



„Intensivierte Chemische Verfahren“

Stellungnahme zu Fragen der Enquetekommission II zur Zukunft der chemischen Industrie in Nordrhein-Westfalen am 9. Mai 2014

Katalyse

1. Aktuelle Bedeutung der Katalyse

Die Bedeutung der Katalyse im Hinblick auf die zukünftige Chemie besitzt verschiedene Facetten.

- a) Die Erschließung alternativer oder erneuerbarer Rohstoffquellen erfordert in vielen Fällen die reaktionstechnische Aktivierung niederenergetischer, reaktionsträger Stoffe. Typisches Beispiel ist die stoffliche Nutzung von CO₂ als Baustein für Polymere oder andere Grundchemikalien, wie sie aktuell im BMBF-Förderschwerpunkt „Technologien für Nachhaltigkeit und Klimaschutz – Chemische Prozesse und stoffliche Nutzung von CO₂“ (www.chemieundco2.de) erforscht wird. Technologische Machbarkeit, Wirtschaftlichkeit und ökologische Vorteilhaftigkeit dieser Prozesse werden dabei zentral von der Verfügbarkeit geeigneter Katalysatoren bestimmt.
- b) Der für die Herstellung eines Produktes erforderliche spezifische Energiebedarf [kJ/kg Produkt] wird zum überwiegenden Teil durch den Aufarbeitungsaufwand nach der Synthese bzw. nach der Produktgewinnung verursacht. Je nach Produkt- bzw. Stoffgruppe sind hier 50 % bis 90 % des Aufwands lokalisiert. Eine nebenproduktarme Synthese mit hoher Wertproduktausbeute reduziert den Aufarbeitungsaufwand und mindert damit den spezifischen Energiebedarf. Schlüssel dafür ist ebenfalls eine effektive Katalyse in Kombination mit einer optimalen Reaktionsführung.
- c) Der Einsatz alternativer Reaktionsmedien, wie ionische Flüssigkeiten oder überkritische Fluide, in Kombination mit der Erschließung neuer Prozessfenster (hohe Drücke, hohe Temperaturen, definierte und enge Verweilzeitverteilungen, präzise Konzentrationsführung der Reaktanden) durch Nutzung von mikro- und/oder millistrukturierten Reaktoren kann den Bereich der katalysatorfreien Synthese bzw. Stoffumwandlung erweitern. Dies wurde z. B. in der DBU-Fördermaßnahme „Novel Process Windows“ explizit adressiert. Es ist allerdings zu erwarten, dass dieser Aspekt von geringem Impact ist als die beiden erstgenannten Punkte.

2. Möglichkeiten und Grenzen von modularen Mikroreaktoren für die Herstellung von Grundchemikalien

Mikro- und Millireaktoren weisen mindestens eine funktionsrelevante Abmessung im Mikro- oder Millimetermaßstab auf. Durch internes Numbering-up können parallele Strömungswege bereitgestellt werden, durch die eine Vervielfachung des Durchsatzes bei gleichzeitiger Wahrung der Vorteile der Mikrostrukturierung möglich ist. Für Flüssigkeitsprozesse können so bilanzielle Durchsätze bis ca. 100 kg/h, teilweise

auch darüber, erreicht werden. Dies ist auch der in dem Forschungsprojekt F3 untersuchte Kapazitätsrahmen von 0,1 kg/h bis 30 kg /h (www.f3factory.com). Bei kontinuierlichem Betrieb mit 8000 h/a entspricht dies einer Produktionskapazität von ca. 1000 t/a. Unterstellt man auch Durchsätze von mehreren Hundert kg/h und erlaubt eine Parallelisierung von Reaktoren erscheinen Produktionskapazitäten von 10.000 t/a bis 15.000 t/a möglich. Die unter Einsatz der Mikro- und Milliverfahrenstechnik hergestellten Produkte müssen in diesen Kapazitätsrahmen passen.

Gerade für Grundchemikalien ist neben der technologischen Machbarkeit des Produktionsverfahrens die Einbindung für die Weiterverarbeitungs- und Wertschöpfungskette für die Wirtschaftlichkeit entscheidend. Hierfür haben sich in den letzten Jahrzehnten große Verbundstandorte mit einer engen stofflichen Verbindung und hoher stofflicher Effizienz etabliert. Aktuelle Entwicklungen sehen eine Rückwärtsintegration in Richtung der – fossilen – Rohstoffe mit einer weiteren Steigerung der Anlagenkapazitäten auf mehrere Hunderttausend t/a bis über 1 Mio t/a. Nach meiner Einschätzung ist nicht zu erwarten, dass diese Entwicklung auf absehbare Zeit durch modulare Mikroreaktoren abgelöst wird.

3. Katalysatoren der Zukunft und deren Beitrag zur Energieeffizienz

Die stoffliche Zusammensetzung von Katalysatoren ist nicht mein zentrales Arbeitsgebiet, daher möchte ich mich hierzu einer Einschätzung enthalten.

Der Beitrag maßgeschneiderter Katalysatoren zur gesteigerten Energieeffizienz basiert auf

- der Erschließung bisher nicht genutzter Rohstoffquellen, insbes. erneuerbarer Rohstoffe, siehe 1.,
- der Reduzierung des für die Reaktion erforderlichen Energiebedarfs sowie der Beschleunigung der Reaktion sowie
- der Verminderung von Aufarbeitungsaufwand durch selektivere Reaktionsführung.

Die beiden letztgenannten Punkte führen sowohl zu einer Reduzierung der Investition wie des spezifischen Energiebedarfs des Prozesses. Eine Quantifizierung der entsprechenden Einsparungen hängt ab vom jeweiligen Prozess und kann m. E. nicht allgemein gültig beziffert werden.

4. Heterogene Katalyse in Verbindung mit Mikroreaktoren

Mikroreaktoren bieten kurze Transportwege für Stoff- und Wärmetransport, geringe Produktinhalte sowie eine definierte und potentiell enge Verweilzeitverteilungen. Die Beschleunigung einer Reaktion sowie eine hohe Raum-Zeit-Ausbeute erfordern die sichere Beherrschung des Reaktionsgeschehens bzw. Führung der Reaktionsbedingungen. Daraus ergeben sich synergistische Effekte aus Reaktion in Mikrostrukturen und Temperaturführung. Weitere Verbesserungen können durch eine Beschichtung mikrostrukturierter Reaktoren mit Katalysatoren sowie monolithische Katalysatoren erreicht werden. Hemmend für die breitere Anwendung dieser Konzepte sind insbesondere Fragen der fluiddynamischen, mechanischen und thermischen Betriebsstabilität der Katalysatoren.

Flow Chemistry

5. Entwicklungsstand und Potentiale der Flow Chemistry

Die Durchführung kontinuierlicher Synthesen im Mikro- und Millimaßstab, insbesondere mit Blick auf den Batch-to-Conti-Transfer, ist ein intensivst beforschtes Feld in Akademie und Industrie. „Mikro-geeignete“ Synthesen sind identifiziert, siehe z. B. (Hessel et al. (Eds.): Micro Process Engineering, Wiley VCH, Weinheim 2009), und die entsprechenden Verfahrenspatente dokumentieren eine wachsende industrielle Relevanz (Hessel et al., Recent Pat. Chem. Eng. (2008)). Der weit überwiegende Anteil der Arbeiten befasst sich allerdings mit der Reaktion sowie unmittelbar damit zusammen hängender Aspekte, wie Mischen und Wärmeübertragung. Nur sehr wenige Arbeiten adressieren das Thema der Aufarbeitung in einem auf die Mikroreaktionstechnik abgestimmten Kapazitätsmaßstab.

6. Anwendungsbereiche, mengen- und produktbezogen

Die zu erwartenden Kapazitätsbereiche wurden bereits unter 2. abgeschätzt: Kapazitäten bis 1000 t/a können als heute möglicher Stand der Technik angesehen werden, perspektivisch scheinen 10.000 t/a bis 15.000 t/a möglich. Voraussetzung dafür ist ein kontinuierlicher Betrieb über 8000 h/a, was einer Anlagenverfügbarkeit von ca. 91 % entspricht, d. h. wie für große Einstranganlagen der chemischen Industrie. Dies kann nur für Produkte realisiert werden, bei denen keine gravierenden Kapazitätsminderungen durch Betriebsstörungen bzw. -unterbrechungen insbesondere für Reinigungsarbeiten auftreten. Belagbildungen oder die Blockade von Strömungswegen durch prozessbedingte Ablagerungen stellen nach allgemeiner Einschätzung allerdings ein wesentliches Hindernis bei der weiteren Anwendung der Flow Chemistry dar. Dies bedeutet, dass bevorzugt einphasige Prozesse in Gas- oder Flüssigphase umgesetzt werden, bei denen keine Ablagerungsphänomene erwartet werden. Zweiphasige Anwendungen Gas/flüssig oder flüssig/flüssig sind bevorzugt im Aufarbeitungsteil angesiedelt.

7. Perspektive der Implementierung in der Pilot- und Produktionstechnik

Vor einer weiteren Implementierung der Flow Chemistry sind m. E. Hindernisse auf verschiedenen Ebenen zu beseitigen:

- die sichere Vermeidung oder betriebstechnische Beherrschung von Belagbildungs- bzw. Blockade-Phänomenen in Mikroreaktoren bzw. sonstigen Apparaten,
- die Bereitstellung eines für die reaktionstechnischen Kapazitäten angepassten Baukastens trenntechnischer Grundoperationen, die eine Aufarbeitung des Reaktionsaustrags erlauben,
- stabile und sicher skalierbare Produktionskonzepte mit integrierter Prozessführung,
- modulare Apparate- und Anlagentechnik mit angepasster Sensor-, Mess-, Steuer- und Regelungstechnik, sowie
- der Nachweis der Wirtschaftlichkeit Flow Chemistry-basierter Fertigungsverfahren im Kontext von Wertschöpfungsketten unter Einbeziehung auch logistischer Aspekte.

Aktuelle Forschungsarbeiten und Fördermaßnahmen adressieren diese Themen, Fortschritte werden an verschiedenen Fronten erzielt und können im Einzelfall das letzte Hemmnis vor einer industriellen Um-

setzung beseitigen. M. E. ist im Gesamtbild damit eher eine stetige Implementierung zu erwarten denn eine sprunghafte Änderung.

Integrierte Prozesstechnik

8. Chemische Prozesse mit den höchsten Einsparpotenzialen

Die größten Einsparpotentiale können nach meiner Einschätzung für Produktionsprozesse wie unter 6. genannt erzielt werden. Darüber hinaus können Sonderaspekte, wie die prozessintegrierte Erzeugung und Bereitstellung toxischer oder sicherheitstechnisch besonders kritischer Komponenten, durch Einsparung von Sicherheitsaufwendungen zu erheblichen Vorteilen führen. Über den Grad der bereits erfolgten großtechnischen Umsetzung (jenseits der Patentlage) kann ich leider keine Angaben machen.

9. Beiträge der Prozesstechnik für nachhaltige Chemieprozesse

Beiträge der Prozesstechnik für effiziente und nachhaltige Chemieprozesse sind auf verschiedenen Feldern möglich:

- dem Prozessdesign unter Nutzung der Mikro- und Milliverfahrenstechnik wie oben dargestellt,
- der Entwicklung und Bereitstellung entsprechender Apparate- und Anlagentechnik zur Umsetzung von Prozesskonzepten,
- die Bereitstellung von Methoden und Werkzeugen zur Bewertung sowie zur ökonomischen und ökologischen Potentialabschätzung von Prozessen unter Einsatz der Flow Chemistry sowie
- der Entwicklung von integrierten Produktions- und Logistikkonzepten unter Nutzung der spezifischen Vorteile kontinuierlicher Prozesse im Mikro- und Millimaßstab.

10. Effizienzsteigerung durch integrierte Prozessteuerung

Eine verbesserte Prozessführung erfordert eine entsprechende Sensorik und Aktorik. Während milli- und mikrostrukturierte Apparate gerade kurze Zeitkonstanten für Regeleingriffe aufweisen und damit eine gezielte Prozessführung unterstützen, sind m. E. die Potentiale einer angepassten, prozessintegrierten Sensorik noch nicht hinreichend erschlossen. Mikrogerechte Drucksensoren, Durchflussmesstechnik sowie eine stabile Feststoffdosierung kleiner Ströme stellen noch besondere Hürden dar. Die Dosierung kleiner Gas- und Flüssigkeitsströme hat in den letzten Jahren deutliche Fortschritte gemacht, entsprechende Aggregate sind inzwischen kommerziell verfügbar.

11. Vor- und Nachteile, Potentiale und Grenzen der integrierten Prozesstechnik

Die größten Potentiale einer integrierten Prozesstechnik sehe ich im Bereich einer gezielten Reaktionsführung. Das zugehörige Potential kann allerdings nur erschlossen werden, wenn auch entsprechende Prozesseingriffe möglich sind. Daraus resultiert, dass bevorzugt neue Prozesse und Anlagen diese Möglichkeiten nutzen können. Diese neuen Technologien finden daher nächstliegend Einzug in Produkte und Prozesse mit eher kurzen Lebenszyklen. Dies sind typischerweise keine Grundchemikalien, siehe 2., sondern eher Spezialchemikalien, pharmazeutische Wirkstoffe, Zwischenprodukte der kosmetischen

Industrie o. ä.. Die Umstellung von Batch- auf kontinuierliche Produktionen erfordert in vielen Fällen auch eine Überarbeitung oder Adaption der Rezeptur, so dass auch dies eine Implementierung in bestehende Anlagen erschwert. D. h. neue Technologien kommen nur dann zum industriellen Einsatz, wenn sie im Moment der Technologie- und Investitionsentscheidung eine hinreichende technologische Reife und Verlässlichkeit aufweisen. Ist die nicht der Fall, bleibt das Opportunitätsfenster bis zum nächsten Entscheidungszeitpunkt geschlossen. Daraus könnte man die Rat ableiten, verstärkt die Entwicklung und den Betrieb von flexiblen Demonstratoren für mikro- und milliverfahrenstechnische Technologien zu fördern, um so die „technological readiness“ zu befördern und Demonstratoren dafür bereit zu haben.

Rahmenbedingungen/Auswirkungen

12. Politische Rahmenbedingungen

Nach meiner Einschätzung stellen die wesentlichen Hemmnisse für den weiteren Einsatz von Flow Chemistry und Prozessintensivierung technologische Herausforderungen, speziell die Betriebsstabilität unter Verblockungsgefahr, sowie eine nicht hinreichende ökonomische Vorteilhaftigkeit dieser Prozesskonzepte dar. Die durch die kontinuierliche Betriebsweise mögliche Reduzierung des spezifischen Energiebedarfs sowie der verminderte Reststoffanfall bieten in vielen Fällen keinen hinreichenden Anreiz für diesen Technologiewechsel. Dies würde allerdings eine Verteuerung der Nutzung von Primärenergie und der Entsorgung von Rest- und Abfallstoffen bedeuten, was in einem größeren Kontext als nicht zielführend anzusehen ist.

13. Auswirkungen auf den Produktionsstandort NRW

Wie unter 2. und 6. skizziert resultiert der verstärkte Einsatz von Flow Chemistry in Verbindung von Milli- und Mikroverfahrenstechnik eher in kleineren, auch dezentral möglichen Produktionsanlagen, ebenso wie in einer bevorzugten Implementierung für Spezialchemikalien oder Zwischenprodukte. Beide Aspekte sind sowohl in größeren Verbundstandorten wie auch für kleinere produzierende Betriebe umsetzbar.

Braunschweig, 2.5.2014

S. Scholl