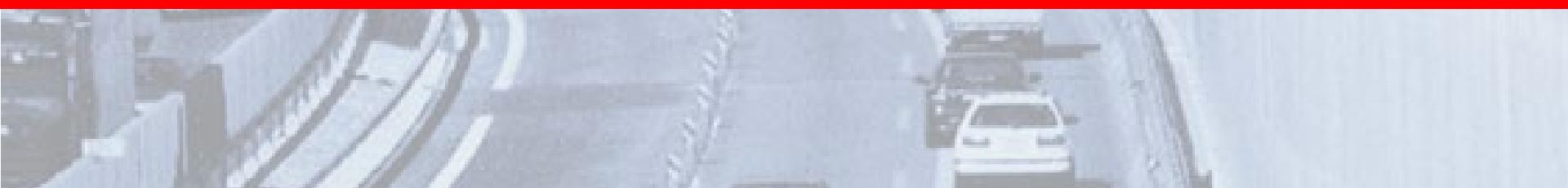


New fuels, new risks, new opportunities: The chemistry and toxicity of synthetic fuels



Norbert Heeb

Empa, Überlandstrasse 129

Lab for Advanced Analytical Technologies

CH-8600 Dübendorf

Phone +41-58-765 42 57

Fax +41-58-765 40 41

e-mail norbert.heeb@empa.ch

Internet <http://www.empa.ch>



Materials Science and Technology

11th VERT Forum: Towards zero impact combustion engines

Empa, March 25, 2021

New fuels, new risks, new opportunities: The chemistry and toxicity of synthetic fuels

From fossil fuel to synthetic fuel combustion?

Lessons from the past

(What are the global trends?)

Renewable hydrocarbon fuels

(Soot remains bad news)

The chemistry of oxygenated fuels

(Many ways to go)

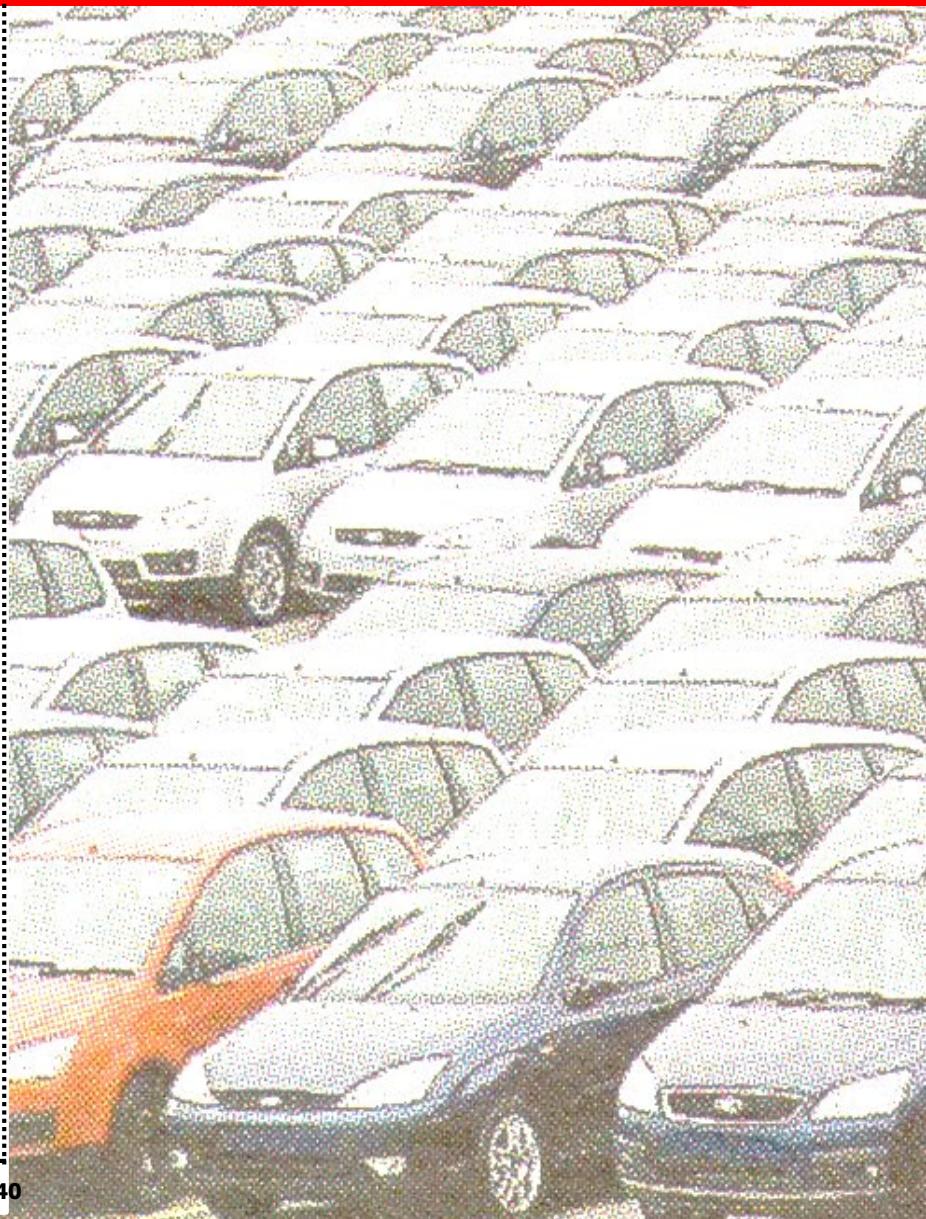
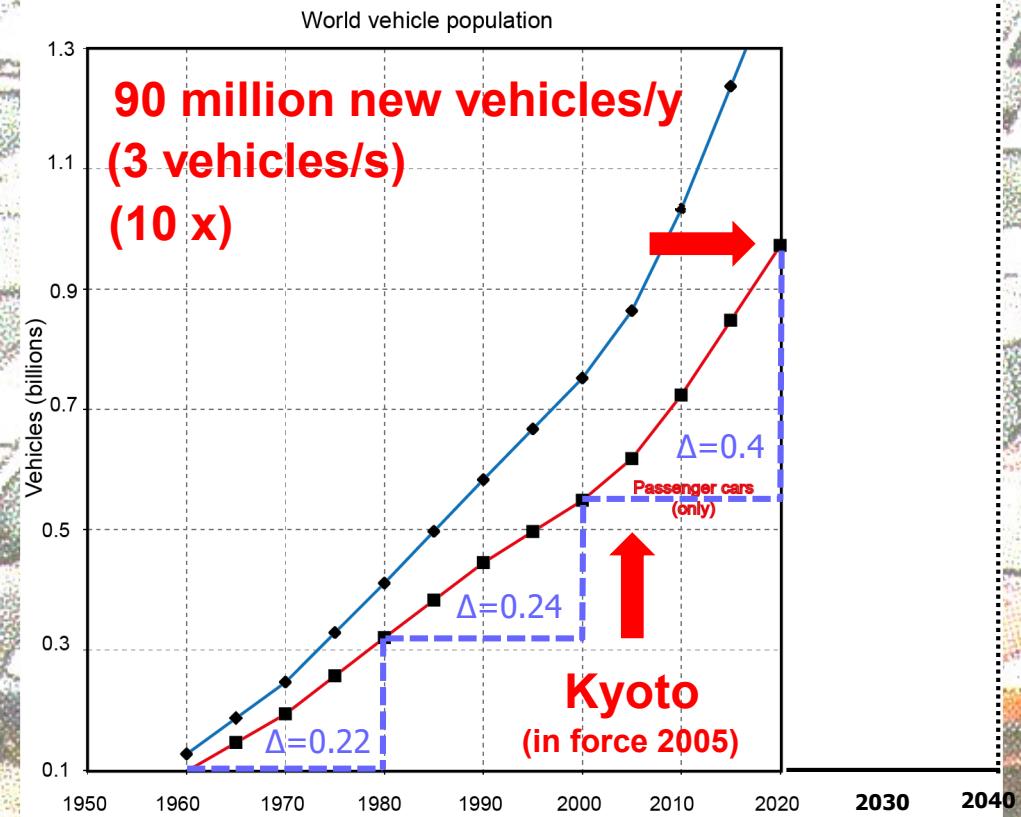
New fuels, new risks, new opportunities

(The genotoxic potential)

Road vehicles on earth

From 0.1 to 1 billion in 60 years

(3800 as I spoke, 86'000 today)



Road vehicles on earth

From 0.1 to 2 billion in 80 years?

(3800 as I spoke, 86'000 today)

2.6 billion vehicles?

Another 600 millions in the next 20 years?

1.6 billion PC?

World vehicle population

90 million new vehicles/y
(3 vehicles/s)
(10 x)

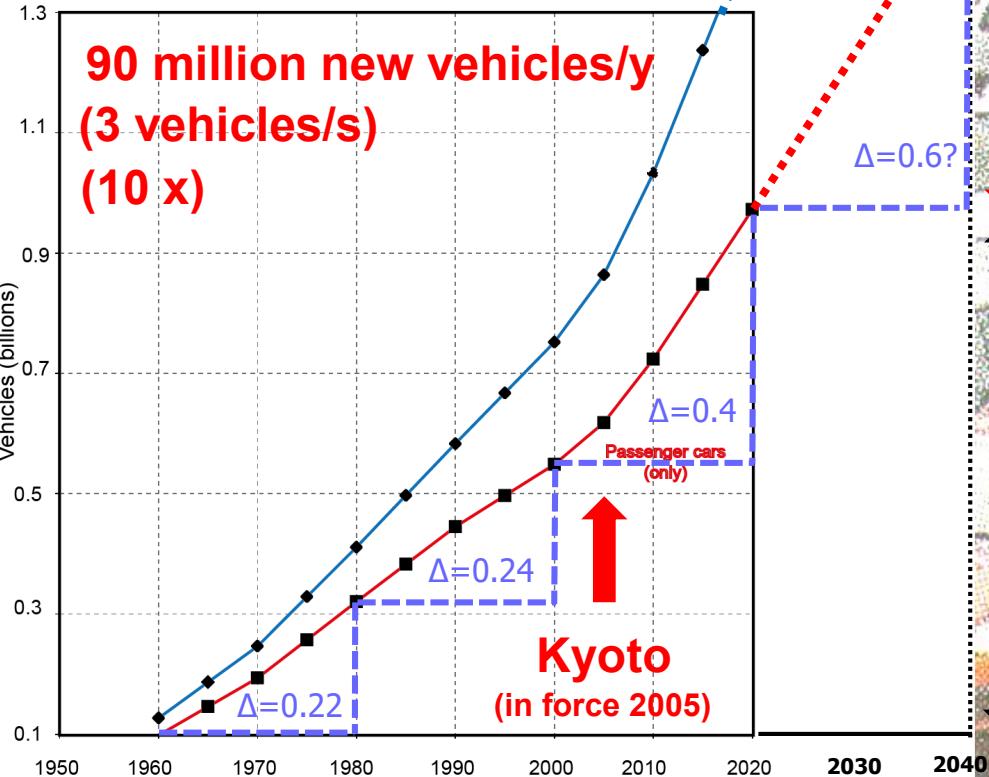
$\Delta=0.6?$

$\Delta=0.4$

Passenger cars
(only)

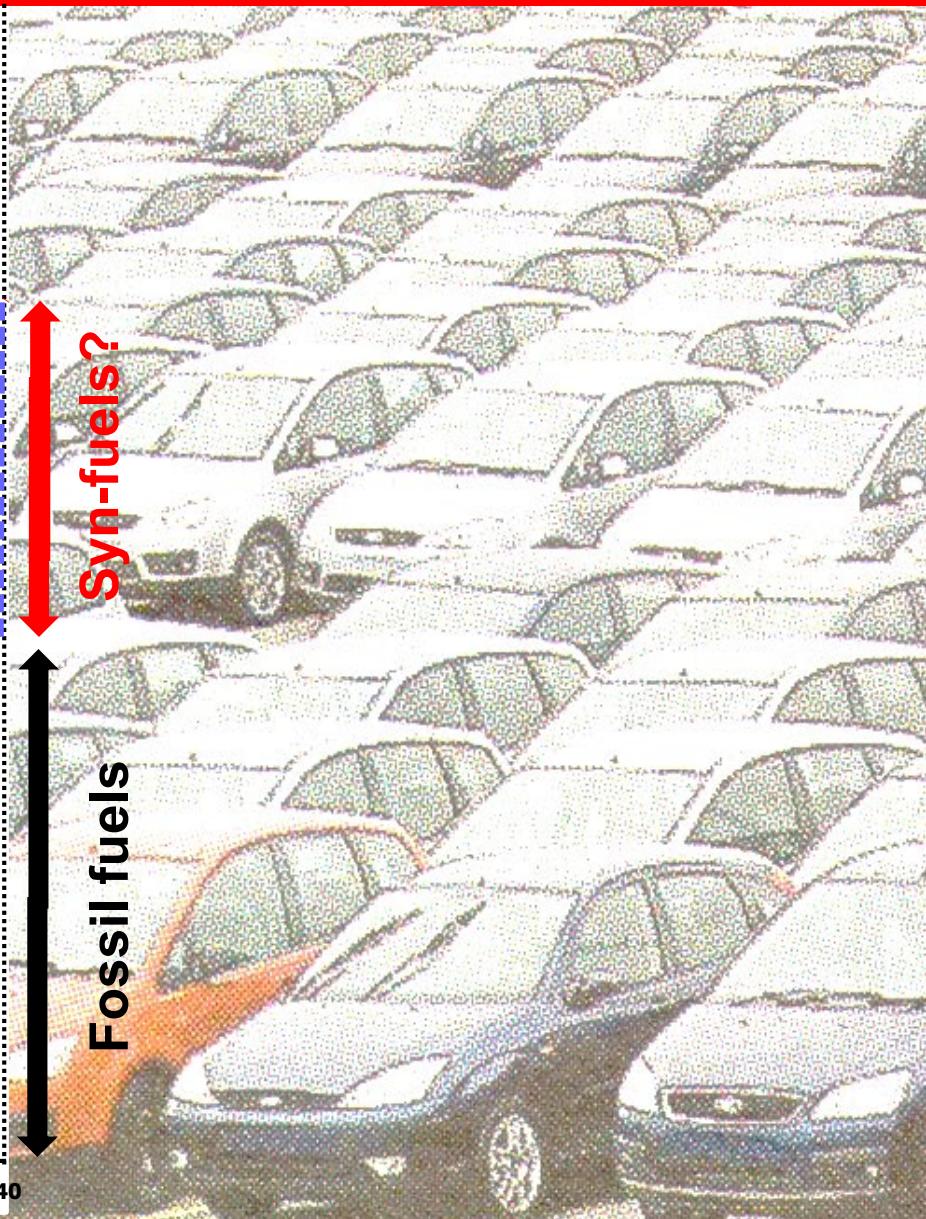
$\Delta=0.24$

Kyoto
(in force 2005)



Fossil fuels

Syn-fuels?



Road vehicles on earth

From 0.1 to 2 billion in 80 years?

(3800 as I spoke, 86'000 today)

2.6 billion vehicles?

Another 600 millions in the next 20 years?

1.6 billion PC?

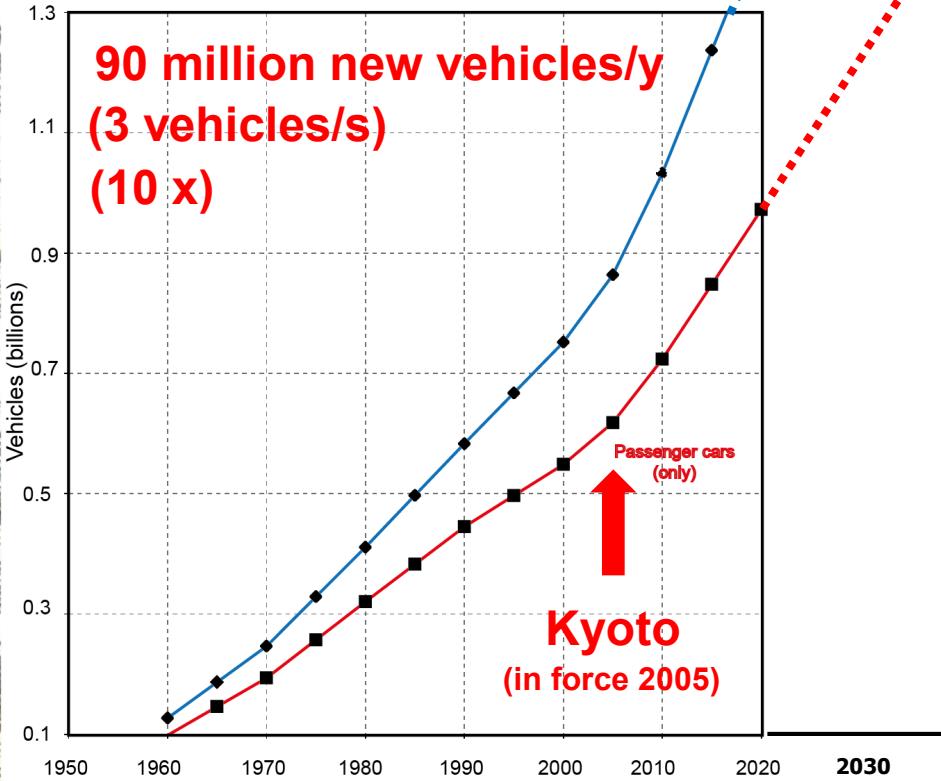
From 3 to 10 billion in 80 years?

Degree of motorization (PC)

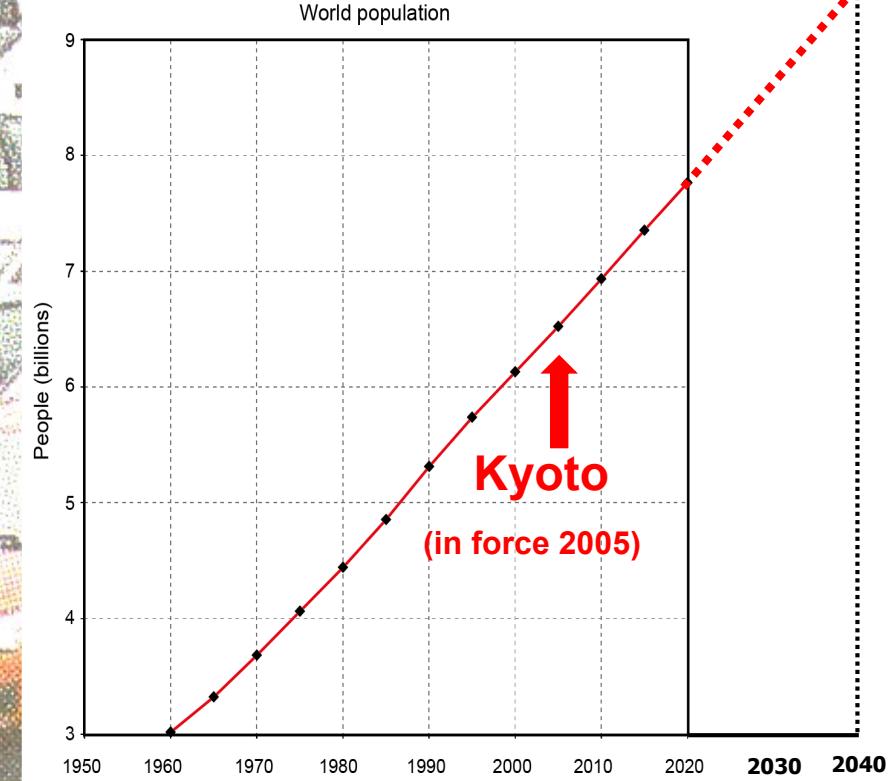
World: 13% in 2020, 16% in 2040

e.g. CH: 53% in 2020

World vehicle population

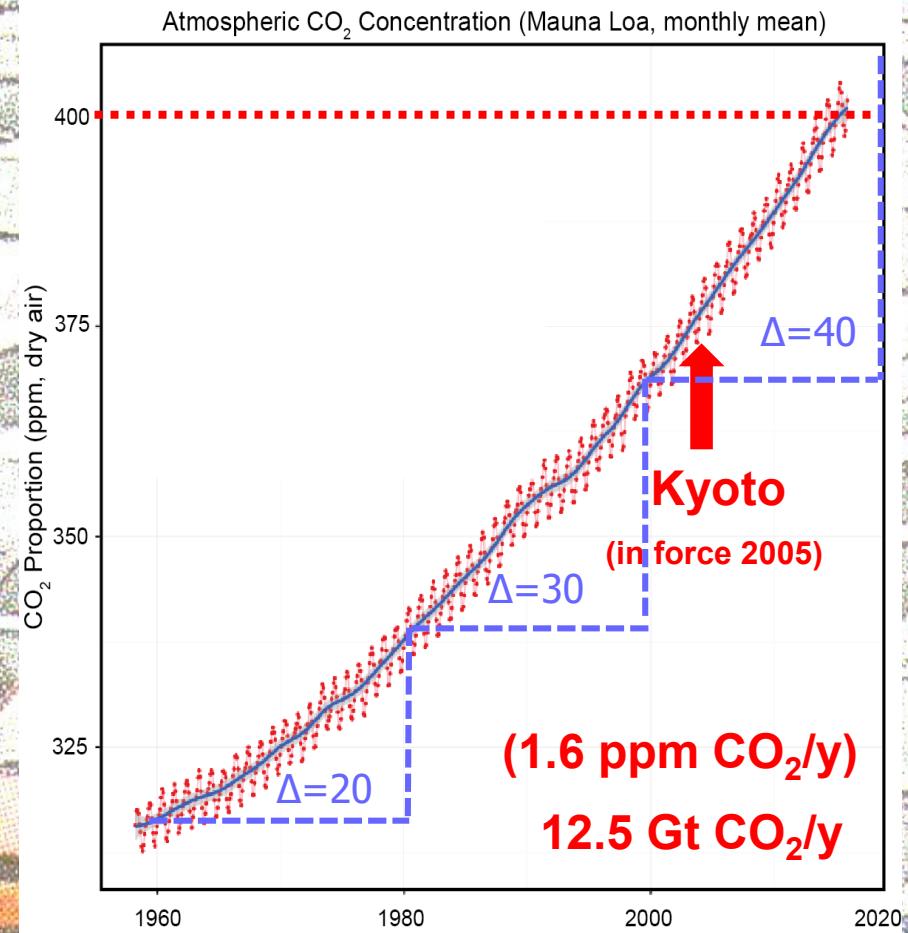


World population



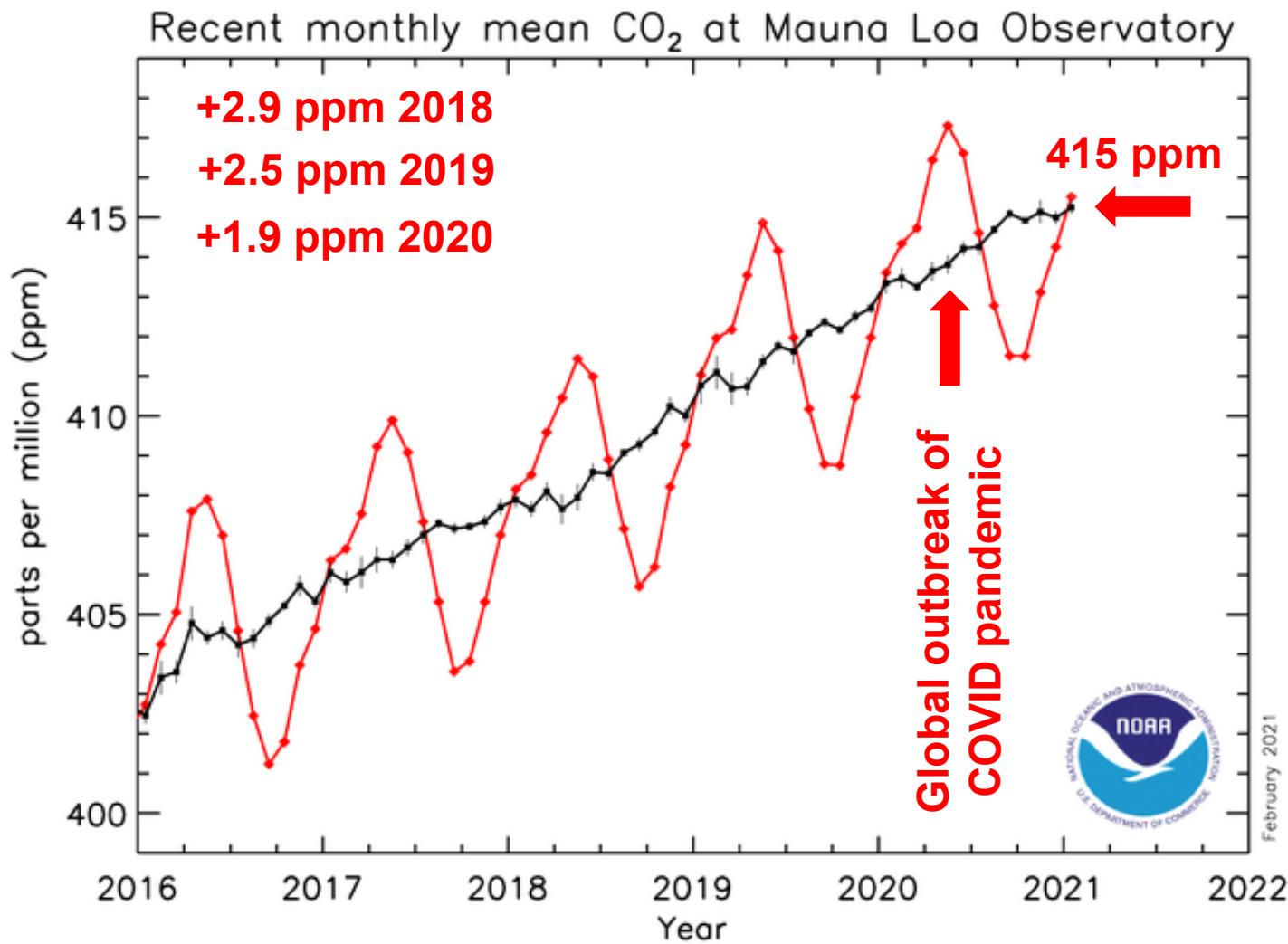
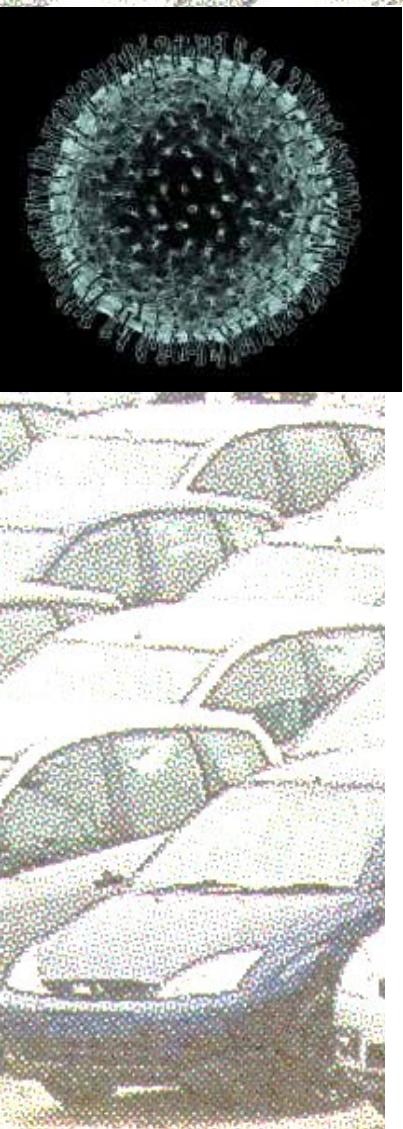
Road vehicles on earth

From 300 to 400 ppm in 60 years



Road vehicles on earth

Still an increase of 2 ppm and a new record in 2020!



Road vehicles on earth

From 0.1 to 2 billion in 80 years?

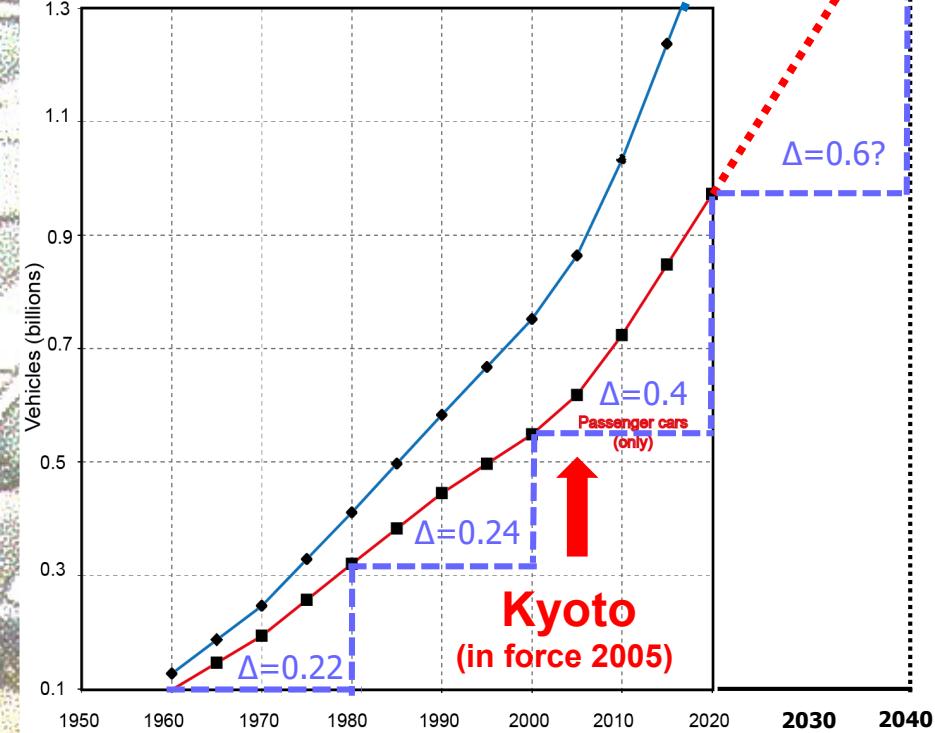
$10^9 \text{ vehicles} \times 10^4 \text{ km/y} \times 200 \text{ g CO}_2/\text{km} = \text{additional } 2 \text{ Gt CO}_2/\text{y}$ 460 ppm 

2.6 billion vehicles?

1.6 billion PC?

Another 600 millions in the next 20 years?

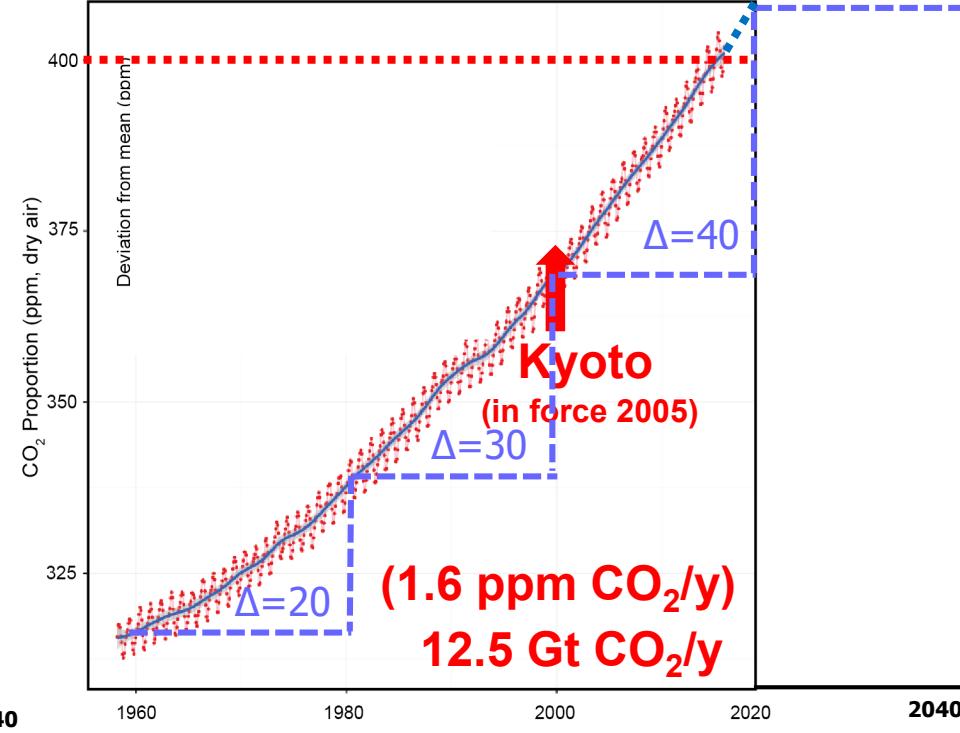
World vehicle population



From 300 to 460 ppm in 80 years?

460 ppm 

Atmospheric CO₂ Concentration (Mauna Loa, monthly mean)



New fuels, new risks, new opportunities: The chemistry and toxicity of synthetic fuels

From fossil fuel to synthetic fuel combustion?

Lessons from the past

Renewable hydrocarbon fuels

The chemistry of oxygenated fuels

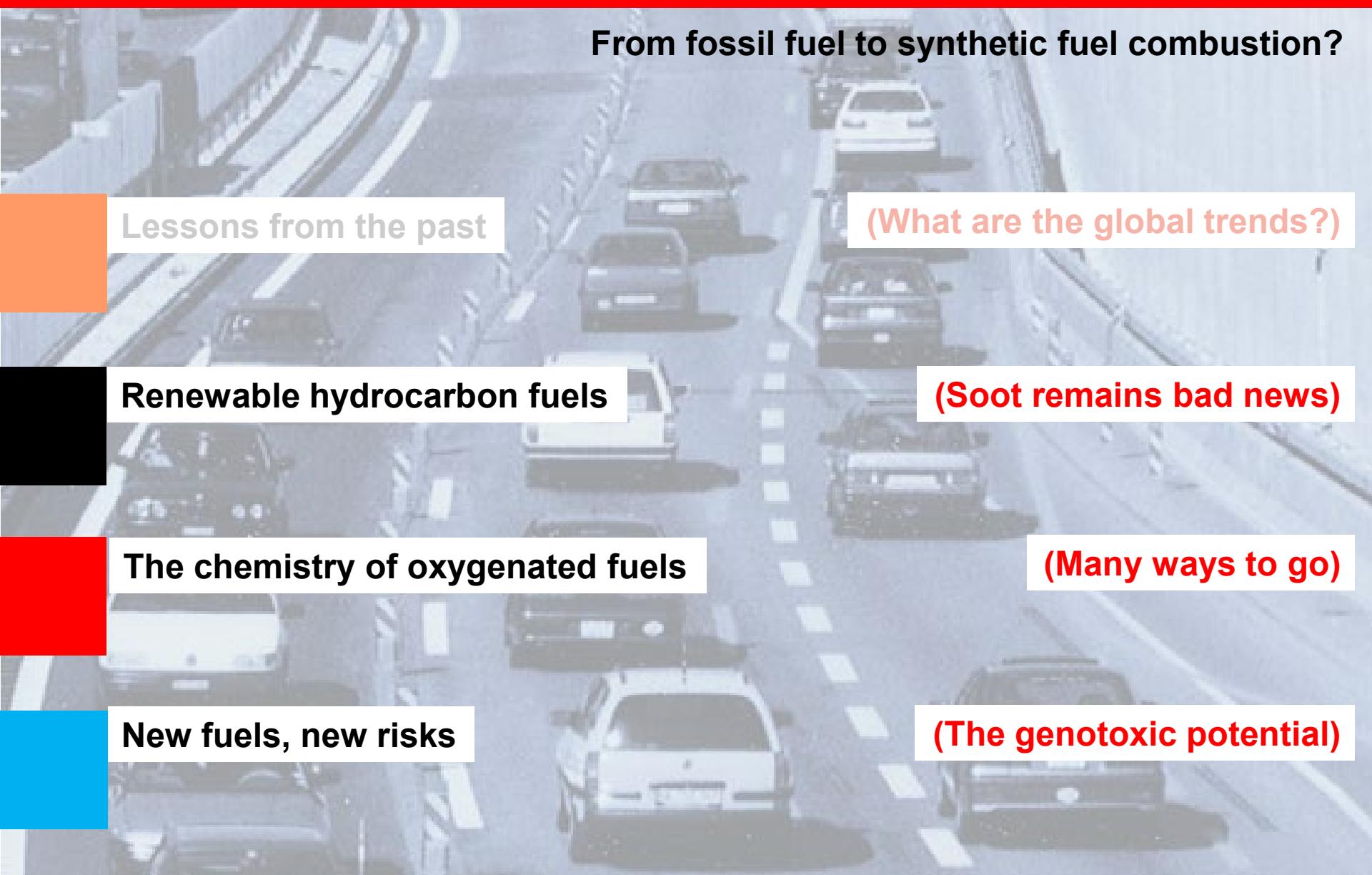
New fuels, new risks

(What are the global trends?)

(Soot remains bad news)

(Many ways to go)

(The genotoxic potential)



Renewable hydrocarbon fuels

Is there a sustainable production of Fischer-Tropsch fuels?



The chemistry of hydrocarbon fuels

Is there a sustainable production of Fischer-Tropsch fuels?

Combustion of hydrocarbon fuels



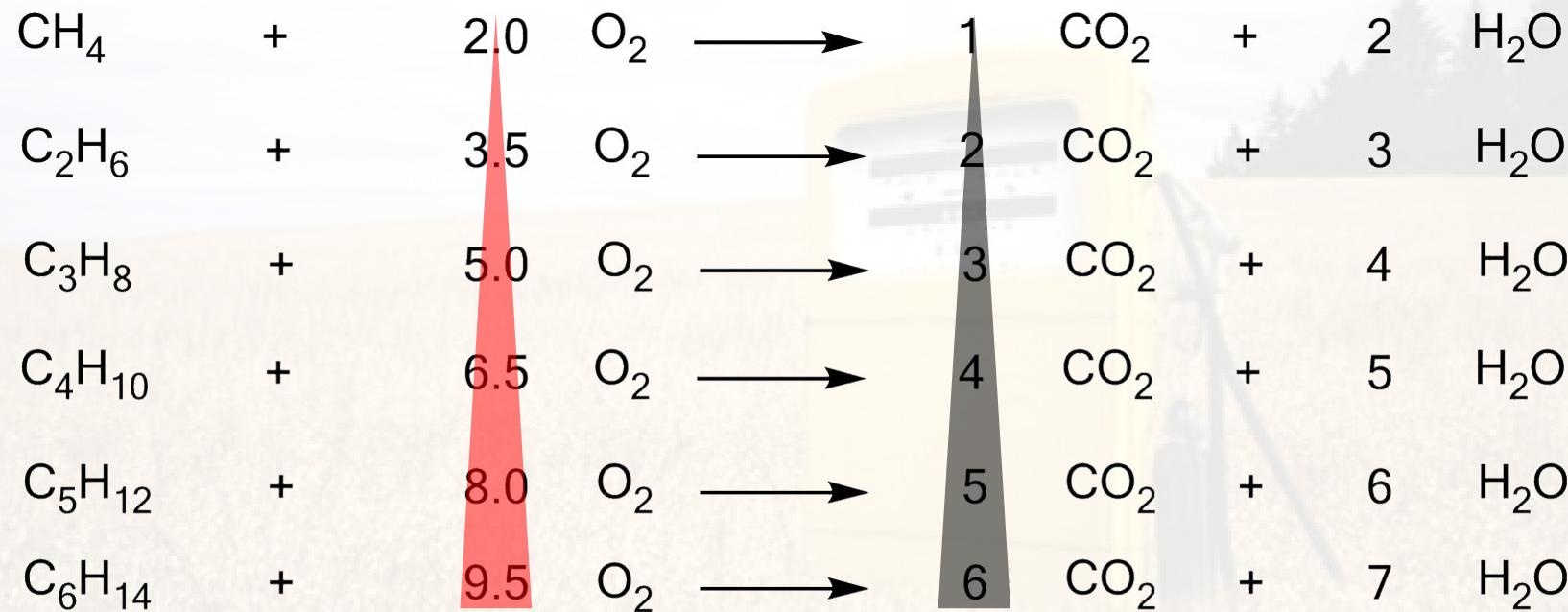
- Alkanes (C_xH_{2x+2}) are major fuel constituents of CNG, LPG, gasoline, jet fuel, diesel fuel, heating oil **and Fischer-Tropsch fuels**
- Alkyl benzenes ($C_{6+x}H_{6+2x}$) important constituents of gasoline
- Alkyl naphthalenes ($C_{10+x}H_{8+2x}$) constituents of gasoline, jet & diesel fuels
- Alkyl PAHs constituents of jet & diesel fuels

**CNG, LPG and FT-fuels are less complex than fossil fuels,
the latter are mixtures of >1000 compounds**

The chemistry of hydrocarbon fuels

If you burn alkanes you get lots of CO₂ and water, but stoichiometry matters

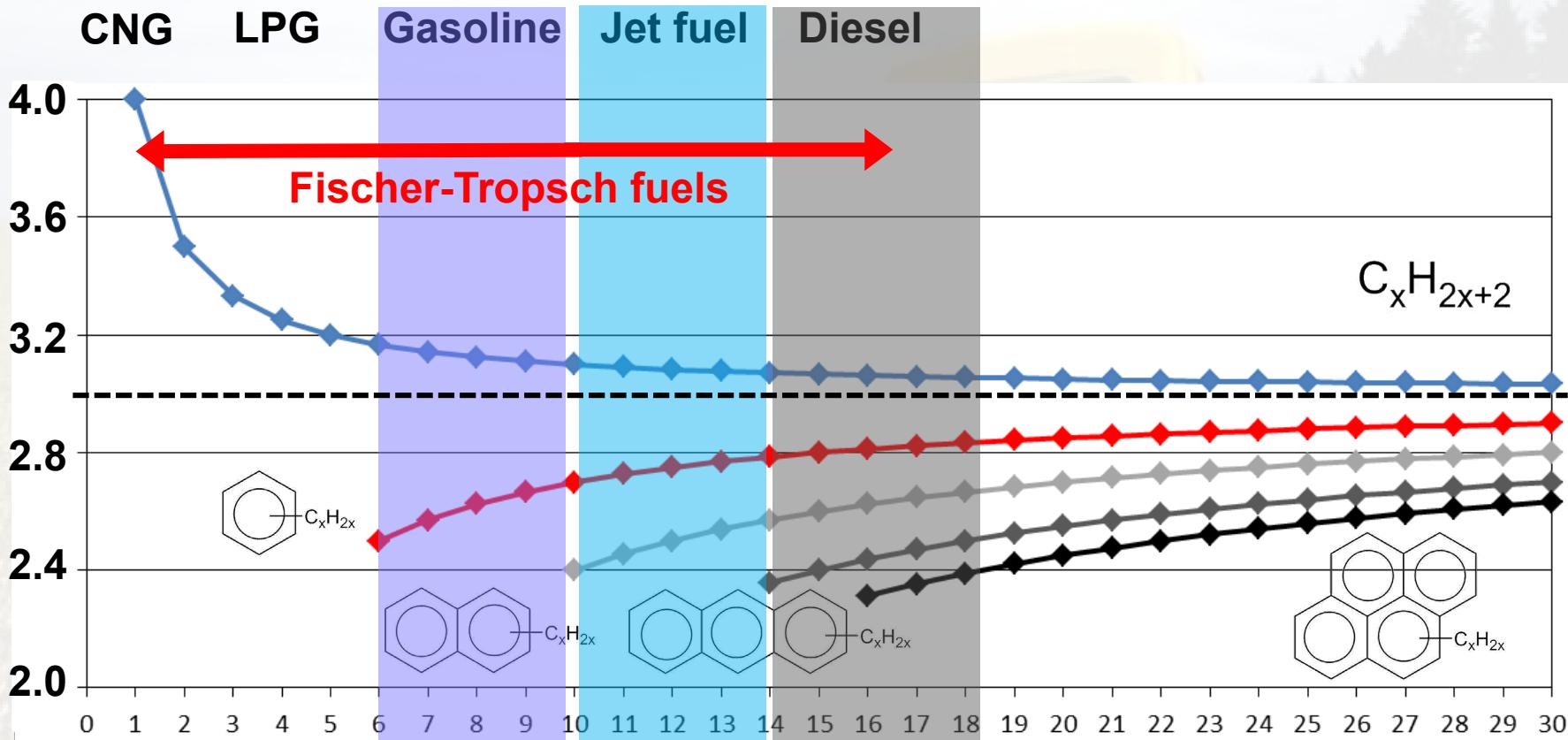
Stoichiometric combustion of alkanes:



The chemistry of hydrocarbon fuels

Sub-stoichiometric combustion results in sooting!

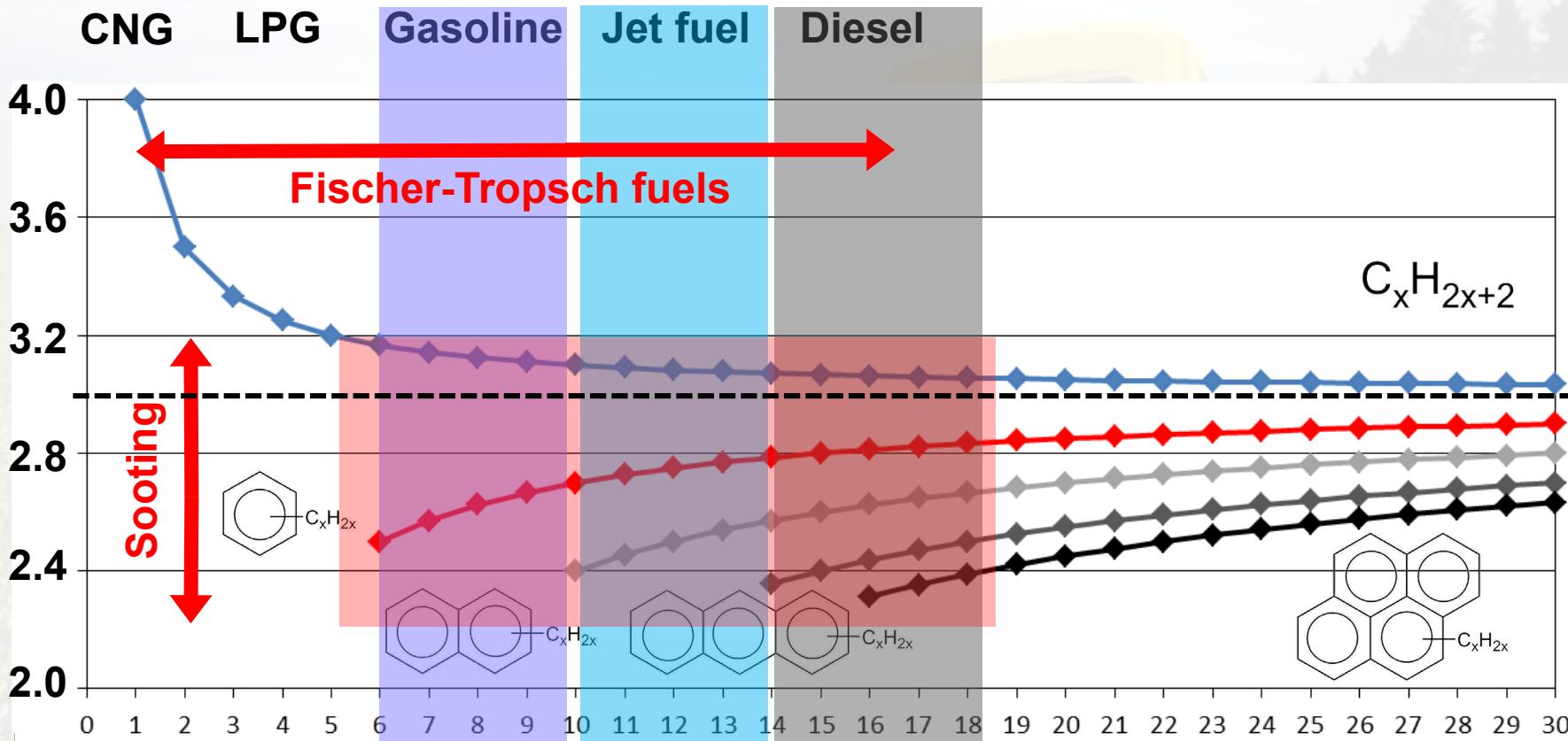
Oxygen to carbon ratio (O/C):



The chemistry of hydrocarbon fuels

If you burn mixtures, stoichiometric combustion is difficult to maintain!

Oxygen to carbon ratio (O/C):



The sooting problem

Sooting is an inherent problem when combusting HC mixtures

Fischer-Tropsch fuels contain little aromatic HCs

Soot formation can be reduced if engines are adopted well.

Can one fulfill PN standards with FT-fuels without particle filters?

We will possibly blend fossil- and FT-fuels, as we do it with biofuels since 20 years!

And with it, the sooting problem remains!

New fuels, new risks, new opportunities: The chemistry and toxicity of synthetic fuels

From fossil fuel to synthetic fuel combustion?

Lessons from the past

Renewable hydrocarbon fuels

The chemistry of oxygenated fuels

New fuels, new risks, new opportunities

(What are the global trends?)

(Soot remains bad news)

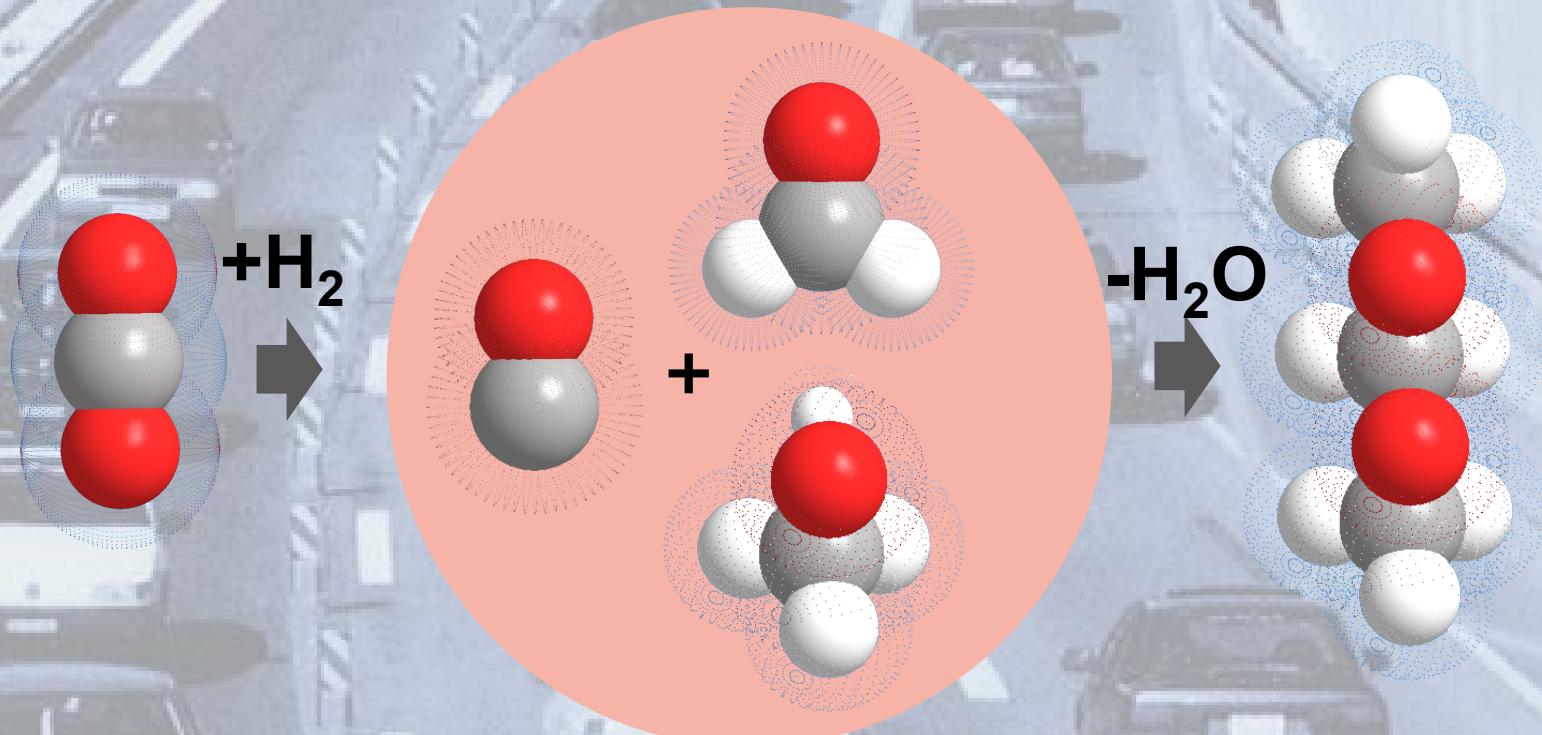
(Many ways to go)

(The genotoxic potential)

The chemistry of oxygenated fuels

Renewable oxygenated fuels – intermediates on the way to CO₂

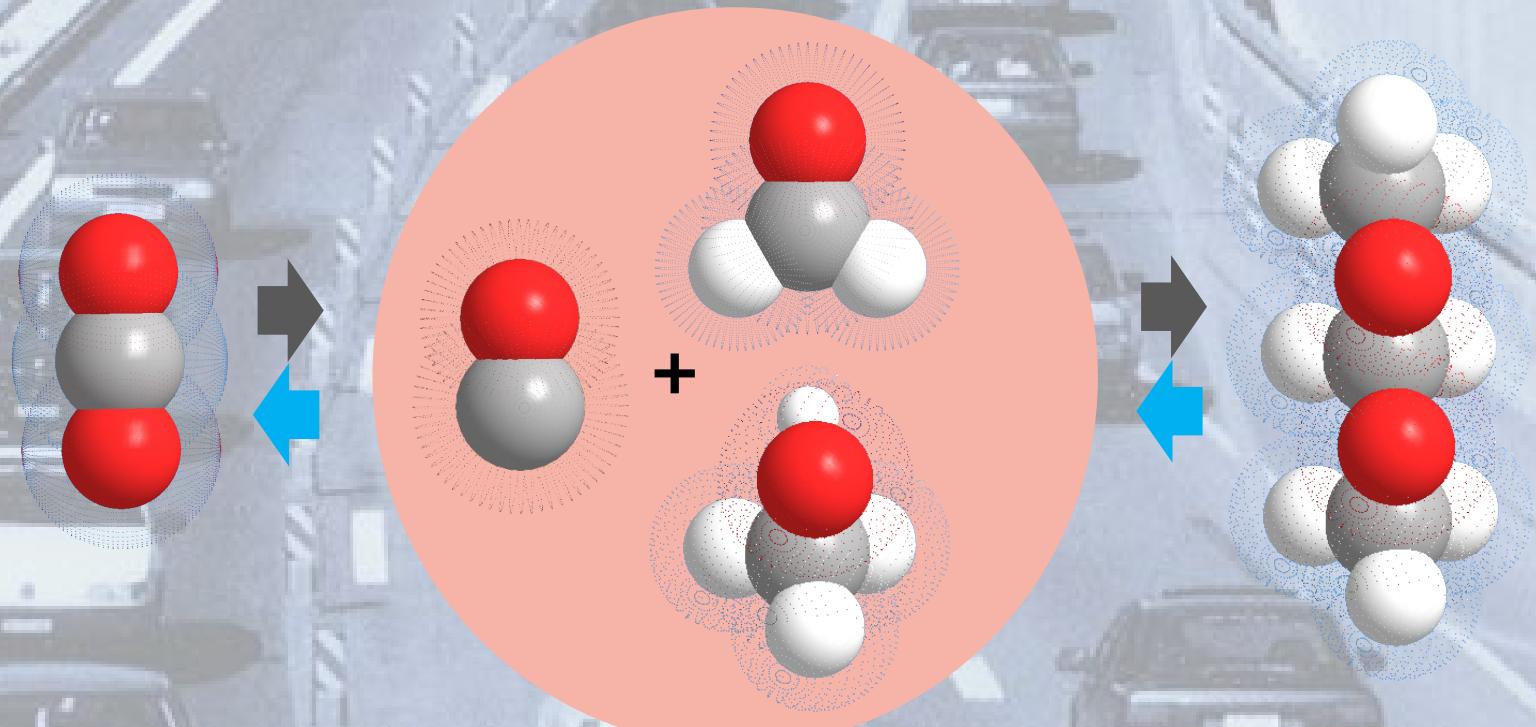
Lots of renewable H₂ needed,
e.g. from water splitting with renewable electricity



The chemistry of oxygenated fuels

Renewable oxygenated fuels – intermediates on the way to CO₂

Lots of renewable H₂ needed,
e.g. from water splitting with renewable electricity



Can oxygenated fuels be produced
in large quantities and in renewable ways?

New fuels, new risks, new challenges: The chemistry and toxicity of syn-fuels

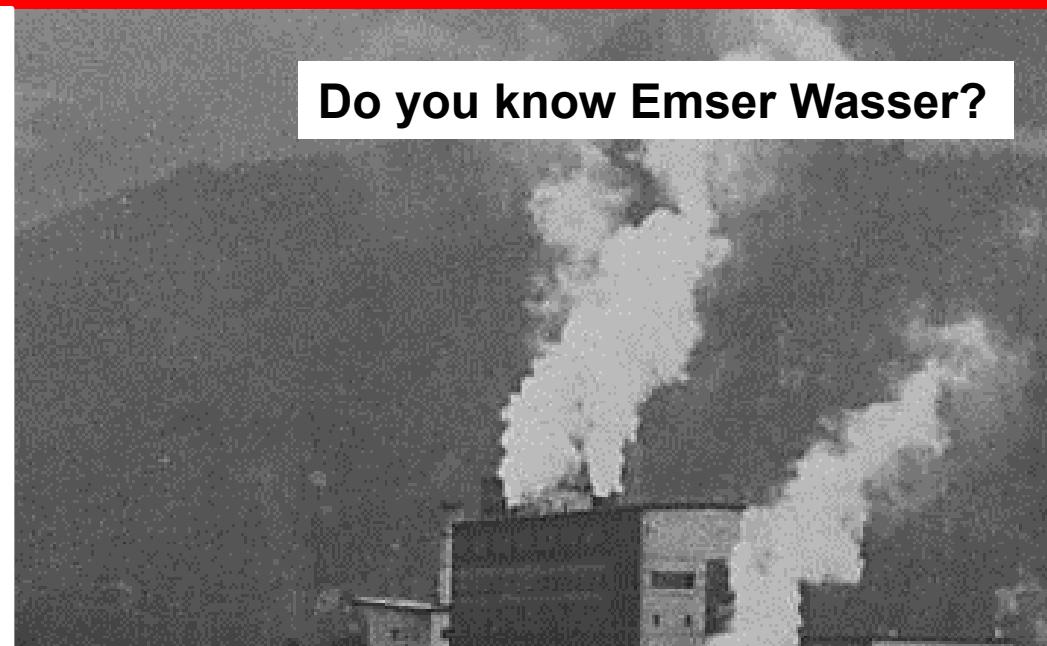
Emser Wasser:

Mix of methanol / ethanol (3/2)

Fermentation of wood residues in
the HOVAG in Domat-Ems

Werner Oswald (1904-1979),
founder of the HOVAG to support
the local forest industry

Do you know Emser Wasser?



New fuels, new risks, new challenges: The chemistry and toxicity of syn-fuels

Emser Wasser:

Mix of methanol / ethanol (3/2)

Fermentation of wood residues in
the HOVAG in Domat-Ems

Werner Oswald (1904-1979),
founder of the HOVAG to support
the local forest industry

Peak production in 1943

10'000 t/y (12'600'000 L)

1/3 of liquid fuel consumption in
1940-1945 of ~33'000 t/y, incl.
gasoline, diesel, aviation fuel

For comparison:

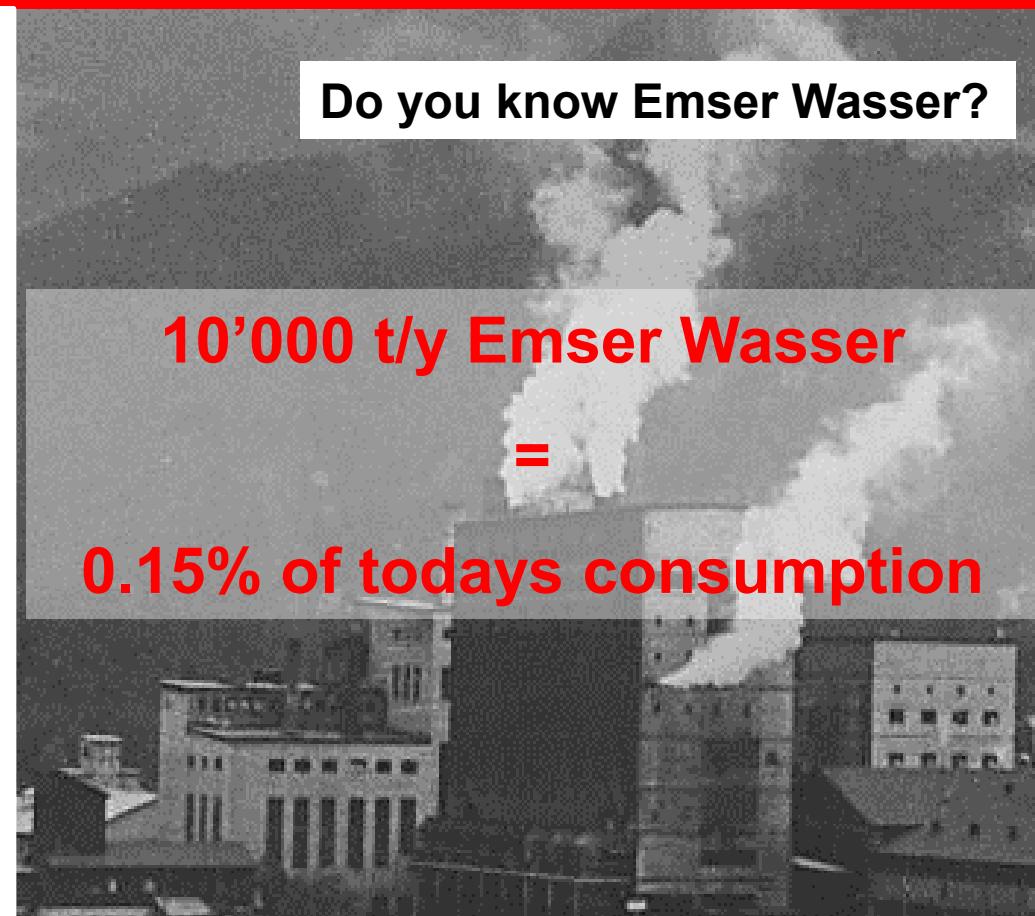
In 2017, we consumed 6'760'000 t/y
(>200 x), 35% gasoline, 39% diesel,
and 26% jet fuel.

Do you know Emser Wasser?

10'000 t/y Emser Wasser

=

0.15% of todays consumption



New fuels, new risks, new challenges: The chemistry and toxicity of syn-fuels

Emser Wasser:

Mix of methanol / ethanol (3/2)

Fermentation of wood residues in
the HOVAG in Domat-Ems

Werner Oswald (1904-1979),
founder of the HOVAG to support
the local forest industry

Peak production in 1943

10'000 t/y (12'600'000 L)

1/3 of liquid fuel consumption in
1940-1945 of ~33'000 t/y, incl.
gasoline, diesel, aviation fuel

For comparison:

In 2017, we consumed 6'760'000 t/y
(>200 x), 35% gasoline, 39% diesel,
and 26% jet fuel.



Decision of the Swiss
people (men) in 1956:

465'000 No's (56%)

365'000 Yes (44%)

No national production of
renewable
oxygenated fuels

New fuels, new risks, new challenges: The chemistry and toxicity of syn-fuels

Empa at its best, comprehensive investigation on oxygenated fuels in 1952

EIDGENÖSSISCHE MATERIALPRÜFUNGS- UND VERSUCHSANSTALT
FÜR INDUSTRIE, BAUWESEN UND GEWERBE, ZÜRICH

LABORATOIRE FÉDÉRAL D'ESSAI DES MATÉRIAUX ET INSTITUT DE
RECHERCHES – INDUSTRIE, GÉNIE CIVIL, ARTS ET MÉTIERS – ZURICH

More lessons from the past

Die Verknappung der Werk-, aber auch der Betriebsstoffe, zu welcher der Zweite Weltkrieg in der Schweiz führte, hat der Eidg. Materialprüfungs- und Versuchsanstalt mehrfach die Aufgabe gestellt, durch systematische Versuche die Möglichkeiten eines Ersatzes bisher verwendeter Stoffe durch andere zu studieren. In den Rahmen dieser grundlegenden Untersuchungen der EMPA über Ersatzstoffe gehört auch die vorliegende Studie von Dr. M. Brunner, entstanden in den Jahren 1941 bis 1947 an der Hauptabteilung B unter Leitung ihres damaligen Direktors, Prof. Dr. P. Schläpfer, und seither ergänzt durch eine Reihe weiterer Versuche. Mit ihren wesentlichen Erkenntnissen und den jahrelangen, vielfachen Erfahrungen, die sie zu einem Ganzen ordnet, wurde aus einer einst zeitbedingten Untersuchung eine Abhandlung von grundlegender Bedeutung für alle Fragen, welche in irgendeiner Weise mit der Verwendung sauerstoffhaltiger Inlandtreibstoffe zusammenhängen.

Eidg. Materialprüfungs- und Versuchsanstalt

Der Direktionspräsident:

**Empa Direktor:
Prof. Eduard Amstutz**

Über den Betrieb von
Vergasermotoren
mit sauerstoffhaltigen Treibstoffen

On the operation of
combustion engines
mit besonderer Berücksichtigung
der in der Schweiz im Motorfahrzeug- und Flugbetrieb angewandten
Benzingemische mit Ersatztreibstoffkomponenten
with oxygen-containing fuels

Dr. MAX BRUNNER

Sektsionschef an der Eidg. Materialprüfungs- und Versuchsanstalt
und Privatdozent an der Eidg. Techn. Hochschule in Zürich

ZÜRICH, JUNI 1952

New fuels, new risks, new challenges: The chemistry and toxicity of syn-fuels

If you want to learn more on oxygenated fuels, you must read it!

Syn-fuels to blend with fossil fuels
Independence from import (WW2)

O-containing fuels produced in CH:
**Paraldehyde, methanol, ethanol,
acetone, ethyl acetate**

Fuel properties: Energy content,
mixability, water up-take, etc.

Engine performance:
**Fuel consumption, knocking,
bubble formation, corrosion,
ignition properties, etc.**

Vorwort

Mit dem Beginn des Zweiten Weltkrieges ergab sich für die Schweiz die Notwendigkeit, die eingelagerten Vorräte an flüssigen Treibstoffen sowie später auch die ständig zurückgehenden, ja schließlich bis auf den Nullpunkt sinkenden Treibstoffimporte durch passend ausgewählte Inlandtreibstoffe zu strecken.

Da unser Land über keine Erdölquellen und auch nicht über eigene Verfahren zur Herstellung synthetischer Benzine verfügt, mussten andere Wege beschränkt werden. Von Wichtigkeit war, besonders für den Flugbetrieb, die Beschaffung genügend kalte- und klopffester Treibstoffe. Nach eingehendem Studium der mannigfaltigen technischen und wirtschaftlichen Fragenkomplexe fiel schließlich die Wahl auf *sauerstoffhaltige Inlandtreibstoffe*, wie Paraldehyd (ausschließlich für den Fahrzeugbetrieb), Methanol, Äthanol, Äthylacetat und Aceton. Daneben wurden, zur Entlastung des Sektors „Flüssige Treibstoffe“, Holz- und Holzkohlengas, Karbid und Acetylen, sowie in geringem Umfang auch landeseigenes Methan beigezogen.

Die Anwendung sauerstoffhaltiger Inlandkomponenten, die sich in verschiedener Hinsicht stark von dem praktisch ausschließlich auf Kohlenwasserstoffbasis aufgebauten Auto- oder Flugbenzin unterscheiden, erforderte zur Gewährleistung eines möglichst störungsfreien Fahr- und Flugbetriebe vorerst die Abklärung zahlreicher treibstofftechnischer Probleme.

Der frühere Direktor der Hauptabteilung B der EMPA, Herr Prof. Dr. P. Schläpfer, hat, in seiner Eigenschaft als Beauftragter der Armee für Betriebsstofffragen und Berater der zivilen Instanzen des Treibstoffsektors, insbesondere die Sektion für Kraft und Wärme des KIA, den Verfasser der vorliegenden Arbeit als Vorsteher der früheren Abteilung B III der EMPA mit der Ausarbeitung der erforderlichen technischen Grundlagen betraut. Hierzu gehörten u. a. das Aufstellen von Qualitätsrichtlinien und die Überprüfung der von den verschiedenen Werken gelieferten Inlandtreibstoffe sowie die Durchführung laboratoriumsmäßiger Versuche über die am besten geeigneten Zusammensetzungen. Als notwendige Ergänzung dazu wurden auch praktische Prüfungen an Prüfstands-Auto- und -Flugmotoren sowie Versuche an Fahr- und Flugzeugen selbst, zur Feststellung von

Motorleistung, Treibstoffverbrauch und des Verhaltens im praktischen Betrieb im allgemeinen durchgeführt. Im weiteren mussten auch Vorschriften über Aufmischung, Lagerung und Verwendung der Benzin gemische ausgearbeitet werden, dies, um einen möglichst wirtschaftlichen und störungsfreien Fahr- und Flugbetrieb zu gewährleisten.

Eine gesamthaft Darstellung der zahlreichen Probleme, welche der Übergang vom Benzinbetrieb zum Betrieb mit Benzingemischen auf Basis sauerstoffhaltiger Komponenten mit sich bringt, ist in der Schweiz noch nicht erfolgt. Es erschien deshalb wünschenswert, diese Lücke auszufüllen¹.

An Hand eines großen Versuchsmaterials, das in letzter Zeit zur Abrundung noch durch verschiedene Laboratoriums- und Prüfstandsversuche ergänzt wurde, sollen die für den Ersatztreibstoffbetrieb wichtigsten Eigenschaften und Auswirkungen, wie Mischbarkeit, Klopffestigkeit und Wasserempfindlichkeit, dann insbesondere auch Motorleistung, Treibstoffverbrauch, Klopffestigkeit und Neigung zur unerwünschten Dampfblasenbildung, in allgemeiner Weise behandelt werden, wobei die tatsächlich in der Schweiz angewandten Benzingemische darin gewissermaßen mehr als Spezialfall figurieren. Zum Schlusse werden noch Fragen des Lösevermögens und der Korrosion, ferner der Starteigenschaften gestreift.

Die Entwicklung der im Interesse der Landesverteidigung in den vergangenen Kriegsjahren in der Schweiz auf Veranlassung der zivilen und militärischen Instanzen entwickelten Ersatztreibstoffe ist eng mit dem fruchtbaren Wirken von Prof. Dr. P. Schläpfer, Direktor der Hauptabteilung B der EMPA in den Jahren 1937 bis 1949, verbunden. Der Verfasser der vorliegenden Arbeit hatte das Privileg, von Prof. Schläpfer in das interessante Gebiet der flüssigen Ersatztreibstoffe eingeführt zu werden, unter seiner Leitung die ganze Entwicklung mitzuerleben, an ihr aktiv mitzuarbeiten und dabei eine Fülle wertvoller Anregungen empfangen zu dürfen. Dafür ist er seinem Lehrmeister für immer zu aufrichtigem Dank verpflichtet.

M. BRUNNER.

¹ Die vorliegende Studie wurde vom Verfasser im Frühling 1950 der ETH als Habilitationsschrift eingereicht.

New fuels, new risks, new challenges: The chemistry and toxicity of syn-fuels

Oxygenated fuels with considerably lower energy content

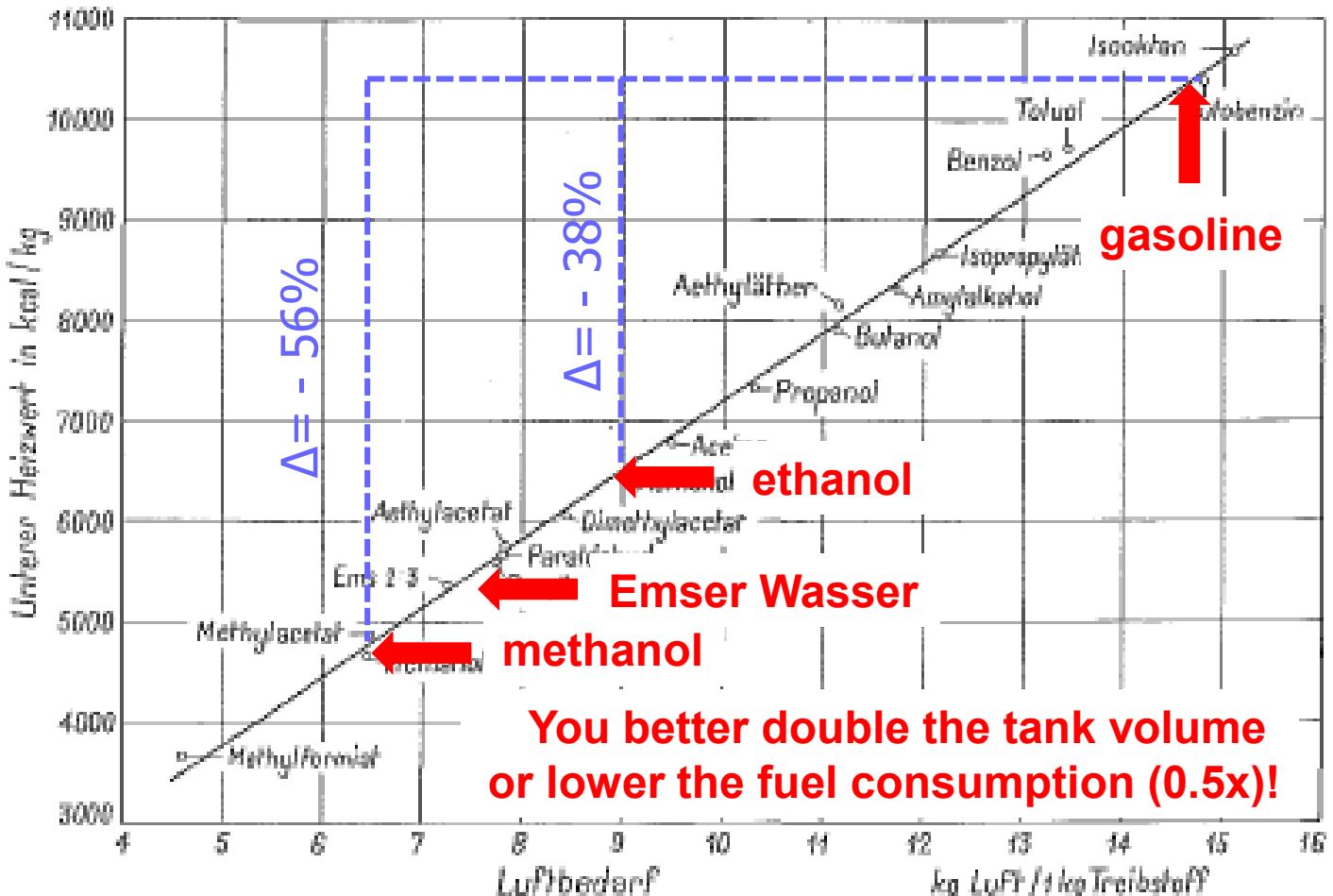


Fig. 13. Correlation of specific energy (lower calorific value) and specific air consumption

New fuels, new risks, new challenges: The chemistry and toxicity of syn-fuels

Oxygenated fuels with low energy content and high evaporation heat!

Tab. 1. Physikalisch-chemische und motorische Eigenschaften verschiedener sauerstoffhaltiger Treibstoffkomponenten.
Vergleich mit Autobenzin und Flugbenzin

	Methanol (Euro, Lennz)	Athanol (Euro)	Athanol-Methanol 2:3 (Euro)	Para B-134 (Lennz)	Athylacetat (Lennz)	Aceton (Lennz)	Athylacetat Aceton 4:1 (Lennz)	Autobenzin OZ-68/73	Flugbenzin OZ 100/130
Spezifisches Gewicht bei 20° C	0,791	0,789	0,791	0,960	0,960	0,792	0,878	0,730	0,705
Gefrierpunkt, bzw. Kristallausscheidung bei ° C	-98	-112	-	-8	-82,4	-94	-80	unter -50	unter -60
Siedeanalyse: Siedebeginn ° C	methanol	ethanol	Emser Wasser	65-70	-	-	-	-	40-45
10 Vol.-% bis ° C				84-88	-	-	-	-	60-70
50 Vol.-% bis ° C				116-117	-	-	-	-	90-100
90 Vol.-% bis ° C				123	-	-	-	-	125-135
Endsiedepunkt ° C				124-125	-	-	-	-	150-160
Siedepunkt (760 mm Hg) ° C				-	77,2	56,2	56-77	-	-
No tetra-ethyl lead needed!	0,32 0,01	0,16 0,01	0,25 0,05	0,22 0,05	0,53 0,05	0,30 0,05	0,5-0,7 0,05	0,4-0,5 0,01	0,4-0,5 0,01
Bleitetraäthylgehalt cm³/L	0	0	0	0	0	0	0-0,6	0-0,6	0,8-1,2
Verdampfungswärme kcal/kg	263	204	239	124 119 5600 5375	87,6 78,8 98,2 82,8	124	94,3	75	80 56 10500 7400
Evaporation heat (kcal/kg)	263	204	239	5600	5765	5800	55	10500	10500
Luftbedarf kg/kg	6,6	8,0	7,1	7,74	7,83	9,50	8,15	14-30	15,00
Luftbedarf kg/L	5,1	7,0	5,1-4	7,43	7,05	7,52	7,15	10-30	10,56
Gemischheizwert ($\lambda = 1$) kcal/Nm³	819	866	842	890	907	875	896	892	887
Gemischheizwert korrigiert*	865	893	880	910	921	891	911	897	894
Oktanzahl (ASTM-CFR-Motormeth.) ca.	90	91-92	90,5-91	66	> 100	> 100	> 100	68-75	100

New fuels, new risks, new challenges: The chemistry and toxicity of syn-fuels

All you wanted to know on oxygenated fuels, available at Empa since 1952!

Tab. 2. Physikalisch-chemische und motorische Eigenschaften von sauerstoffhaltigen Benzingemischen für Fahrzeug- und Flugmotoren

	Auto- benzin	«Pura»-Benzingemische		Benzin- gemische mit «Para» und «Ems» (Äthanol-Methanol 2:3)							Flugtreibstoffe			
		P1	P2	Z	L	A	B	C	D	E	Flugbenzin 100/130	K-93	K-90-AM-4	
Zusammensetzung in Vol.-% Lorenz «Para» «Ems» Äthanol-Methanol 2:3		20	30	18 27	15 15	8 10 8,0	2,0 7,7 1,3 Meth.	3,7 3,0 Äth. 7,90 Meth.	2,45 5,75 Äth. 7,90 Meth.	5,0 12,5	5,5 12,0		Zus.setz. s. Seite 75	Zus.setz. s. Seite 75
Höhere Alkohole (Ems) Motorenbenzol Autobenzin Bleitetralkylgehalt cm ³ /L	100 0-0,6										2,5 80,0 1,3-0,4	Fl.b. 100% 0,8-1,0	0,6-0,8 0,8-1,2	
Spezifisches Gewicht bei 20° C Kältebeständigkeit, Auscheidungen ° C	0,730 unter -50	0,77-0,78 —42	0,79-0,80 —35	0,795 unter -40	0,774 unter -40	0,755 —37	0,740 —37	0,744 —50	0,747 —33	0,753 unter -38	0,754 —35	0,705 unter -60	0,8-0,85 unter -50	0,750 —45 b.—50
Wasseraufnahmevermögen: Schicht.tn mit 0,1 Vol.-% Wasser bei ° C mit 0,2 Vol.-% Wasser bei ° C mit 0,5 Vol.-% Wasser bei ° C	—			—24	+ 4								—50 —34 b.—38 —22	— —40 b.—42 —22
Siedeanalyse: Siedeb. Vol.-%-Destillat bi														45 5 30 55
100° C 150° C Siedeschluß ° C	35-40 80-85 180-205	35-45 80-90 170-180	35-45 75-80 180-200	55-65 85-90 180-190	40 90 170-180	40-45 70-80 200	42 78 200	50 90 190	49 84 198	57 91 190	45-55 80-90 180-200	50-60 95-98 150-160	80-90 95-98 135-175	76 93 175
Dampfdruck nach Reid, kg/cm ² bei 37,8° C Verdampfungswärme (Sdp.) kcal/kg Heizwert (unterer) kcal/kg kcal/l.	0,5-0,7 70 10400 7600	0,6-0,7 80 9340 7150	0,6-0,7 90 8680 6930	0,5 135 8000 6350	0,5-0,6 105 8740 6700	0,7 95 9380 7070	0,75-0,80 85 9870 7290	0,50-0,55 83 9780 7280	0,65-0,70 101 9430 7040	0,6-0,7 92 9415 7085	0,5-0,6 91 9400 7090	0,4-0,5 80 10500 7400	0,50-0,55 84 7845 6960	0,60-0,65 119 8760 6570
Luftbedarf ($\lambda = 1$) kg/kg kg/L Gemischheizwert kcal/Nm ³ Oktanzahl CFR-Motormethode	14,80 10,80 890 68-75	13,10 10,15 890 67-73	12,30 9,85 890 67-73	11,30 9,00 880 80	12,40 9,58 883 76	13,35 10,05 885 70-73	14,00 10,35 886 73	14,11 10,50 887 70-73	13,47 10,06 883 76-77	13,35 10,05 884 75-80	13,34 10,56 884 76-82	15,00 8,94 887 99-100	11,20 9,13 894 93-94	12,17 880 894 90-91
Zeit der Anwendung	ab 1947 im Sommer	Sept. 1941 bis April 1943	April 1941 bis Sept. 1941	Sept. 1944 bis Dex. 1945	Sept. 1944 bis Dex. 1945	Dez. 1945 bis April 1946	April 1946 bis Aug. 1946	Aug. 1946 bis Okt. 1946	Winter 1946/47	Winter 1947/48/49	Winter 1949/50/51	von etwa 1935-1951	Jan. 1942 bis Ende 1943	Mitte 1945

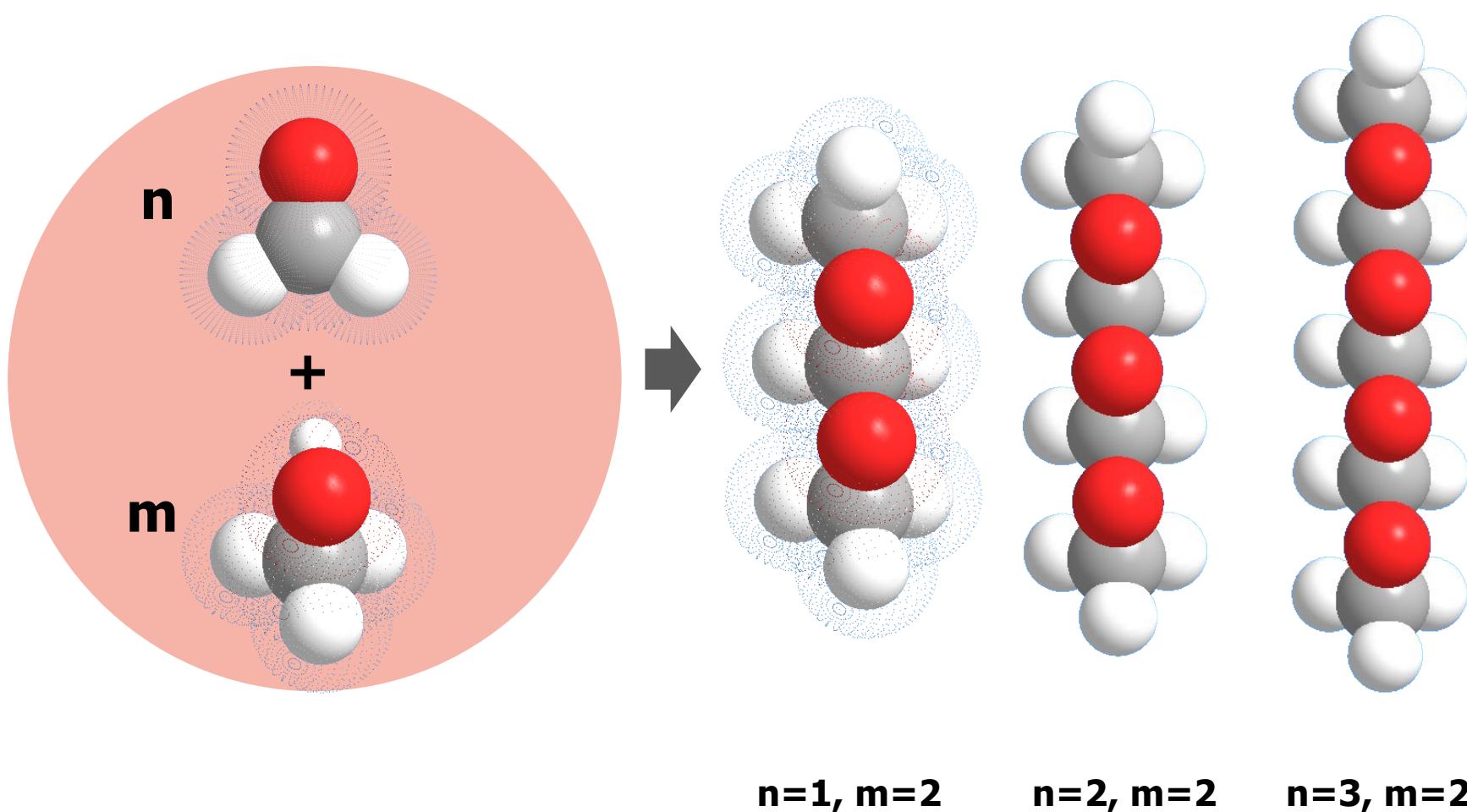
Lots of relevant data since 1952!

Toxicity of exhausts was not an issue in 1952!

Impact on catalytic converters was not an issue as well!

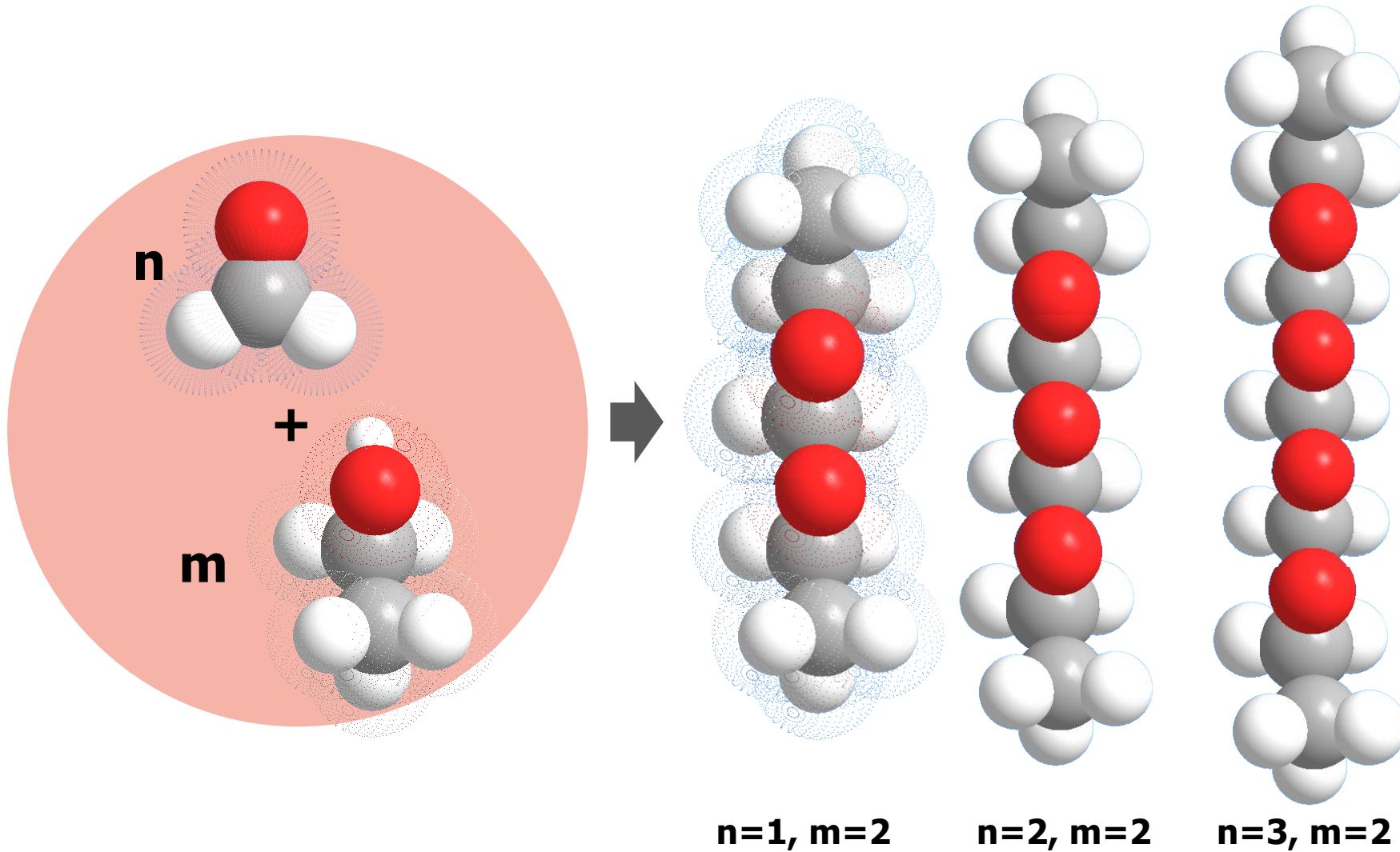
The chemistry of oxygenated fuels

Formaldehyde, methanol, ethanol and other alcohols – a playground for chemists!



The chemistry of oxygenated fuels

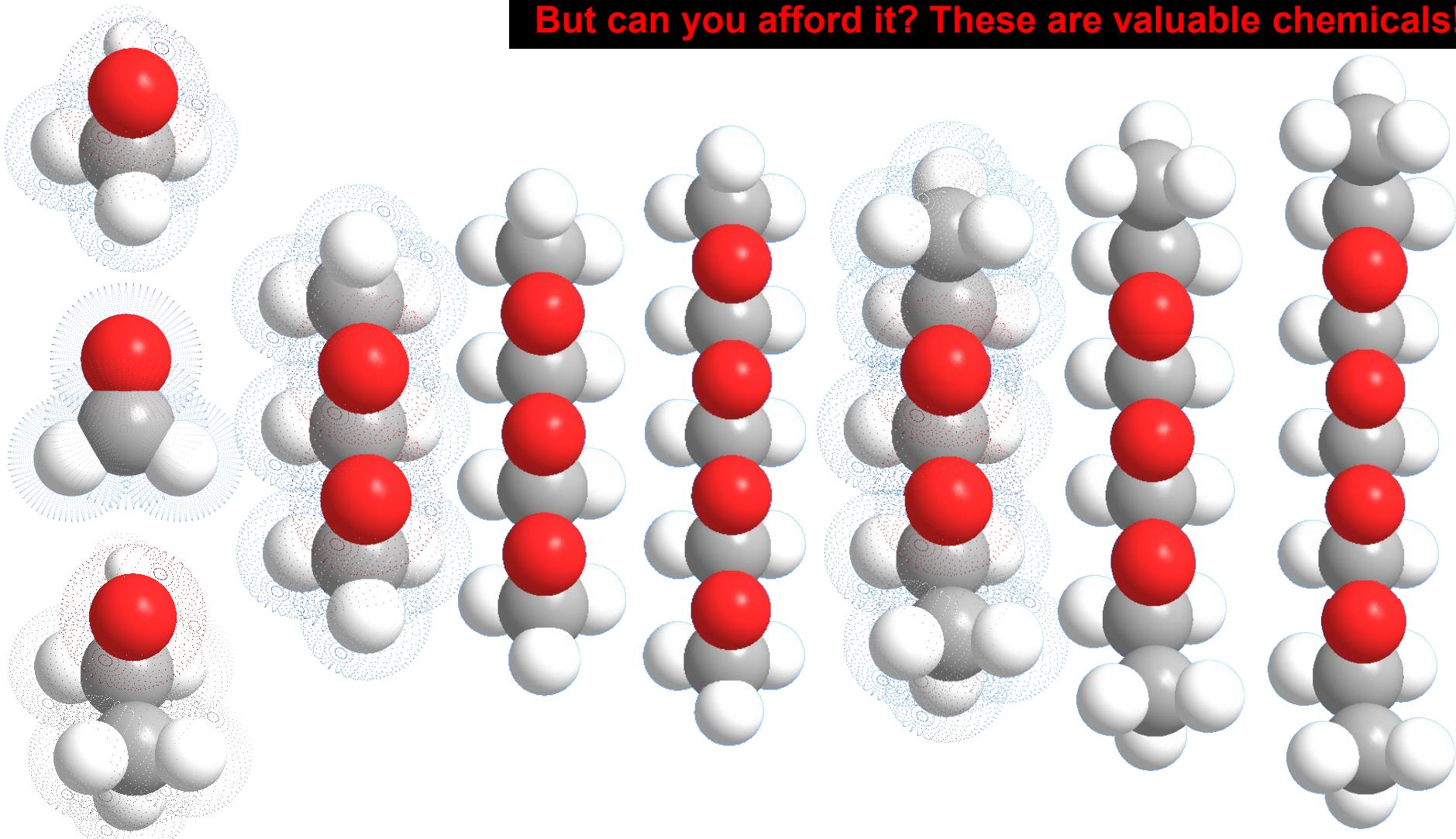
Formaldehyde, methanol, ethanol and other alcohols – a playground for chemists!



The chemistry of oxygenated fuels

Oxygenated fuels - whatever you want, chemists can make it!

But can you afford it? These are valuable chemicals!



New fuels, new risks, new opportunities: The chemistry and toxicity of synthetic fuels

From fossil fuel to synthetic fuel combustion?

Lessons from the past

(What are the global trends?)

Renewable hydrocarbon fuels

(Soot remains bad news)

The chemistry of oxygenated fuels

(Many ways to go)

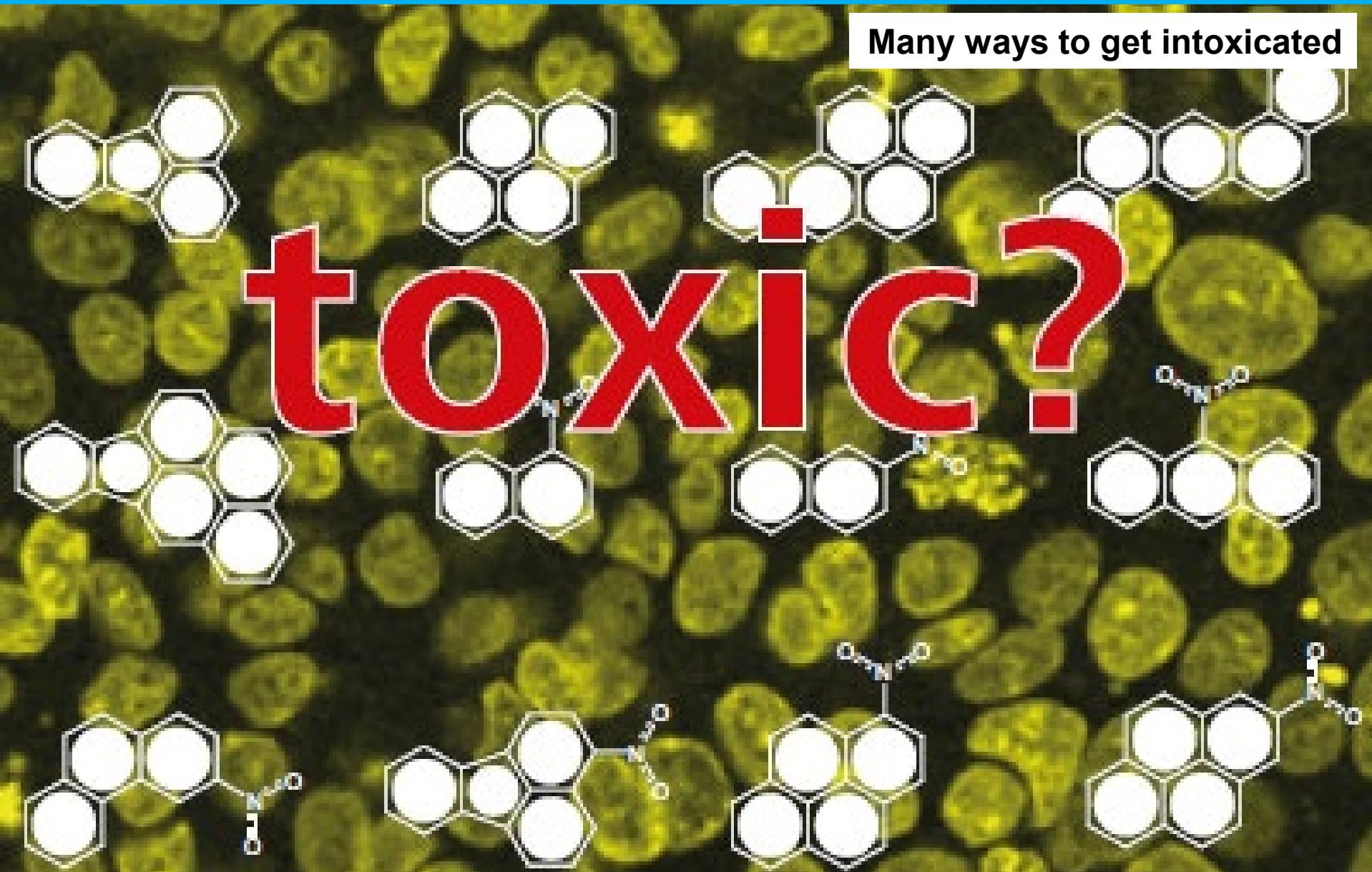
New fuels, new risks, new opportunities

(The genotoxic potential)

Are exhausts of oxygenated fuels toxic?

Many ways to get intoxicated

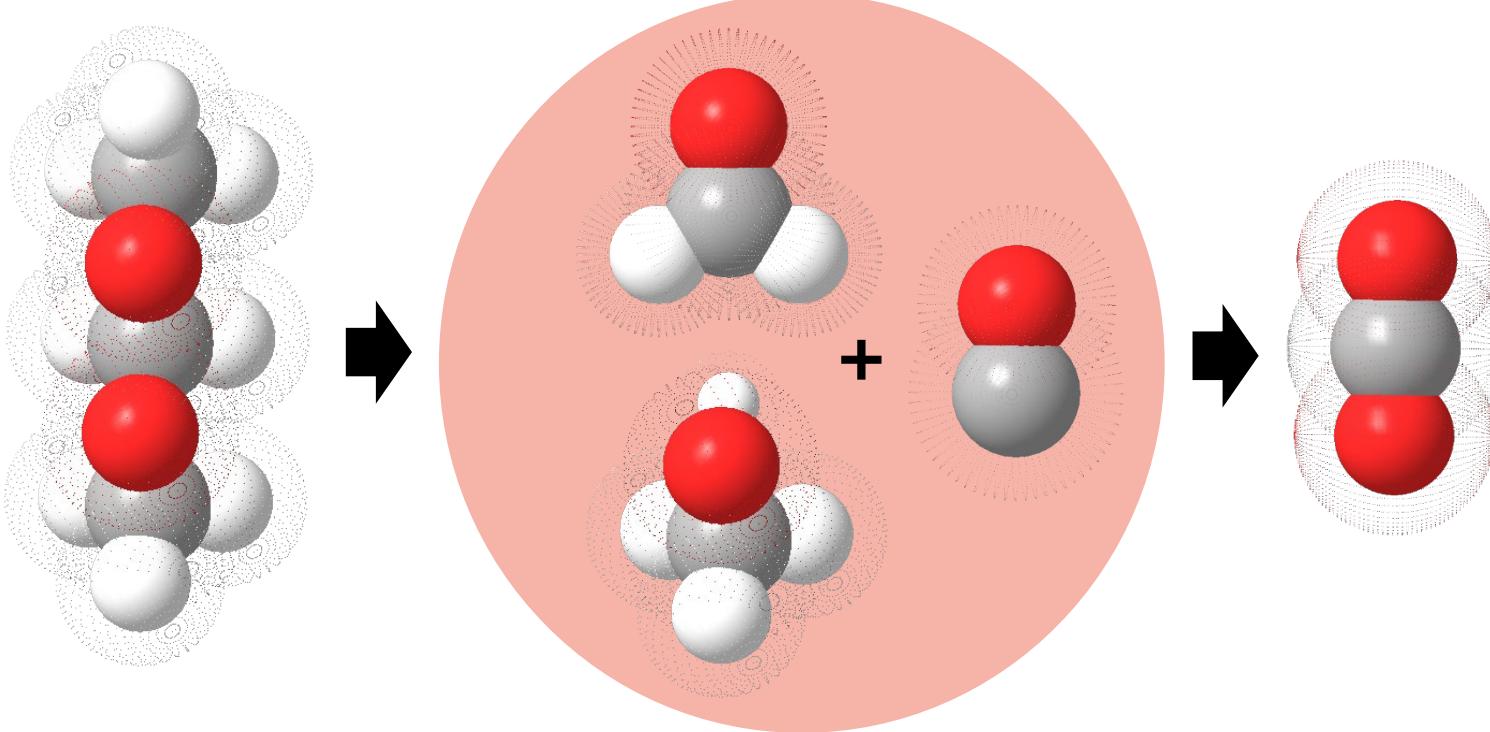
toxic?



Are exhausts of oxygenated fuels toxic?

What combustion products would you expect if you burn oxygenated fuels?

An educated guess:
the compounds you used to synthesize them!



Are exhausts of oxygenated fuels toxic?

Many ways to get intoxicated, mostly chronic diseases, only CO kills quickly

toxic?

Acute toxicity: - CO, formaldehyde, methanol

Chronic toxicity: - oxidative stress
- inflammation
- chronic obstructive pulmonary disease

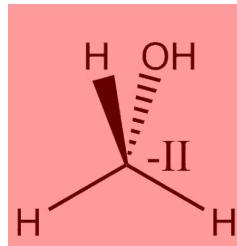
Genotoxicity: - mutations
- cancer

How toxic are combustion exhausts, what endpoints to consider?

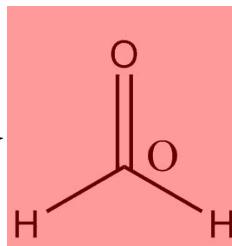
Are exhausts of oxygenated fuels toxic?

The combustion of methanol leads to toxic intermediates!

Problem: Acute toxicity



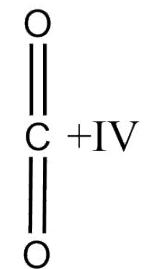
acute toxic
blindness, death



acute toxic
irritant, neurotoxic
genotoxic
class B1 carcinogen



acute toxic
12800 ppm deathly



non-reactive
green house gas

Are exhausts of oxygenated fuels toxic?

CO limit 1000 mg/km for gasoline vehicles corresponds to ~1300 mg/m³ exhaust

Problem: CO intoxication

ppm (mg/m³)

35 (44)

- headache, dizziness in 6-8 h

100 (125)

- headache, dizziness in 2-3 h

200 (250) **2x**

- headache, dizziness in 2-3 h, loss of judgment

400 (500)

- frontal headache, in 1-2 h

800 (1000)

- dizziness, nausea, convulsion in 45 min in 6 h **Euro-4,-5,-6**

1000 mg/km

1600 (2000)

- dizziness, nausea in 20 min, death <2h

Euro-2

3200 (4000)

- dizziness, nausea in <10 min, death <30 min

2200 mg/km

6400 (8000)

- dizziness, convulsion, respiratory arrest, death <20 min

12800 (16000)

- unconsciousness after 3 breath, death <3 min **Pre Euro-1**

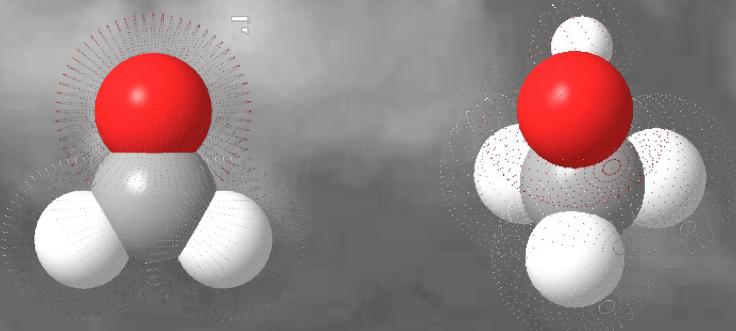
35000 mg/km

New fuels, new risks, new opportunities: The chemistry and toxicity of synthetic fuels

Hazard assessment of synthetic fuel exhausts

A lot home work ahead of us!

- New fuel specifications
- New emission standards
(for formaldehyde, methanol, etc.)



US LEV
8 mg/mile (5 mg/km)



New fuels, new risks, new opportunities: The chemistry and toxicity of synthetic fuels

Hazard assessment of synthetic fuel exhausts

A lot home work ahead of us!

- New fuel specifications
- New emission standards
(for formaldehyde, methanol, etc.)
- New instrumentation
(FID does not work)
- Cell toxicity tests
- Genotoxicity tests
(mutagenicity and carcinogenicity)
- Multi-compartment analysis
(impact on soil, water, air)

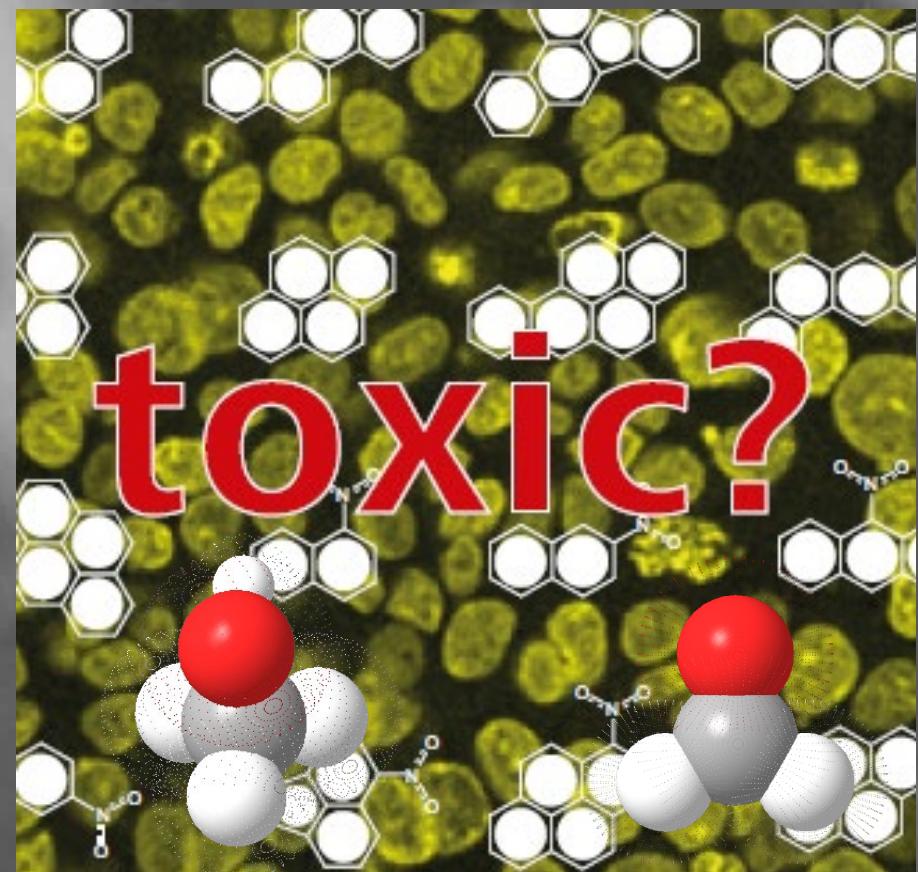


New fuels, new risks, new opportunities: The chemistry and toxicity of synthetic fuels

Hazard assessment of synthetic fuel exhausts

A lot home work ahead of us!

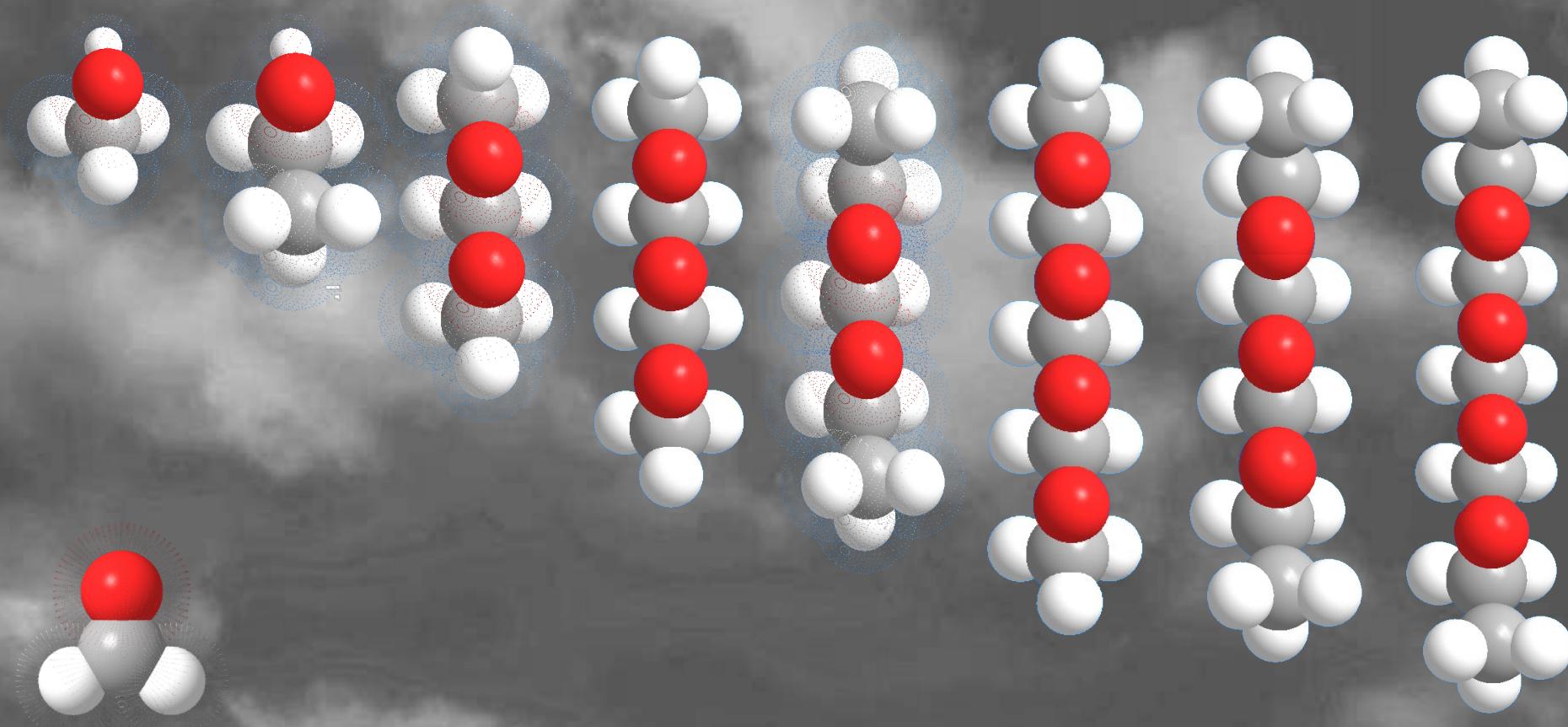
- New fuel specifications
- New emission standards
(for formaldehyde, methanol, etc.)
- New instrumentation
(FID does not work)
- Cell toxicity tests
- Genotoxicity tests
(mutagenicity and carcinogenicity)
- Multi-compartment analysis
(impact on soil, water, air)
- Impact on catalysts & filters



New fuels, new risks, new opportunities: The chemistry and toxicity of synthetic fuels

Oxygenated fuels - whatever you want, chemists can make it, but is it renewable?

Is this the way to go?



New fuels, new risks, new opportunities: The chemistry and toxicity of synthetic fuels

From fossil fuel to synthetic fuel combustion?

Lessons from the past

(What are the global trends?)

Renewable hydrocarbon fuels

(Soot remains bad news)

The chemistry of oxygenated fuels

(Many ways to go)

New fuels, new risks, new opportunities

(The genotoxic potential)