

Vom Molekül zum Euro

Mit dem thermodynamischen Fahrstuhl zu maßgeschneiderten Prozessen

A sustainable society requires economically and environmentally benign processes for the conversion of energy and chemicals. The sustainability of these processes frequently relies on the choice of the right molecule: e.g., replacing ozone-depleting refrigerants with novel working fluids or decreasing the impacts from CO₂ capture by using novel solvents. Thus, the choice of the right molecule is often crucial for ultimate success or failure. However, exploring the vast molecular universe for the most promising molecule is similar to searching for a needle in the haystack. To identify the best molecule for a specific process, a systematic molecular design strategy has been developed at the Institute of Technical Thermodynamics Aachen, allowing the computer-aided synthesis of novel tailor-made molecules. The strategy directly quantifies the trade-offs between molecular design and process settings to assess the economic performance of the overall process using consistent models for predictive thermodynamics. The resulting optimization strategy allows finding the needle in the haystack and designing economically and environmentally improved processes.

Moleküle sind zwar für das menschliche Auge nicht sichtbar, dennoch bestimmen sie unseren Alltag. So wurden bis in die 1990er Jahre in Kühlschränken als Kältemittel Fluorchlorkohlenwasserstoffe (FCKW) wegen ihrer guten thermodynamischen Eigenschaften verwendet. Die nicht sichtbaren FCKW-Moleküle zeigten aber große Auswirkungen für den Menschen, da sie die Ozonschicht zerstören. FCKW-Kältemittel wurden verboten und durch Fluorkohlenwasserstoffe (FKW) ersetzt, die kein ozonschädigendes Chlor mehr beinhalten. Aber auch FKW-Kältemittel sind nicht ideal, da sie das Klima erwärmen. Daher wird zurzeit an neuen Kältemitteln geforscht, die weder die Ozonschicht angreifen noch zum Treibhauseffekt beitragen und sich gleichzeitig sicher und wirtschaftlich in Kühlschränken einsetzen lassen. Allerdings ist ein ideales Kältemittel nicht einfach zu finden, da mehr als 14 Millionen potenziell geeignete Molekülstrukturen denkbar sind [1]. Das Beispiel zeigt den großen Einfluss der Molekülauswahl auf unser Leben und unsere Umwelt. Aber die Auswahl von Molekülen ist nicht nur für den Kühlschrank, sondern insbesondere auch für industrielle Prozesse in der Energie- und Verfahrenstechnik von Bedeutung. Durch die optimale Auswahl von Molekülen können in vielen Prozessen sowohl

Effizienz und Wirtschaftlichkeit gesteigert als auch Umweltbelastungen verringert werden. In der Energietechnik ermöglicht die optimale Auswahl von Molekülen die Bereitstellung von Nutzwärme, Kälte und Strom. Nutzwärme für Haushalte und Industrieprozesse wird durch Wärmepumpen erzeugt; Kühleistung für Unternehmen oder Fahrzeuge durch Kältemaschinen geliefert. Sogenannte Organic Rankine Cycles (ORC) erzeugen Strom aus Niedertemperaturwärme wie Geothermie, Solarthermie oder Abwärme. Für diese Technologien ist die Wahl des verwendeten Moleküls als Arbeits- oder Kältemittel entscheidend für die Effizienz des gesamten Prozesses. In der Verfahrenstechnik spielt die Wahl von Molekülen insbesondere als Lösungsmittel eine große Rolle, wenn neue Produkte wie Medikamente, Farben oder Kunststoffe hergestellt werden [2]. Häufig kann die energieaufwendige Herstellung von chemischen Produkten durch die Wahl eines geeigneten Moleküls effizienter werden. Dabei gibt es auch Zielkonflikte bezüglich der thermodynamischen Stoffeigenschaften des Lösungsmittels: Ist eine starke Wechselwirkung mit dem Wertstoff für die Extraktion in einem ersten Prozessschritt positiv, so erschwert sie die nachgeschaltete Destillation zur Trennung von



Bild 1: Vom Molekül zum Euro – Das systematische Design von Molekülen kann die Kosten von Prozessen erheblich senken.

Wertstoff und Lösungsmittel. Um eine optimale Balance zu erhalten, müssen Moleküle und Prozesse gemeinsam maßgeschneidert werden.

Die Forschung in Molecular Science beschäftigt sich in der Regel mit der Molekülebene und molekularen Phänomenen. Der Erfolg eines Moleküls entscheidet sich allerdings für die jeweilige Anwendung auf der makroskopischen Prozessebene. Daher ist für die Auswahl des optimalen Moleküls nicht nur Molecular Science, sondern auch die Verbindung zum Engineering notwendig, wie sie im Profillbereich „Molecular Science & Engineering“ (MSE) verfolgt wird.

Neue Arbeiten in MSE versuchen, durch das integrierte Design von Prozess und Molekül die Vielzahl von Molekülen systematisch zu erfassen und diese Moleküle auf Prozessebene zu evaluieren. Dafür sind Methoden notwendig, die alle Einflüsse vom Molekül bis hin zum technischen Prozess und dessen Umweltauswirkungen verbinden. Diese Verknüpfung ermöglicht die Thermodynamik. Die Einflüsse der zu betrachtenden Ebenen können dabei mithilfe des sogenannten thermodynamischen Fahrstuhls beschrieben werden.

Eine Fahrt mit dem thermodynamischen Fahrstuhl

Die unterste Ebene des thermodynamischen Fahrstuhls (Ebene 1 in Bild 2) bildet das zu suchende Molekül, das im Prozess eingesetzt werden soll – wie das Kältemittel im

Kühlschrank. Seine thermodynamischen Stoffeigenschaften, beispielsweise die Siedetemperatur oder die Dichte (Ebene 2), beschreiben das Verhalten des Moleküls innerhalb des Prozesses. Um vom Molekül und dessen Struktur auf die Stoffeigenschaften zu schließen, werden Modelle der prädiktiven Thermodynamik benötigt. Solche Modelle ermöglichen es somit, im thermodynamischen Fahrstuhl von Ebene 1 auf Ebene 2 zu fahren. Die Funktionsweise des Prozesses selbst wird durch thermodynamische Prozessgrößen beschrieben (Ebene 3), wie der Kühlschrank durch seine Kühlleistung oder den Strombedarf. Die Vorhersage der Prozessgrößen basierend auf den Stoffeigenschaften des Moleküls ermöglichen Prozessmodelle, die alle Wechselwirkungen innerhalb des Prozesses abbilden. Die Prozessmodelle bieten damit die Möglichkeit, im thermodynamischen Fahrstuhl von Ebene 2 auf Ebene 3 zu gelangen.

Die 4. und damit oberste Ebene des thermodynamischen Fahrstuhls beschreibt die Güte des Prozesses im Hinblick auf Ökonomie und Ökologie, beispielsweise die Kosten für einen Kühlschrank oder die Auswirkungen auf das Ozonloch. Zur Vorhersage von Kosten sind Auslegungsmodelle der Prozesskomponenten erforderlich. Die Umweltauswirkungen von der Herstellung bis hin zur Entsorgung bestimmt eine ökologische Bewertung. Mit diesen Methoden kann von den thermodynamischen Prozessgrößen ein Rückschluss auf die Ökonomie und Ökologie

gezogen und somit von Ebene 3 auf Ebene 4 des thermodynamischen Fahrstuhls gefahren werden.

Prädiktive Thermodynamik als Schlüssel

Die Ökonomie und Ökologie des Prozesses werden entscheidend durch das thermodynamische Verhalten des verwendeten Moleküls bestimmt. Die Gleichgewichtsthermodynamik, wie beispielsweise die Vorhersage von Siedetemperaturen, bestimmt dabei das Prozessverhalten. Die Auslegung der verwendeten Apparate und Maschinen benötigt zudem Transportgrößen, wie die Wärmeleitfähigkeit eines Moleküls. Die für die Auslegung notwendigen thermodynamischen Daten können im Prinzip in Experimenten gemessen werden. Allerdings sind solche Experimente häufig zeitintensiv und teuer, sodass thermodynamische Daten nur für wenige Moleküle zur Verfügung stehen.

Eine günstigere und effizientere Möglichkeit bietet die prädiktive Thermodynamik, mit der thermodynamische Daten von Molekülen anhand ihrer Molekülstruktur modellgestützt vorhergesagt werden können. Hierbei ist sowohl die Vorhersage von Gleichgewichtsthermodynamik als auch von Transportphänomenen möglich. Die prädiktive Thermodynamik bildet somit den Schlüssel im Umgang mit dem thermodynamischen Fahrstuhl, da sie sowohl die Voraussetzung für die Bestimmung des Prozessverhaltens als auch die Auslegung des Prozesses liefert. Sie eröffnet somit die Möglichkeit, effizient zwischen den

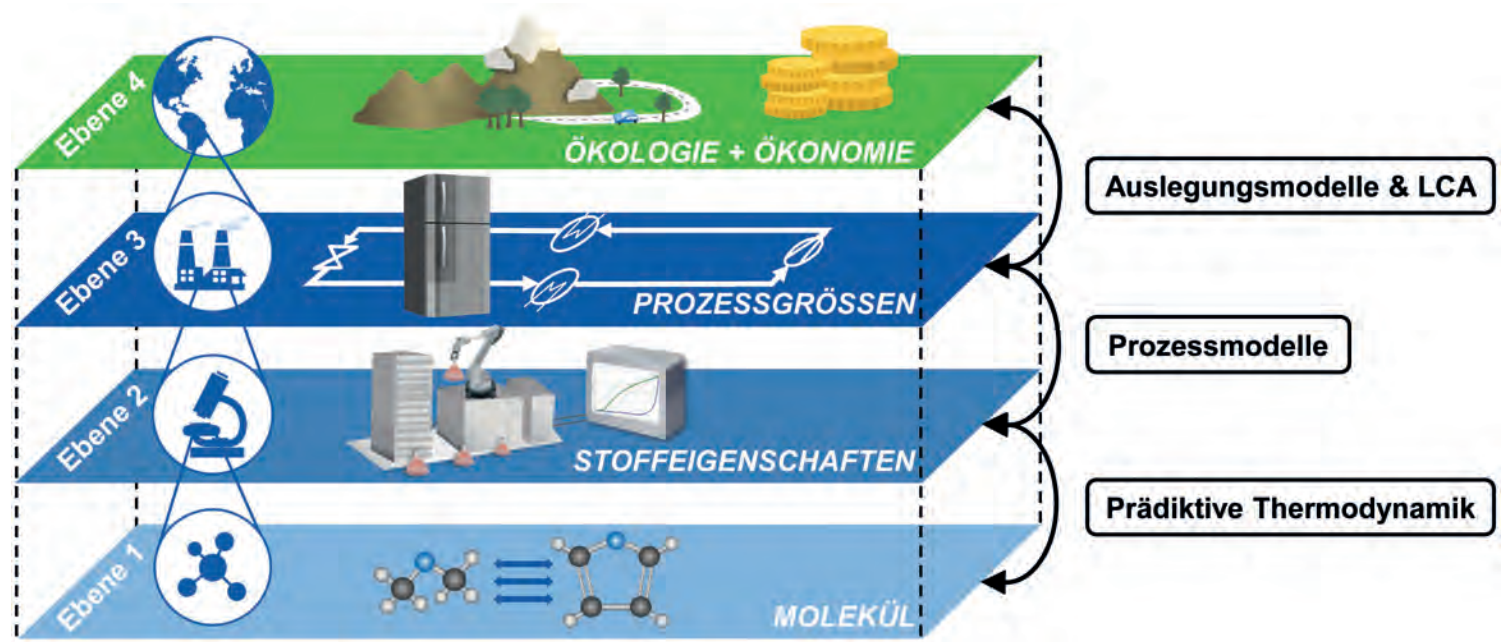


Bild 2: Die Ebenen des thermodynamischen Fahrstuhls vom Molekül bis zur ökologischen und ökonomischen Performance inklusive der verwendeten Methoden, um zwischen den einzelnen Ebenen des Fahrstuhls zu wechseln.





Bild 3: Die Fahrt mit dem thermodynamischen Fahrstuhl bildet den Schlüssel im integrierten Design von Prozessen und Molekülen.
Foto: Peter Winandy



Bild 4: Der Lehrstuhl für Technische Thermodynamik forscht zum Design von Molekülen.
Foto: Peter Winandy

einzelnen Ebenen des Fahrstuhls zu wechseln. Am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik wird die Expertise im Umgang mit prädiktiver Thermodynamik genutzt, um Methoden zum integrierten Design von Prozessen und Molekülen zu entwickeln.

Umweltschutz im Prozessdesign

Neben der Ökonomie gewinnt auch die Ökologie eines Prozesses zunehmend an Bedeutung [3]. Beispielsweise hängt die Akzeptanz eines Kühlschranks beim Verbraucher stark von der Energieeffizienzklasse ab. Aus diesem Grund muss bei der Wahl eines geeigneten Moleküls auch eine ökologische Bewertung im integrierten Design von Prozess und Molekül berücksichtigt werden. Eine ganzheitliche Methode zur ökologischen Bewertung ist das Life Cycle Assessment (LCA) nach der Norm ISO 14040, bei der der gesamte Lebenszyklus eines Produktes bilanziert wird. Analog zur thermodynamischen Bewertung von Prozessen sind auch viele Daten zur ökologischen Bewertung mittels LCA notwendig. Am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik werden daher prädiktive LCA-Methoden entwickelt, damit ökologische Faktoren bereits frühzeitig im integrier-

ten Design von Prozess und Molekül berücksichtigt werden können. Auch die LCA-Modelle können während der Entwicklung mit Daten aus dem Prozessdesign verfeinert werden. So lässt sich der Prozess nicht nur ökonomisch, sondern auch ökologisch optimieren.

Integriertes Design von Prozess und Molekül

Maßgeschneiderte Prozesse erfordern eine umfassende Betrachtung vom Molekül bis hin zur Ökonomie und Ökologie des Prozesses. Diese Betrachtung liefert ein integriertes Design auf allen Ebenen des thermodynamischen Fahrstuhls. Am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik werden dazu modellgestützte, allgemein einsetzbare Methoden entwickelt.

Das Design der Moleküle auf der untersten Ebene erfolgt dabei mittels computergestützter Moleküldesignmethoden (englisch: computer-aided molecular design – CAMD). Je nach Anwendungsfall wählt die entwickelte Methodik ein geeignetes Modell der prädiktiven Thermodynamik, um vom Molekül auf Ebene 2 des thermodynamischen Fahrstuhls zu gelangen. Diese prädiktiven Modelle be-

stimmen thermodynamische Stoffeigenschaften aus der Molekülstruktur mittels Quantenmechanik (COSMO-RS in COSMO-CAMD [4]) und Fluidtheorie (PC-SAFT in CoMT-CAMD [5]). Zur Bestimmung der thermodynamischen Prozessgrößen aus den Stoffeigenschaften werden detaillierte Modelle für Prozesse aus Energie- und Verfahrenstechnik eingesetzt, die sowohl auf Gleichgewichtsthermodynamik als auch auf Transportphänomenen beruhen. Diese Prozesse sind zum Beispiel Organic Rankine Cycles, Wärmepumpen, Absorptions- und Destillationsprozesse. Darüber hinaus ermöglichen die Modelle eine detaillierte Auslegung der Komponenten und damit die Berücksichtigung von ökonomischen Zielfunktionen basierend auf den Kosten des Prozesses. Um das resultierende Optimierungsproblem zu lösen, werden moderne, mathematische Algorithmen eingesetzt. Das Ergebnis ist ein optimales Zusammenspiel von Molekül und Prozess hinsichtlich ökonomischer und ökologischer Zielsetzungen.

Sprit sparen durch heiße Luft

Aufgrund schärferer Vorschriften zum CO₂-Ausstoß im Verkehrssektor sowie der begrenzten Verfügbarkeit von fossilen

Ressourcen ist die Senkung des Kraftstoffverbrauchs von Nutzfahrzeugen wie Lastkraftwagen ein viel diskutiertes Thema. Eine vielversprechende Technologie zur Erzielung einer solchen Einsparung ist der Organic Rankine Cycle (ORC). Mittels eines ORCs kann die Energie des heißen Abgases, die den Verbrennungsmotor zurzeit ohne weitere Verwendung verlässt, in nutzbare mechanische Energie umgewandelt werden. Die gewonnene mechanische Energie unterstützt den Verbrennungsmotor und führt dadurch zu einem verringerten Kraftstoffverbrauch. Allerdings zeigen ORCs in Lastkraftwagen nur eine recht geringe Kapazität und Effizienz. Aus diesem Grund ist die Wahl des eingesetzten Arbeitsmittels entscheidend für die Wirtschaftlichkeit und die Umsetzung dieser Technologie. In einem Kooperationsprojekt mit dem Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen wird daher das integrierte Design von ORC-Prozessen und Arbeitsmittel für die Anwendung in Lastkraftwagen untersucht. Hierbei zeigt sich, dass der Einsatz von maßgeschneiderten Arbeitsmitteln bis zu 30 Prozent mehr Kraftstoff einspart als

das derzeit diskutierte Arbeitsmittel Ethanol. Der thermodynamische Fahrstuhl verbindet auf diese Weise die Forschung der „Molecular Science“ mit dem „Engineering“ und ermöglicht, maßgeschneiderte Prozesse in Energie- und Verfahrenstechnik zu entwerfen – vom Molekül bis zum Euro.

Literatur

- [1] T. Fink, H. Bruggesser, J.-L. Reymond, Virtual exploration of the small-molecule chemical universe below 160 Daltons, *Angewandte Chemie (Int. ed.)* 44 (10) (2005) 1504-1508.
- [2] C.S. Adjiman, A. Galindo, G. Jackson, Molecules matter: The expanding envelope of process design, in: *Proceedings of the 8th International Conference on Foundations of Computer-Aided Process Design*, Elsevier, Amsterdam, 2014, pp. 55-64.
- [3] P.T. Anastas, J.B. Zimmerman, Peer Reviewed: Design Through the 12 Principles of Green Engineering, *Environ. Sci. Technol.* 37 (5) (2003) 94A-101A.

[4] J. Scheffczyk, L. Fleitmann, A. Schwarz, M. Lampe, A. Bardow, K. Leonhard, COSMO-CAMD: A framework for optimization-based computer-aided molecular design using COSMO-RS, *Chem. Eng. Sci.* 159 (2017) 84-92.

[5] J. Schilling, D. Tillmanns, M. Lampe, M. Hopp, J. Gross, A. Bardow, From molecules to dollars: Integrating molecular design into thermoeconomic process design using consistent thermodynamic modeling, *Mol. Syst. Des. Eng.* 2 (3) (2017) 301-320.

Autoren

Univ.-Prof. Dr.-Ing. André Bardow ist Inhaber des Lehrstuhls für Technische Thermodynamik und Direktor am Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK-10) des Forschungszentrums Jülich.

Lorenz Fleitmann, Christoph Gertig, Johanna Kleinekorte, Jan Scheffczyk, Johannes Schilling und Dominik Tillmanns, alle M. Sc., sind wissenschaftliche Mitarbeiter am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik.

Anzeige

DISCOVER THE WORLD OF INFORM



Wir sind auf intelligente Software spezialisiert.
Sie hilft Unternehmen, optimierte Entscheidungen durch
die Echtzeitanalyse großer Datenmengen zu treffen.

Zur Verstärkung suchen wir (w/m)

Studentische Mitarbeiter

Informatik . Mathematik . Wirtschaftsingenieur

Softwareentwickler

C++ . Web/Java Script . C#

Junior Projektmanager / Berater



Ausführliche Informationen zu unseren Stellenangeboten
finden Sie unter www.inform-software.de/karriere

»ADVANCED OPTIMIZATION!«

»OPTIMIERT ENTSCHEIDEN!«

INFORM