig für Wasserorganismen.
H410	Sehr giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung.
H411	Giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung.
H412	Schädlich für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.

8.2 Relevante Sicherheitshinweise

P201	Vor Gebrauch besondere Anweisungen einholen.
P210	Von Hitze, Funken, offenen Flammen, heißen Oberflächen sowie anderen Zündquellen fernhalten. Nicht rauchen.
P260	Staub/ Rauch/ Gas/ Nebel/ Dampf/ Aerosol nicht einatmen.
P273	Freisetzung in die Umwelt vermeiden.
P280	Schutzhandschuhe / Schutzkleidung / Augenschutz / Gesichtsschutz tragen
P301+P310	Bei Verschlucken: Sofort Giftnformationszentrum, Arzt oder ... anrufen.
P301+P312+P330	Bei Verschlucken: Bei Unwohlsein Giftnformationszentrum oder Arzt anrufen. Mund ausspülen.
P304+P340+P312	Bei Einatmen: Die Person an die frische Luft bringen und für ungehinderte Atmung sorgen. Bei Unwohlsein Giftnformationszentrale oder Arzt anrufen.
P308+P313	Bei Exposition oder Verdacht: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P331	Kein Erbrechen herbeiführen.
P370+P378	Bei Brand: Löschpulver oder Trockensand zum Löschen verwenden.
P391	Verschüttete Mengen aufnehmen.
P403+P235	An einem gut belüfteten Ort aufbewahren. Kühl halten.
P501	Inhalt/ Behälter einer anerkannten Abfallentsorgungsanlage zuführen.