

RWTH THEMEN

Forschungsmagazin

2/2023

Aachener Verfahrenstechnik

Inhalt

- 4 **Wege zu einer nachhaltigen Zukunft**
von Johannes M. M. Faust, Hanna Wolff, Alexander Mitsos
- 8 **Kohlenstoff im Kreislauf**
Bioökonomie als Schlüssel für Nachhaltigkeit und Wirtschaftlichkeit
von Alexander Echtermeyer, Andreas Jupke, Lukas Polte, Jörn Viell
- 12 **Das Kompetenzzentrum Industrielle Elektrochemie ELECTRA**
Nachhaltige elektrochemische Verfahren zur industriellen Reife führen
von Dana Kaubitzsch, Robert Keller, Anna K. Mechler, Florian Schwarz, Matthias Wessling
- 18 **Wegweiser Wasserstoff**
Herausforderungen und Perspektiven
von Christian Marcks, Anna K. Mechler, Raphael Seidenberg, Niklas Thissen, Florian Wiesner, Leonid Wolsky
- 26 **CO₂ statt Erdöl tanken?**
Kraftstoffe der Zukunft und wie sie zu finden sind:
Ein umfassender Ansatz
von Philipp Ackermann, Moritz Haas, Florian Schwarz, William von Westarp
- 32 **CO₂ als Chance**
Kohlenstoff aus Luft und Abgasströmen für den Alltag nutzbar machen
von Jochen Büchs, Carla Esch, Janik Hense, Christoph Kabatnik, Robert Keller, Robert Kiefel, Katharina Miebach, Benjamin Schick
- 38 **Erneuerbare Energien für die chemische Industrie**
Wie Stromverbrauch und erneuerbare Energiequellen synchronisiert werden können
von Kristina Baitalow, Jannik Lühje, Alexander Mitsos, Christian Schröder, Jan Schulze
- 42 **Rest- und Nebenströme zur Produktion von Plattformchemikalien**
Bioraffinerieprozesse im Rheinischen Revier
von Katharina Saur, Christina Krekel, Luca Grebe, Jordy Hofstede, Jörn Viell, Jochen Büchs, Andreas Jupke
- 48 **Recycling als Rohstoffquelle**
Die Entwicklung innovativer Trennverfahren ebnet den Weg zur Kreislaufwirtschaft
von Kerstin Brökelmann, Niclas Conen, Henning Gröschl, Kristina Mielke, Stephan Musholt, Josia Tonn

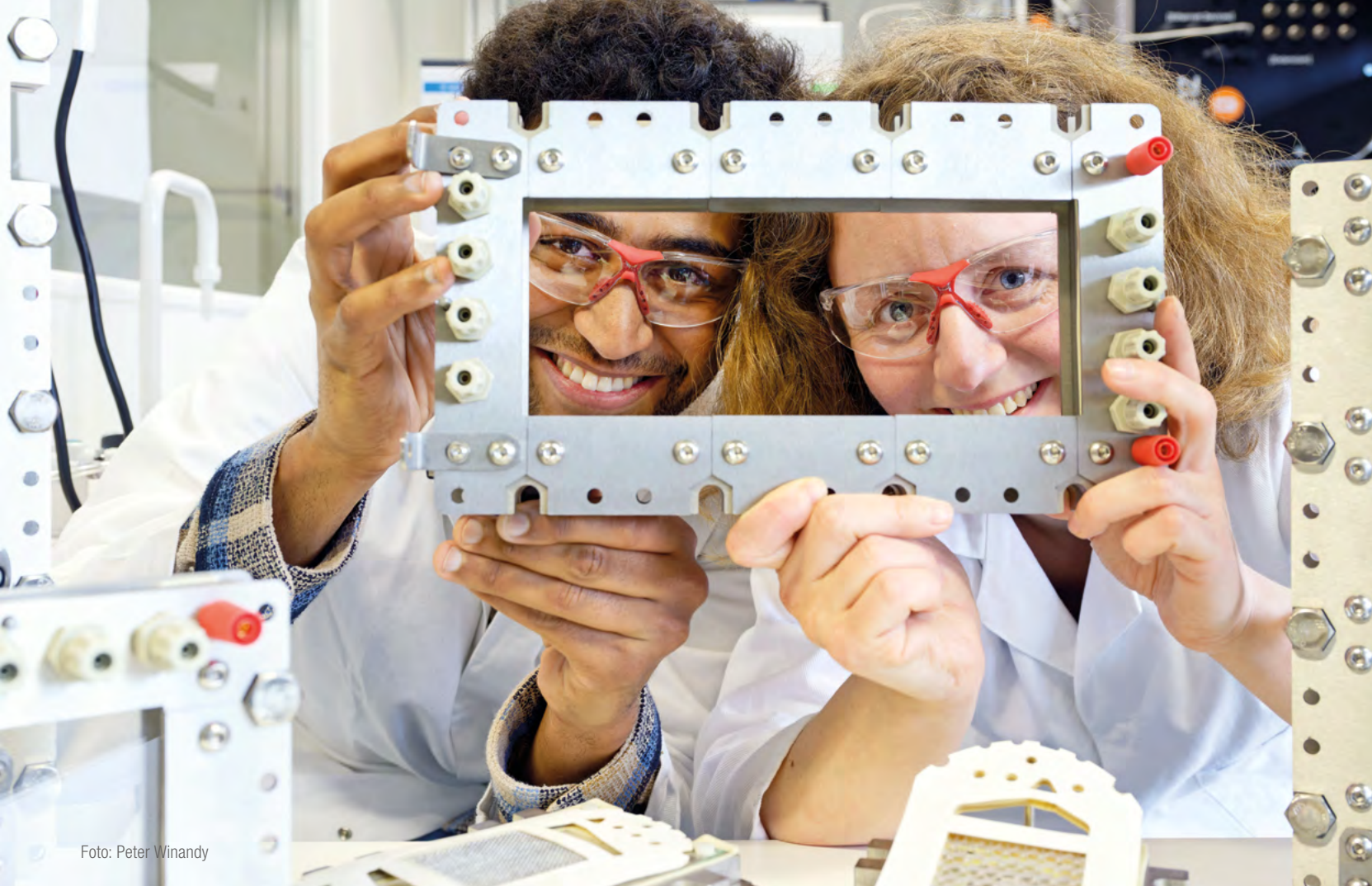


Foto: Peter Winandy

54 **Mit nachhaltigen Prozessen zu umweltfreundlichen Produkten**

Nachwachsende Rohstoffe und neue Prozesse zur Polymersynthese

von Tobias Harhues, Maik Tepper, Matthias Wessling

58 **Interdisziplinäre Forschung – das Erfolgsrezept zur Entwicklung nachhaltiger biobasierter Prozesse**

Technologien und Prozesse für die nachhaltige Bioökonomie
von Jochen Büchs, Max Dicke, Robert Dinger, Moritz Doeker,
Andreas Jupke, Robert Keller, Jørgen Magnus, Paul Richter

64 **Fokus Datenwissenschaften**

Maschinelles Lernen, Hybride Modellierung und Digitale Zwillinge als Forschungsschwerpunkte

von Manuel Dahmen, Eric von Lieres, Alexander Mitsos,
Katharina Nöh, Wolfgang Wiechert

68 **Sauberes Trinkwasser**

Neue Methoden der Wasseraufbereitung
von Christian Linnartz, Mojtaba Mohseni

74 **Verfahrenstechnische Methoden in der Medizin**

Verbesserung von Diagnosen und Therapien
von Robert Dinger, Mohammad El Wajeh, Franziska Hagemann,
Lukas Hirschwald, John Linkhorst, Sebastian Rauer

78 **Von der Forschung in die Wirtschaft**

Ausgründungen der Aachener Verfahrenstechnik
von Christian Linnartz, Johannes M. M. Faust

82 **Innovative Lehre für die Studierenden**

von Alexander Mitsos, Jan F. Pyschik, Anita Ziegler

Wege zu einer nachhaltigen Zukunft

Die Erderwärmung und der Klimawandel zwingen zum Umdenken. Nicht nur ein Umdenken eines jeden Einzelnen ist vonnöten, sondern auch in der Industrie, in der Rohstoffgewinnung und in den Herstellungsprozessen muss umgedacht werden. Defossilisierung, Bioökonomie, Kreislauf- und Wasserstoffwirtschaft gehören hier zu den großen aktuellen Themen. Auch die Trinkwasserversorgung sowie Digitalisierung und Modularisierung von Prozessen sind entscheidende Puzzlestücke für eine nachhaltige und stabile Welt. Die Verfahrenstechnik trägt entscheidend zur Lösung dieser Herausforderungen bei. Die Defossilisierung verlangt, dass Rohstoffe wie Kohle, Öl und Erdgas durch nachhaltige Alternativen, beispielsweise Wasserstoff und Biomasse, ersetzt werden. Im Sinne der Kreislaufwirtschaft sind diverse Reststoffe zukünftig eine wichtige Rohstoffquelle. Damit einhergehend ist die Entwicklung entsprechender Prozesse und Produkte unabdingbar: Basierend auf wirtschaftlich effizienten Plattformchemikalien können schließlich bekannte und noch zu entwickelnde chemische

Stoffe produziert werden. Die ungleiche Verfügbarkeit von nachwachsenden Rohstoffen über das Jahr verlangt flexible, modulare und skalierbare Prozesse. Diese Prozesse sind über alle Größenskalen hinweg zu entwickeln und zu optimieren. Die Digitalisierung von Prozess- und Produktentwicklung führt dabei schneller zu verwertbaren Ergebnissen. Mit Hilfe digitaler Zwillinge können Potenziale in bestehenden Prozessen erkannt und Lösungsvorschläge evaluiert werden. Die wichtigste Ressource für die Menschheit ist sauberes Trinkwasser. Wasser muss effizient genutzt werden und Aufreinigungsprozesse müssen die begrenzte Ressource effizient und sicher bereitstellen.

Aachener Verfahrenstechnik

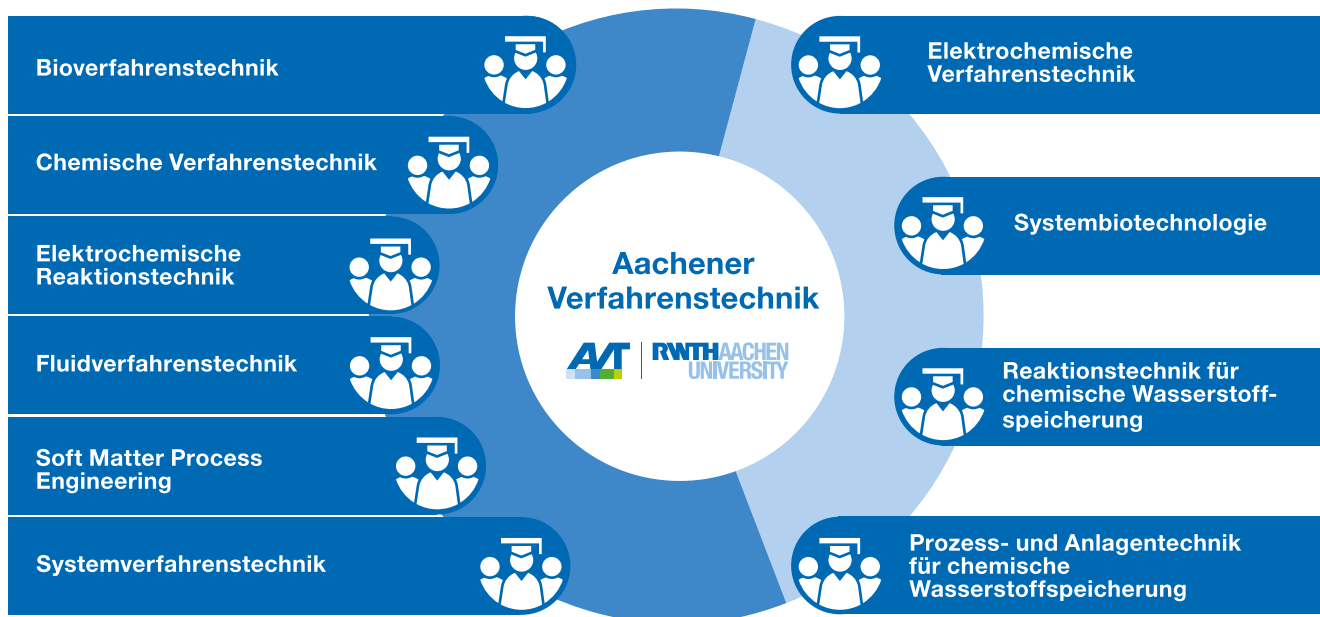
Die Aachener Verfahrenstechnik ist ein Verbund aus den Lehrstühlen für Bioverfahrenstechnik, Chemische Verfahrenstechnik, Elektrochemische Reaktionstechnik, Fluidverfahrenstechnik, Soft Matter Process Engineering und Systemverfahrenstechnik. Zusätzlich assoziiert sind aus dem Forschungszentrum

Jülich die Lehrstühle für Systembiotechnologie am Institut für Bio- und Geowissenschaften, Prozess- und Anlagentechnik für chemische Wasserstoffspeicherung sowie Reaktionstechnik für chemische Wasserstoffspeicherung am Institut für nachhaltige Wasserstoffwirtschaft und Elektrochemische Verfahrenstechnik am Institut für Energie- und Klimaforschung.

Entstanden ist der Verbund im Jahr 2007, um eine gemeinsame Forschungsprogrammatik zu entwickeln. Mit einem Forschungsgebäude sollte die Zusammenarbeit in den Bereichen von Forschung und Lehre vertieft werden. Das Gebäude „Center for Next Generation Processes and Products“, kurz NGP², wurde beantragt, gebaut und 2017 bezogen. Hervorzuheben ist dabei die gemeinsam genutzte Bioraffinerie. Hier wird erforscht, wie nachwachsende Biomasse industriell vielseitig nutzbar gemacht und in wertvolle Plattformchemikalien umgewandelt werden kann. Aktuell arbeiten im Gebäude NGP² knapp 200 wissenschaftliche und nicht-wissenschaftliche Angestellte sowie rund 400 Studierende.

Verbund aus RWTH Lehrstühlen

Assoziierte Lehrstühle Forschungszentrum Jülich



Die Aachener Verfahrenstechnik verfolgt weiterhin das Ziel, Nachhaltigkeit Wirklichkeit werden zu lassen. Einen Beitrag hierzu liefern nachhaltige Prozesse und Produkte. Mit engagierten Verfahrenstechnikerinnen und Verfahrenstechnikern, die technische Grundkenntnisse besitzen, mit modernen Werkzeugen umgehen können und Offenheit für unkonventionelle Methoden haben, lassen sich diese Probleme lösen.

Größenskalen und Entwicklung

Verfahrenstechnik ist vielseitig und findet auf allen Längenskalen statt: Vom Molekül über Mikroorganismen, von Mikrokanälen zu größeren Apparaten im Liter- und Kubikmetermaßstab bis hin zu Anlagen und Sektorenkopplung, sind alle Bereiche vorhanden. Die Aachener Verfahrenstechnik fokussiert die Skalen von der Nano- über die Micro- bis zur Mesoskala. In den Kompetenzzentren NGP² Bioraffinerie und ELECTRA wird der Technikumsmaßstab erforscht. Diese ermöglichen das „Tal des Todes“ der Technologieentwicklung zu überwinden. Vielversprechende Tech-

nologien scheitern häufig in der Skalierung und Implementierung aus dem Labormaßstab in den industriellen Maßstab. Probleme der Skalierung werden im Technikumsmaßstab sichtbar und können ressourcenschonend gelöst werden.

Interdisziplinarität

Interdisziplinarität ist ein Kennzeichen der Forschung der Aachener Verfahrenstechnik. Projekte werden oft in Kooperation mit natur- und ingenieurwissenschaftlich orientierten internen sowie externen Partnern aus Universitäten und Industrie bearbeitet. Die enge Zusammenarbeit der RWTH-Institute kommt insbesondere durch das Exzellenzcluster „The Fuel Science Center“ zum Ausdruck, in dem lehrstuhl- und fakultätsübergreifend gearbeitet wird. Wichtig ist allen Beteiligten, die Breite und Vielfalt der wissenschaftlichen und akademischen Arbeiten dabei nicht zu verlieren.

Die folgenden Texte geben einen Einblick in die Arbeitsgebiete der Aachener Verfahrenstechnik.

Autoren

Dr.-Ing. Johannes M. M. Faust war bis Juni 2023 Geschäftsführer der Aachener Verfahrenstechnik.

Dr.-Ing. Hanna Wolff war bis Ende 2022 Geschäftsführerin der Aachener Verfahrenstechnik.

Univ.-Prof. Alexander Mitsos, Ph.D., ist Inhaber des Lehrstuhls für Systemverfahrenstechnik und Sprecher der Aachener Verfahrenstechnik.

Aachener Verfahrenstechnik – The Way to a Sustainable Future

Global warming and climate change are forcing humanity to rethink. This requires a rethinking for everyone, especially a rethinking in industry in the use of raw materials and the manufacturing processes of goods. Defossilization, bioeconomy, circular economy and hydrogen economy are among the most important topics today. Furthermore, drinking water supply as well as digitization and modularization of processes are important pieces of the puzzle of a sustainably stable world. In order to solve global challenges, chemical engineering is essential. Defossilization requires that standard raw materials such as coal, oil and natural gas need to be replaced with sustainable alternatives. Hydrogen and biomass serve sustainable alternatives as examples. In the spirit of a circular economy, many current residue substances will be important raw materials in the future. As a result, it is essential to adapt to these new raw materials by developing new processes and products. New platform chemicals must be extracted from the raw materials in an economically efficient manner. New and known

chemical substances can then be produced from these platform chemicals. The availability of renewable raw materials is spread over the year and therefore requires flexible, modular and scalable processes. These new processes need to be developed and optimized across all scales. The digitization of process and product development helps to achieve practical results more quickly. By using digital twins, potentials in existing processes can be identified and proposed solutions can be evaluated.

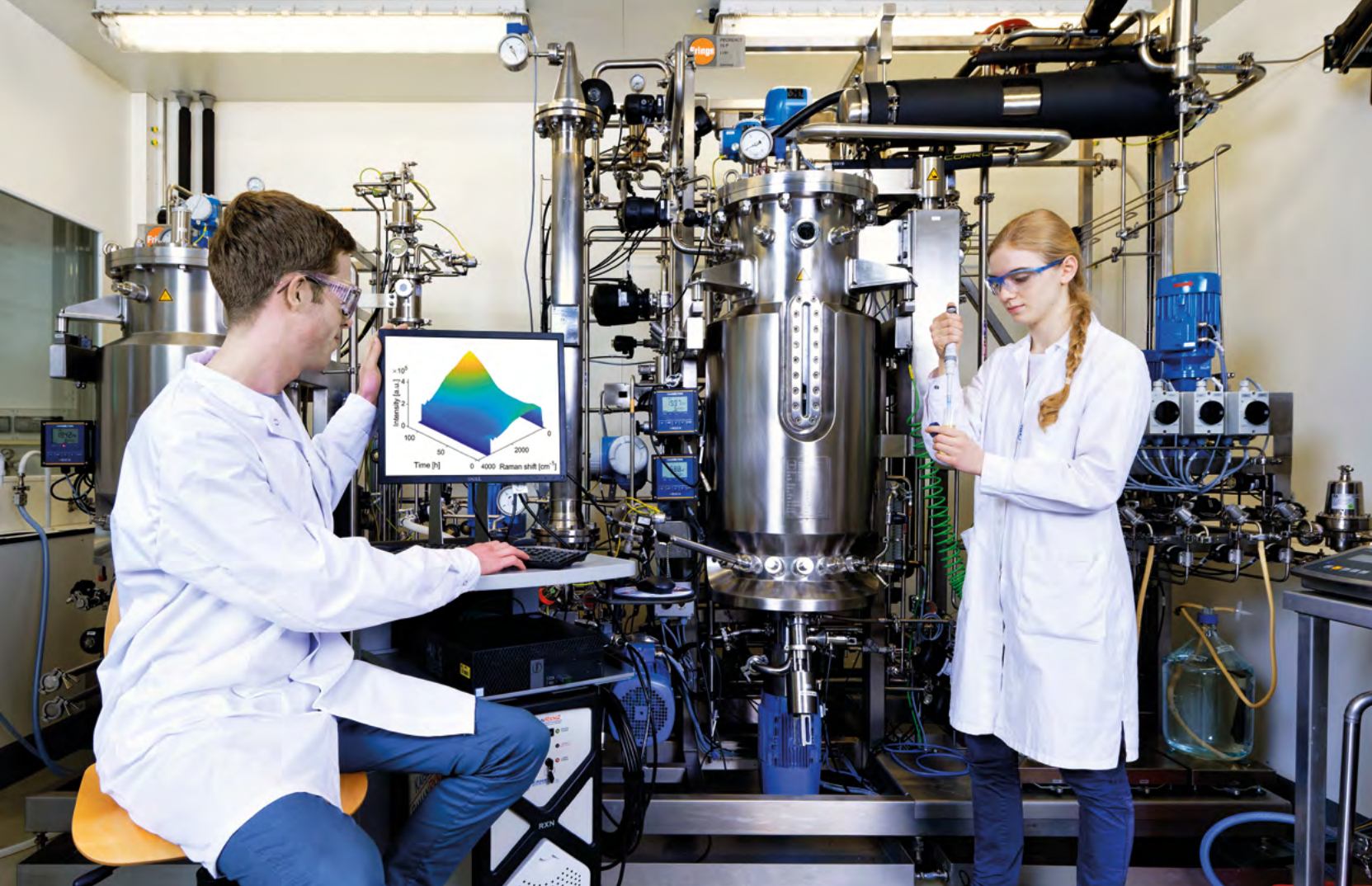
An important resource for humankind is clean drinking water. Due to the increasing world population, water resources must be used efficiently, and purification processes must be able to provide the limited resource of water efficiently and safely.

Aachener Verfahrenstechnik

Aachener Verfahrenstechnik is the network of chemical engineering chairs at RWTH Aachen University, consisting of the chairs for bioprocess engineering, chemical process engineering, electrochemical reaction engi-

neering, fluid process engineering, process systems engineering, and soft matter process engineering. In addition, the following chairs at Forschungszentrum Jülich are associated to Aachener Verfahrenstechnik: the chair for computational systems biotechnology at the institute for biosciences and earth sciences; the chair of process and plant engineering for chemical hydrogen storage and the chair of reaction engineering for chemical hydrogen Storage, both at the institute for sustainable hydrogen economy; and the chair of electrochemical process engineering at the institute of energy and climate research.

In 2007, the then five chairs merged to form Aachener Verfahrenstechnik with the aim of further deepening cooperation in research and teaching. Aachener Verfahrenstechnik moved into the new Next Generation Processes and Products (NGP²) research building in 2017, which was built with support from the federal and state governments. The jointly used biorefinery is particularly effective in pursuing the research question of how renewable woody biomass can be



Fermentation mit Online-Analytik durch Raman-Spektroskopie in der NGP² Bioraffinerie
 Foto: Peter Winandy

made industrially versatile and how it can be converted into valuable platform chemicals. Today, NGP² is home to almost 200 scientific and non-scientific employees and about 400 students. Chemical engineering continues to pursue the goal of making sustainability a reality. Sustainable processes and products contribute to mastering this social challenge. However, we can only solve these problems with dedicated chemical engineers who have solid basic technical knowledge, can exploit modern tools, and are open to unconventional methods.

Length scales and development

Chemical engineering is versatile and takes place at all length scales. From molecules to microorganisms, from microchannels to larger apparatuses in the liter and cubic meter scale, to systems and sector coupling, chemical engineering covers all areas. At Aachener Verfahrenstechnik, we look at the scales from the nano to the micro and meso scale. The pilot plant scale is being researched in our

Biorefinery and Electra Competence Centers. These facilities make it possible to overcome the so-called valley of death of technology development. In many cases, promising laboratory-scale technologies fail when scaled up and implemented on an industrial scale. Through research and development on a technical scale, processes can be further developed and difficulties for industrial use can be clarified at an early stage. Problems of upscaling become visible on a technical scale and can still be solved in a resourceefficient manner.

Interdisciplinarity

Research at Aachener Verfahrenstechnik often has an interdisciplinary character and projects are frequently carried out in collaboration with internal partners from both engineering and science as well as external partners from universities and industry. This close scientific cooperation between the various RWTH institutes is illustrated in particular by the “The Fuel Science Center” Cluster of Excellence, to which several RWTH chairs and

faculties contribute. However, it is particularly important for all participating chairs not to lose the breadth and diversity of their scientific and academic work. In the following articles, we provide a variety of insights into the wide range of research taking place at Aachener Verfahrenstechnik.

Authors

Dr.-Ing. Johannes M. M. Faust and Dr.-Ing. Hanna Wolff are former Managing Director of Aachener Verfahrenstechnik, Univ.-Prof. Alexander Mitsos, Ph.D., is Professor for Process Systems Engineering and spokesperson for Aachener Verfahrenstechnik.

Kohlenstoff im Kreislauf

Bioökonomie als Schlüssel für Nachhaltigkeit
und Wirtschaftlichkeit

The transition from a fossil-based chemical industry to a circular, sustainable bioeconomy is crucial for the sustainability of the economy. Carbon cycles must be established, i.e., by chemical utilization of biogenic raw and residual materials. At Aachener Verfahrenstechnik, this goal is pursued through integrated technology and process design up to the scale of the NGP²-Biorefinery. Here, innovative processes for the use of renewable carbon sources are demonstrated and improved at technical scale to realize a technology transfer between fundamental

research and industrial application. In various research projects, pretreatment and conversion of raw materials into platform chemicals such as carboxylic acids have been successfully demonstrated including separation and purification which paves the way towards a circular economy.

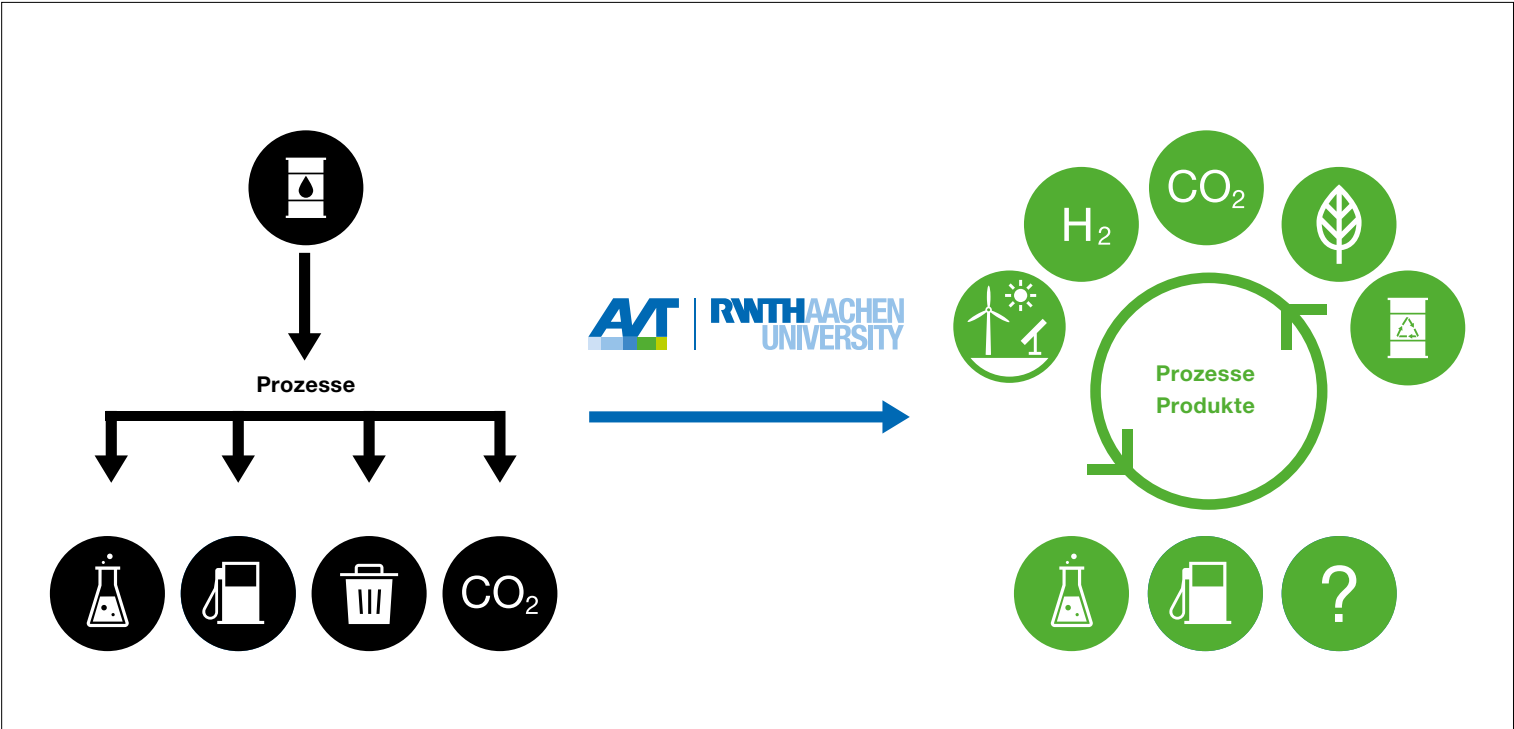


Bild 1: Zur Abkehr von fossilen Rohstoffen wird das integrierte Produkt- und Prozessdesign zur Entwicklung nachhaltiger Herstellungswege und neuer Produkte mit besseren Eigenschaften eingesetzt.

Der Wandel von einer erdölbasierten chemischen Industrie hin zu einer zirkulären, nachhaltigen Bioökonomie ist zentral für die Nachhaltigkeit zukünftiger Wirtschaftssysteme. Bei der Entwicklung neuer Wertschöpfungsketten sind neben der technischen Machbarkeit auch die Erneuerbarkeit der Rohstoff- und Energiequellen und die Rezyklierung aller Prozessströme und der Produkte bedeutend. In der Bioökonomie wird daher die ganzheitliche Defossilisierung von Stoffströmen in der chemischen Industrie angestrebt. Dadurch wird die Schließung von Kohlenstoffkreisläufen über die stoffliche Nutzung von CO₂ und biogenen Roh- und Reststoffen unter Einbindung erneuerbarer Energiequellen ermöglicht. Das Ziel ist somit die Realisierung regionaler, stofflicher und klimaneutraler Wertschöpfungsketten ohne Konkurrenz zur Nahrungsmittelproduktion. Die Aachener Verfahrenstechnik entwickelt dazu aus biogenen Ausgangsstoffen funktionale Produkte und berücksichtigt auch deren Recycling im integrierten Produkt- und Prozessdesign, siehe Bild 1. Als technologischen Meilenstein für diesen Wandel wird seit 2021 die Bioraffinerie im Center for Next Generation Processes and Products, kurz NGP², betrieben. Hier können aus nachwachsenden Rohstoffen chemische Produkte im Kilogrammmaßstab hergestellt werden. Dabei werden kleintechnisch kom-

plette Prozesse inklusive Rezyklierung von Lösungsmitteln und Hilfsstoffen demonstriert, sodass ein industrieller Scale-up möglich ist.

Technologie als Schlüsselement

Der Wandel der Chemieindustrie erfordert eine neue Verfahrenstechnik, wie am Beispiel nachwachsender Rohstoffe im Folgenden erläutert wird. Petrochemische Stoffströme sind energiereich und konzentriert, während nachwachsende Rohstoffe stückigen oder faserigen Charakter aufweisen und einen höheren Wasser- und Sauerstoffgehalt mit sich führen. Auch die Zusammensetzung ist anders, weshalb speziell die Vorbehandlungs- und Fraktionierungsschritte verändert werden müssen. Der Aufschluss dieser Rohstoffe ermöglicht den Zugang zu den Strukturpolymeren Lignin, Cellulose und Hemicellulose und ist der erste wichtige, aber auch komplexe, Schritt in der Verarbeitungskette. Neben Ausbeute und Qualität ist eine minimale Nebenproduktbildung Grundvoraussetzung für Reinheit und Effizienz in den nachfolgenden Prozessschritten. Damit einhergehend sind auch die weiteren Syntheserouten nicht übertragbar. Produkte der petrochemischen Verfahrenstechnik werden überwiegend in Gasphasenreaktionen oder in organischen Lösungsmitteln durch Refunktionalisierung hergestellt. Die konsti-

tuierenden Moleküle nachwachsender Rohstoffe sind jedoch schon höher funktionalisiert und somit chemisch wertvoller. Um die Funktionalität und damit die Syntheseleistung der Natur zu nutzen, müssen die Moleküle allerdings in fester oder flüssiger Form verarbeitet werden. Eine Verfahrenstechnik der Bioökonomie muss daher mit vergleichsweise geringen Konzentrationen komplexerer Moleküle in vorwiegend wässrigen Medien eine hohe Effizienz erreichen und neue Syntheserouten ermöglichen. Ebenso müssen Strategien für die Rohstoffverarbeitung mit größerer Variabilität in der molekularen Zusammensetzung aufgrund saisonaler Qualitätsunterschiede entwickelt werden. Die etablierten Anlagen im industriell-technischen Maßstab sind durch große Massenströme, eine geringe Ausstattung an Sensorik und eine hohe Spezialisierung auf gleichbleibende Rohstoffqualität gekennzeichnet. Insbesondere die Trenn- und Aufarbeitungstechnologien sind auf die molekularen Eigenschaften der üblicherweise flüchtigen Zwischenprodukte zugeschnitten. Dazu kommt, dass diese Anlagen zu immer größeren Kapazitäten optimiert wurden. Dies erschwert den Wandel zu einer regionalen, stofflichen und klimaneutralen Wertschöpfung in einer zirkulären Bioökonomie unter Nutzung von Roh- und Reststoffen mit stark schwanken-

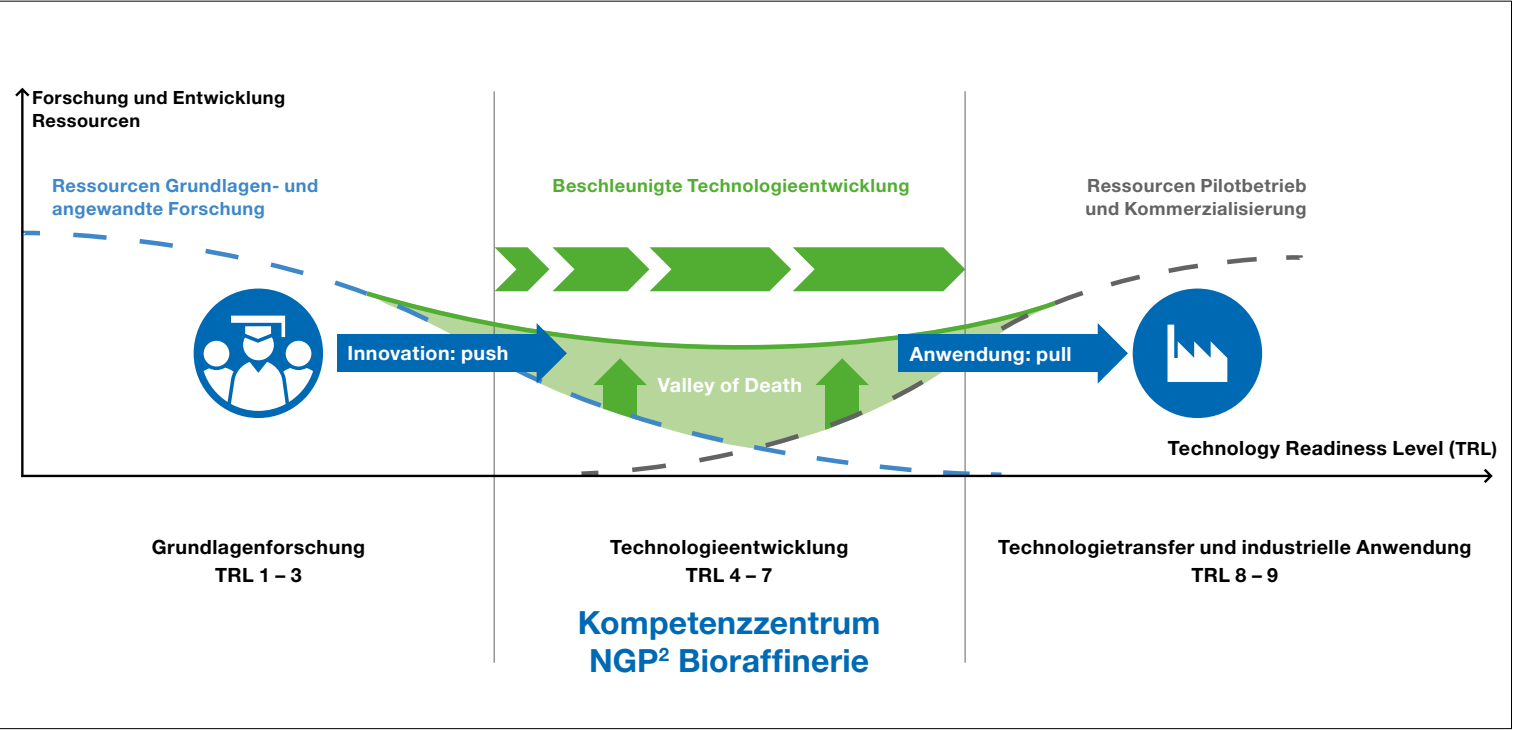


Bild 2: Technologieentwicklung und -übertragung zwischen Grundlagenforschung und industrieller Anwendung in der Bioraffinerie des Centers for Next Generation Processes and Products, NGP².

der Menge, Qualität und Zusammensetzung. Die entwickelten Konzepte und Methoden aus der Grundlagenforschung mit sogenanntem Technology Readiness Level (TRL) 1 bis 3 müssen daher einfacher im technisch relevanten Maßstab (TRL 4 bis 7) erprobt werden können, um letztlich den Sprung in die industrielle Anwendung (TRL 8 bis 9) zu ermöglichen. Die Aachener Verfahrenstechnik will mit der NGP² Bioraffinerie das sich ansonsten ergebende „Valley of Death“ zwischen TRL 4 bis 7 überwinden, siehe Bild 2.

Technische Demonstration

Die NGP² Bioraffinerie bietet vielfältige, apparative Möglichkeiten zur Umwandlung von Biomasse in Plattformchemikalien. Die stark heterogenen, biogenen Roh- und Reststoffströme werden in den Anlagen aufgeschlossen, anschließend chemisch oder biotechnologisch umgewandelt und mittels verschiedener Trennoperationen in (Zwischen)Produkte separiert, siehe Bild 3. Diese Prozesse schließen die verlustfreie Rückführung der eingesetzten Hilfsstoffe wie Lösungsmittel und Katalysatoren ein. Eine hohe Ausbeute und die Reduktion von Verunreinigungen sowie unerwünschte Nebenproduktbildungen und -ablagerungen können dabei erforscht beziehungsweise technologisch vermieden

werden. Weiterhin wird die stoffliche Zusammensetzung durch die verwendete Prozessanalytik möglichst direkt bestimmt, was ein Verständnis der Mechanismen und die Optimierung des Prozesses ermöglicht. Besonders wichtig sind die Mechanismen, die unter laborüblichen Bedingungen ohne Betrachtung von zurückgeführten Stoffströmen und Energie nicht nachvollzogen werden können. Die Wertschöpfung geschieht indessen erst durch die stoffliche Umwandlung zu Chemikalien. Dabei sind jene Chemikalien interessant, die vielfältig weiterverarbeitet werden können. Diese sogenannten Plattformchemikalien umfassen vor allem Carboxylsäuren, Alkohole, Ketone, biogene Öle und Fette, sowie Furane. Der technisch relevante Maßstab der NGP² Bioraffinerie liefert einerseits diese Chemikalien im Kilogrammmaßstab und andererseits Forschungs- und Entwicklungsergebnisse zu innovativen Apparaten, integrierten Prozesskonzepten und neuen Technologien zur stofflichen Separation, um trotz variabler Ausgangsmaterialien gleichbleibende Produktqualitäten zu gewährleisten.

Beispiele einer Kreislaufwirtschaft

Der zirkuläre Ansatz wurde kürzlich in Teilprojekten des Innovationscluster Integrierte Bioraffinerie „BioRevierPLUS“ als Teil des

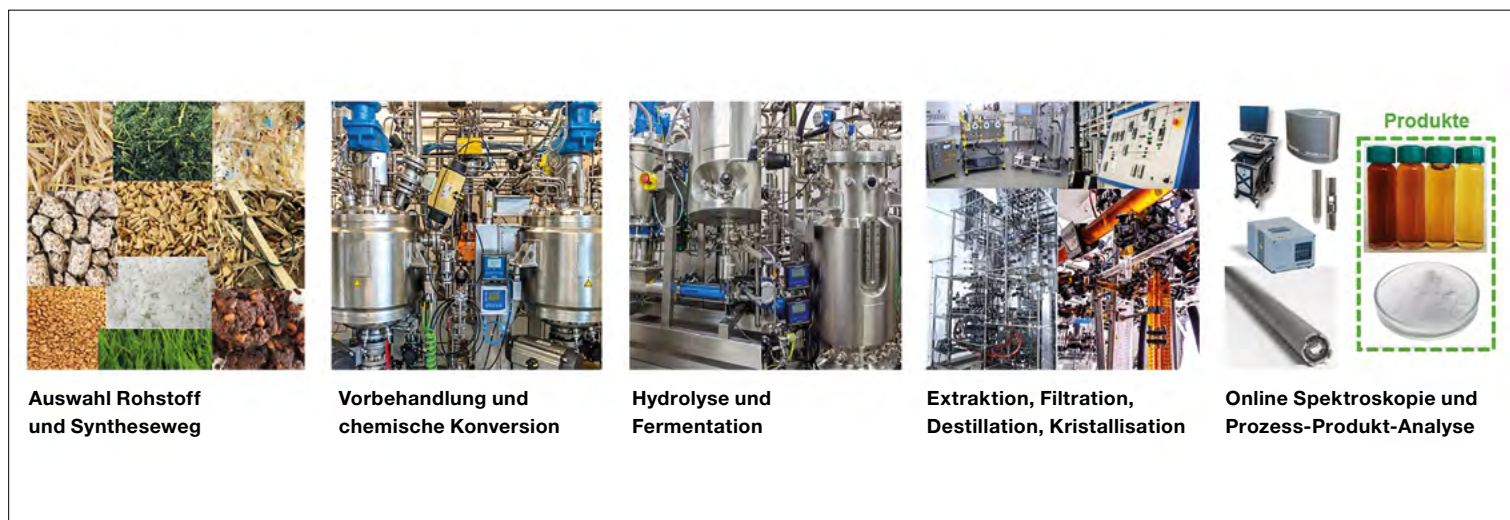


Bild 3: Technologieentwicklung, -skalierung und -erprobung in technisch relevantem Maßstab der Bioraffinerie des Centers for Next Generation Processes and Products, NGP².

Strukturwandels im Rheinischen Revier demonstriert. Die Untersuchung und die Evaluierung von Reststoffen aus der Papier- und der Lebensmittelindustrie führte zu ersten Konzepten für die Herstellung von Chemikalien aus regionalen Roh- und Reststoffen. Plattformchemikalien wie Itakonsäure wurden dabei im Kilogrammmaßstab bei hoher Reinheit hergestellt, was die Möglichkeiten der Wertschöpfung durch diese Plattformchemikalien aufzeigt.

Das Forschungsprojekt „GreenSolRes – Demonstration of solvent and resin production from lignocellulosic biomass via the platform chemical levulinic acid“, finanziert durch die Europäische Union, ist ein weiteres Beispiel für die Technologie- und Prozessentwicklung einer biobasierten Plattformchemikalie. Lignocellulosehaltige Biomasse wird in einem robusten und umweltfreundlichen Verfahren in die Plattformchemikalie Lävulinsäure umgewandelt, welche anschließend zu γ -Valerolacton, 1-Methyl-1,4-Butandiol und 2-Methyltetrahydrofuran konvertiert werden kann. Diese Intermediate werden als Lösungsmittel oder als Bausteine in verschiedenen Polymeren wie Polyurethanen, Polyestern und Polyethern verwendet. Die Komplexität des heterogenen Ausgangsmaterials zeigte sich vor allem bei der Pro-

zessentwicklung. Zum einen steht eine möglichst hohe Ausbeute und Konzentration der Lävulinsäure im Vordergrund. Gleichzeitig müssen aber die Reaktionsbedingungen so gewählt werden, dass die Bildung der zahlreichen Nebenprodukte reduziert und die Selektivität zur Lävulinsäure maximiert wird. Dies kann allerdings nur in Verbindung mit der Weiterverarbeitung untersucht werden. Besonders herausfordernd in der Aufarbeitung ist die geringe Konzentration im Produktstrom und die große Bandbreite an vorliegenden Nebenkomponten. Mit dem realen Produktgemisch konnten maßgeschneiderte Trennsequenzen für den Katalysator, das Abtrennen der Nebenkomponten und die Separation der Lävulinsäure entwickelt werden. Die zu erreichende Reinheit wurde vom nachfolgenden Syntheseschritt bestimmt, für den ausreichende Mengen produziert und bereitgestellt wurden, um den Einfluss Reinheit experimentell zu untersuchen. Neben der Evaluierung der Prozessrouten werden bei Versuchen im technischen Maßstab essenzielle Erkenntnisse über die Rohstoffförderung, Werkstoffauswahl und Prozesstechnologie gewonnen. Die gemessenen Prozessparameter unterstützen den Scale-up in den industriellen Maßstab. Durch den erfolgreichen Transfer konnte ein Gesamtpro-

zess zur Herstellung von Lävulinsäure als biobasierte Plattformchemikalie entwickelt werden, welcher ökonomisch und ökologisch großes Potenzial zur Defossilisierung der chemischen Industrie als Teil der Kreislaufwirtschaft aufweist.

Autoren

Dr.-Ing. Alexander Echtermeyer ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik.

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Jupke ist Inhaber des Lehrstuhls für Fluidverfahrenstechnik.

Lukas Polte, M.Sc., ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik.

Dr.-Ing. Jörn Viell ist Gruppenleiter am Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik und Geschäftsführer der NGP² Bioraffinerie.

Das Kompetenzzentrum Industrielle Elektrochemie ELECTRA

Nachhaltige elektrochemische Verfahren zur industriellen Reife führen

Increasing global temperatures and the consequences of climate change urge the transition from fossil to renewable resources. A transformation towards an energy system based on renewables such as wind and solar offers great opportunities but also challenges for the chemical industry:

Electrochemical processes, which drive chemical reactions with the electric potential as a driving force, can replace thermochemical processes, which rely on heat supplied by fossil resources. Additionally, electrochemical processes offer high flexibility and can contribute to buffer fluctuations in the electrical grid caused by increasing renewable power generation.

However, many electrochemical conversions are still in their infancy and are not scaled to industrial maturity. The Competence Center Industrial Electrochemistry – ELECTRA – offers exquisite technical infrastructure to boost the development of electrodes, membrane electrode assemblies, and entire

electrochemical cells. The Center acts as a catalyst, accelerating scientific breakthroughs at relevant scale and providing a foundation for the development of the next generation of electrochemical processes.

Die deutsche Energiewirtschaft basiert auf fossilen Rohstoffen, welche bei der Energieerzeugung das Treibhausgas Kohlenstoffdioxid (CO_2) freisetzen. Im Kampf gegen den Klimawandel werden erneuerbare Ressourcen als CO_2 -neutrale Energiequelle erschlossen. Diese Umstellung der Energiegewinnung leitet einen fundamentalen Wandel für die chemische Industrie ein. Als Triebkraft chemischer Reaktionen in etablierten Prozessen wird häufig eine erhöhte Temperatur oder ein erhöhter Druck eingesetzt. Die Energie hierfür wird über die heißen Abgase fossiler Kraftwerke bereitgestellt. In Fotovoltaik- und Windkraftanlagen fallen keine heißen Abwärmeströme mehr an, sondern ausschließlich elektrischer Strom. Dieser kann direkt für chemische Reaktionen genutzt werden: Elektrische Spannung ersetzt als Triebkraft Druck und Temperatur. Dadurch werden elektrochemische Verfahren zu einer eleganten Alternative zu den bisherigen Prozessen. Die damit häufig milderen Reaktionsbedingungen



Bild 1: Mit Hilfe einer Breitschlitzdüse werden Membran-Elektroden-Einheiten mittels skalierbarer Technologie gefertigt.

Foto: Peter Winandy

versprechen großes Potenzial in der chemischen Industrie. Die effektive Skalierung elektrochemischer Prozesse sieht man aktuell am Beispiel der Wasserelektrolyse.

Die Renaissance der Elektrochemie

Obwohl die Anfänge elektrochemischer Verfahren auf das Ende des 19. Jahrhunderts zurückgehen, haben nur wenige Technologien den Durchbruch in die industrielle Nutzung geschafft. Einer der bedeutendsten industriellen elektrochemischen Prozesse ist heute die Chlor-Alkali-Elektrolyse, bei der Chlor und Natronlauge aus Salzwasser gewonnen werden.

In den letzten Jahrzehnten wurde die Erforschung von elektrochemischen Verfahren durch thermisch getriebene Verfahren überschattet, was auf der guten Verfügbarkeit von fossilen Rohstoffen beruhte. Ein Beispiel ist das Haber-Bosch-Verfahren, mit dem Ammoniak hergestellt wird, die Grundlage für moderne Dünger. Die Synthese erfolgt aus

den Elementen Stickstoff und Wasserstoff bei hohen Temperaturen und hohem Druck.

Im 20. Jahrhundert wurden kaum weitere elektrochemische Verfahren zur industriellen Nutzung entwickelt. Doch diese werden durch die Umstellung von fossilen Rohstoffen auf regenerativen Strom immer wichtiger. Aktuell wird daher mit hoher Intensität Grundlagenforschung an elektrochemischen Verfahren betrieben, welche zur Defossilisierung und Elektrifizierung der chemischen Industrie beitragen. Damit die vielfältigen elektrochemischen Technologien von der Grundlagenforschung in die industrielle Anwendung überführt werden können, wurde das Kompetenzzentrum Industrielle Elektrochemie ELECTRA gegründet. Hier gibt es die technischen Möglichkeiten elektrochemische Verfahren in unterschiedlichen Skalen zu entwickeln. ELECTRA bietet zehn begehbare Abzüge, die vollautomatisierbare Versuchsstände mit Messtechnik beinhalten. Für die Sicherheit sorgt eine Gaswarnanlage, die das Arbeiten

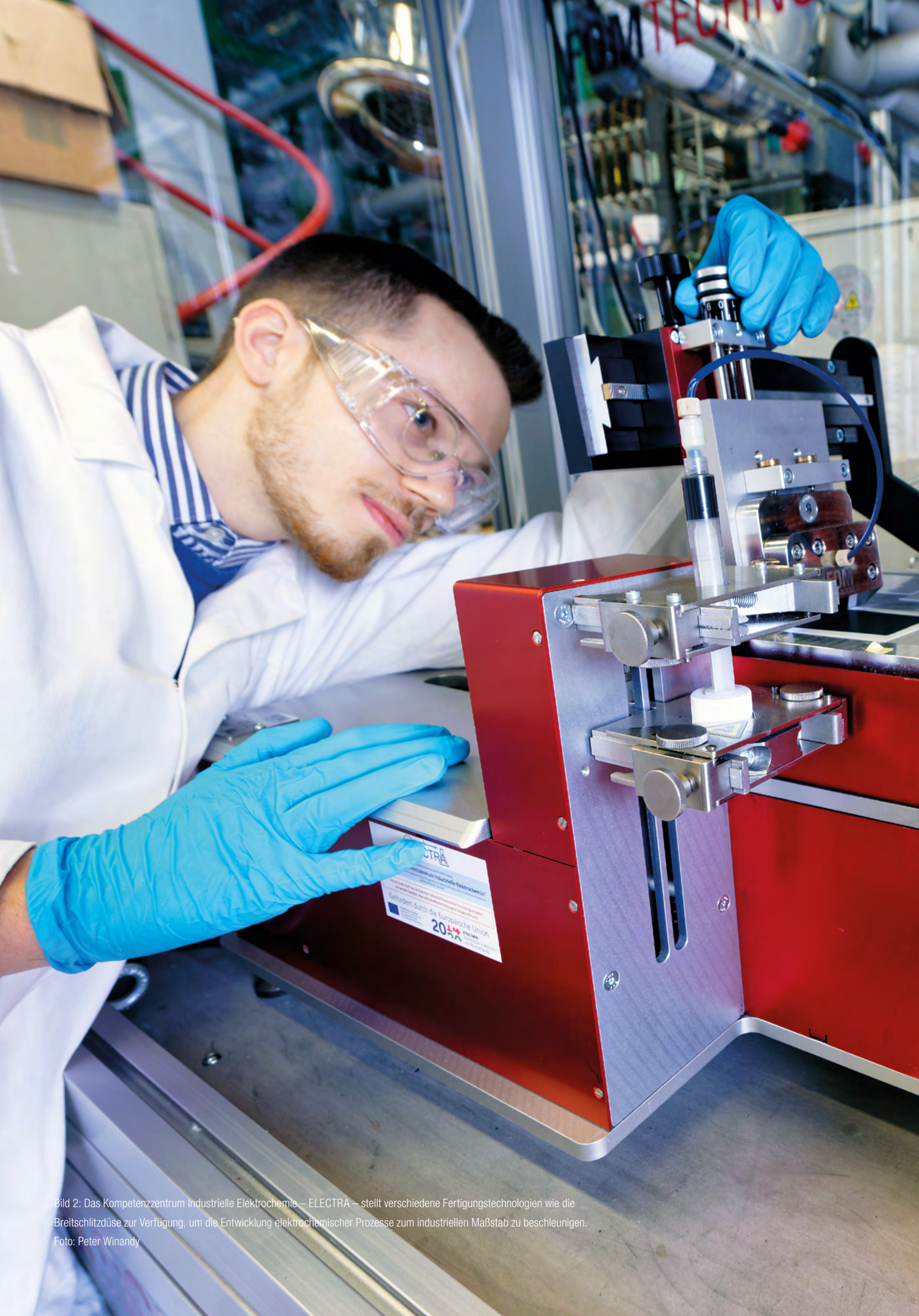


Bild 2: Das Kompetenzzentrum Industrielle Elektrochemie – ELECTRA – stellt verschiedene Fertigungstechnologien wie die Breitschlitzdüse zur Verfügung, um die Entwicklung elektrochemischer Prozesse zum industriellen Maßstab zu beschleunigen.
Foto: Peter Winandy



mit giftigen und explosiven Gasen, wie zum Beispiel Kohlenstoffmonoxid und Wasserstoff ermöglicht. Auch steht skalierbare Infrastruktur zur Herstellung und Entwicklung von Elektroden, Membranen und elektrochemischen Zellen bereit. In ELECTRA sind damit Technologien vorhanden, die für eine erfolgreiche Energiewende benötigt werden. Häufig scheitern die Technologien an der Skalierung vom Labor- in den Industriemaßstab. Diese Problematik der Skalierung wird auch als „Valley of Death“ bezeichnet. In ELECTRA können frühzeitig Probleme in der Skalierung elektrochemischer Verfahren erkannt und gelöst werden. Dieselben Fragestellungen für biomassebasierte Prozesse werden im Kompetenzzentrum NGP² Bioraffinerie untersucht.

Zwei Standorte mit komplementärer Expertise

Ermöglicht wurde der Aufbau des Kompetenzzentrums ELECTRA durch Fördermittel aus Europäischen Fonds für regionale Entwicklung und des Landes Nordrhein-Westfalen. Diese Fördermittel wurden gemeinsam von dem Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik der RWTH Aachen und dem Institut für Energie- und Klimaforschung – Grundlagen der Elektrochemie am Forschungszentrum Jülich beantragt. Um die Vernetzung wei-

ter zu stärken, wurde über die Jülich Aachen Research Alliance, kurz JARA, die Professur Elektrochemische Reaktionstechnik eingerichtet. Die Expertisen der Partner beinhalten unter anderem die Entwicklung neuer Zellkomponenten (Membranen, Elektroden), adaptive Zelldesigns, elektrochemische Verfahrensentwicklung und In-operando-Analytik.

Im folgenden werden einige Drittmittelprojekte vorgestellt, die mit der ELECTRA Infrastruktur ermöglicht wurden.

Die elektrochemische Zelle

Das Herzstück elektrochemischer Verfahren sind die Zellen, in denen die chemischen Reaktionen stattfinden. Um die Brücke vom Labor zum Technikum und der Industrie zu schlagen, müssen mehrere Skalen der Zellgröße durchschritten werden. Der Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik entwickelte das modulare, skalierbare und adaptive Zellkonzept Flex-X-Cell. Hiermit kann nun erstmals in einem einzigen Design eine Skalierung von 2,5 bis 300 cm² erfolgen, ohne die Zellarchitektur zu wechseln. Weiterhin lässt das modulare Design den Betrieb der Zelle in unterschiedlichen Konfigurationen zu: Manche Reaktionen finden ausschließlich in flüssiger Phase statt, andere in Gas- und Flüssigphase. Durch den Einsatz von moder-

nen Fertigungsmethoden wie additiver Fertigung („3D-Druck“), kann mit hoher Adaptivität auf neue Anforderungen reagiert und Prototypen der nächsten Generation können gefertigt werden. Das breite Einsatzgebiet der Flex-X-Cell in unterschiedlichen Forschungsprojekten ermöglicht es, Erkenntnisse auf Zellebene für viele Nutzer zugänglich zu machen und somit die Entwicklung der elektrochemischen Verfahren zu beschleunigen.

Power-to-X

In Zukunft sollen CO₂-Emissionen weitgehend vermieden werden. Mit elektrochemischen Verfahren lässt sich das Gas hingegen zu wichtigen Basischemikalien wie Kohlenstoffmonoxid oder Ethylen umwandeln und der Kohlenstoffkreislauf schließen.

Im Rahmen der vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Projekte iNEW und iNEW2.0 werden elektrochemische Verfahren entwickelt, wie beispielsweise die Umwandlung von CO₂ in nutzbare Moleküle wie Synthesegas, Ethylen oder funktionale Kohlenstoffmoleküle. Außerdem werden auch innovative Prozesse wie die Elektrifizierung des Haber-Bosch-Prozesses für die Herstellung von Ammoniak untersucht. Im Kopernikus-Projekt „Power-to-X“ erforscht der Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik den Einfluss der Ionentauschermembran auf elektrochemische Prozesse. Auch diese

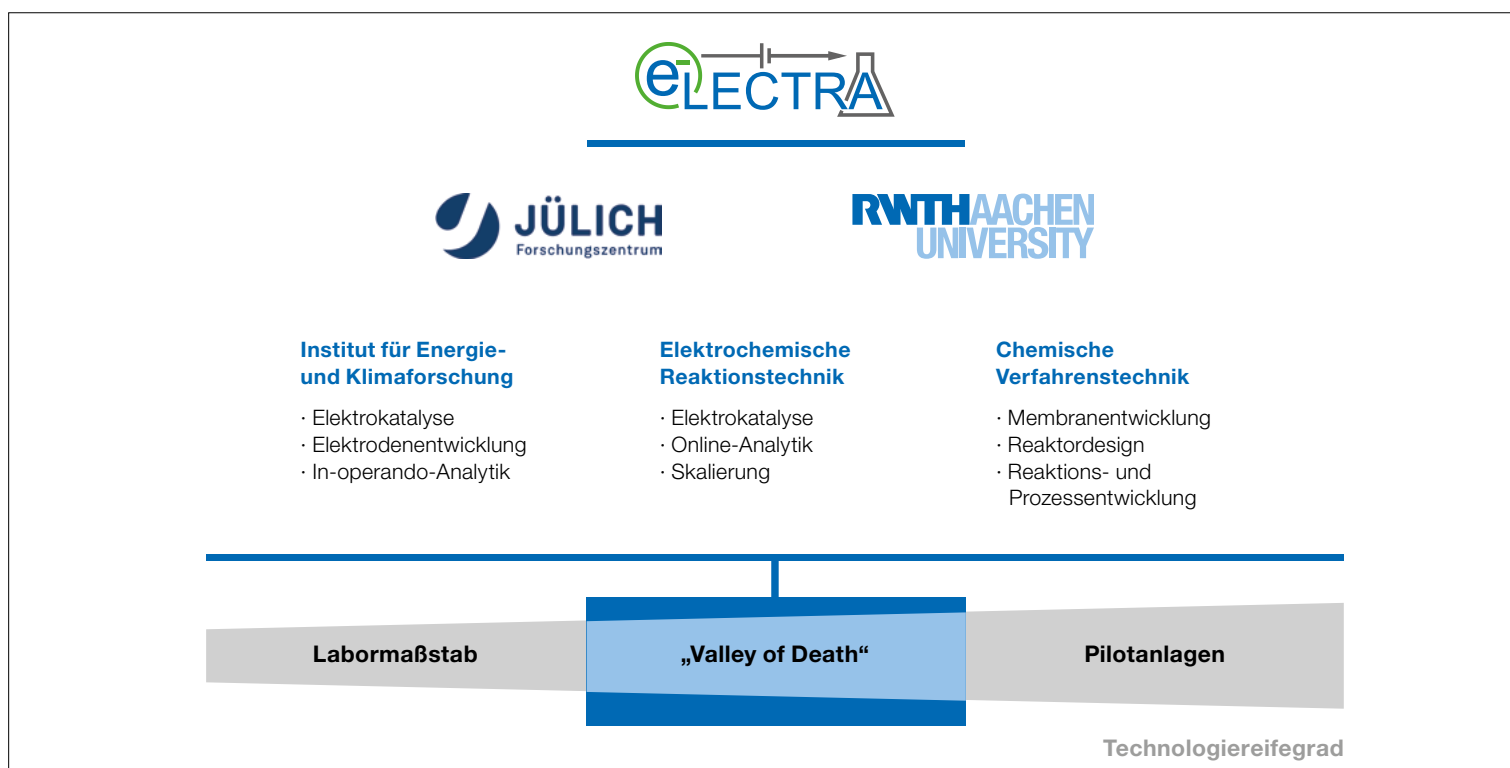


Bild 3: Kompetenzen der ELECTRA Partner

Arbeiten werden durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung finanziert. Die Membranen ermöglichen das Wandern von Ionen, den molekularen Ladungsträgern, zwischen den Elektroden der elektrochemischen Zelle. Ionentauschermembranen können so maßgeschneidert werden, dass sie selektiv bestimmte Ionen passieren lassen, andere jedoch zurückhalten. Dadurch wird der elektrochemische Prozess beeinflusst. Es gibt drei Haupttypen von Ionentauschermembranen, die Kationentauscher-, Anionentauscher- und Bipolarmembranen. Am besten erforscht sind Kationentauschermembranen, die bereits vielfach industrielle Anwendung finden. Anionentauscher- und Bipolarmembranen können die Energieeffizienz des Prozesses steigern oder lassen auch den Einsatz günstiger Elektrodenmaterialien zu. Im Projekt werden elektrochemische Zellen mit unterschiedlichen Membranen und Elektroden entwickelt und betrieben. Die Erkenntnisse werden in Prozessmodelle und Simulationen überführt, um den Einfluss auf Zellebene im gesamten Prozess, von Ausgangsstoff zu Produkt, sichtbar zu machen. Mit diesem Wissen soll das Kohlenstoffdioxid-Recycling großtechnisch verfügbar gemacht werden.

SynErgie

Mit der Energiewende gewinnen regenerative Stromerzeugungsverfahren wie Fotovol-

taik und Windkraft stetig an Bedeutung. Da Sonne und Wind im Tages- und Jahresverlauf schwanken, fluktuiert dadurch die Verfügbarkeit von Strom. Elektrochemische Verfahren können auf zwei Wegen helfen, diese Fluktuationen abzufangen. Erstens kann der verwendete Strom flexibel variiert werden, so dass bei hoher Verfügbarkeit viel und bei niedriger Verfügbarkeit wenig Produkt hergestellt wird. Insbesondere die Wasserelektrolyse zeigt hier ein großes Potenzial. Zweitens können elektrochemische Reaktionen „schaltbar“ entwickelt werden. In Abhängigkeit der Stromverfügbarkeit kann die ablaufende chemische Reaktion geschaltet werden.

In der modernen Chlor-Alkali-Elektrolyse wird an der Kathode Natronlauge und an der Anode Chlor produziert. Im Rahmen des Projektes „SynErgie“ stellte der Projektpartner Covestro Deutschland AG modifizierte „schaltbare“ Kathoden zur Verfügung. Diese neuen Kathoden können nicht nur Natronlauge, sondern Wasserstoff als zweites Wertprodukt herstellen. Durch geschickte Wahl der Prozessbedingungen wird mit wenig Energieeinsatz nur Natronlauge produziert. Ist Strom günstig verfügbar, können die Bedingungen so angepasst werden, dass sowohl Natronlauge als auch Wasserstoff entstehen. Solche schaltbaren elektrochemischen Prozesse haben besondere Anforder-

ungen an die verwendeten Materialien und die Prozesssicherheit, welche im Rahmen von ELECTRA entsprechend entwickelt werden.

Autoren

Dr.-Ing. Dana Kaubitzsch und Florian Schwarz, M.Sc. sind wissenschaftliche Mitarbeitende am Lehr- und Forschungsgebiet Elektrochemische Reaktionstechnik. Dr.-Ing. Robert Keller ist Oberingenieur am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik. Univ.-Prof. Dr.rer.nat. Anna K. Mechler leitet das Lehr- und Forschungsgebiet Elektrochemische Reaktionstechnik. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Matthias Wessling ist Inhaber des Lehrstuhls für Chemische Verfahrenstechnik und in der wissenschaftlichen Leitung des DWI – Leibniz-Instituts für Interaktive Materialien in Aachen.

Christian Marcks, Anna K. Mechler, Raphael Seidenberg, Niklas Thissen, Florian Wiesner, Leonid Wolsky

Wegweiser Wasserstoff

Herausforderungen und Perspektiven

Hydrogen is considered one of the most promising alternatives to replace fossil fuels such as natural gas, coal and oil in the long term. This is made possible by first storing electrical energy from renewable sources in hydrogen as chemical energy and then releasing it at any point in time. However, there are still some challenges to a global climate-neutral hydrogen economy. For example, costly electrolyzers continue to inhibit scalable, green hydrogen production. The still relatively small hydrogen infrastructure is also a significant hurdle. Finally, consumer sectors such as industry, heating and mobility need to be prepared for a potential hydrogen economy by making key technologies such as fuel cells more efficient and cost-effective. Current research is taking place in the areas of production, distribution and utilisation of hydrogen.

Wasserstoff gilt als eine der aussichtsreichsten Alternativen, um fossile Energieträger wie Erdgas, Kohle und Erdöl langfristig zu ersetzen. Möglich wird dies, indem elektrische Energie aus nachhaltigen Quellen zunächst im Wasserstoff als chemische Energie gespeichert und dann zu einem beliebigen Zeitpunkt wieder freigesetzt wird. Für eine globale klimaneutrale Wasserstoffwirtschaft gibt es jedoch noch einige Herausforderungen. So hemmen kostspielige Elektrolyseure weiterhin die skalierbare, grüne Wasserstoffherstellung. Auch ist die bislang überschaubare Infrastruktur für Wasserstoff eine signifikante Hürde. Zuletzt müssen auch die Verbrauchssektoren, wie der Industrie-, der Wärme- und der Mobilitätssektor auf eine potenzielle Wasserstoffwirtschaft vorbereitet werden, indem Schlüsseltechnologien wie die Brennstoffzelle effizienter und kostengüns-

tiger hergestellt werden. Maßgeblich findet aktuelle Forschung in den Bereichen der Herstellung, der Verteilung und der Nutzung von Wasserstoff statt.

Herstellung

Einen aussichtsreichen Ansatz für die Herstellung von Wasserstoff im Großmaßstab bietet die Wasserelektrolyse. Hierbei wird Wasser mithilfe von Strom in seine Bestandteile Wasserstoff und Sauerstoff zerlegt. Stammt dieser Strom aus erneuerbaren Quellen, spricht man von grünem Wasserstoff. Zurzeit werden maßgeblich zwei Technologien zur Gewinnung von grünem Wasserstoff eingesetzt, die alkalische und die Polymerelektrolytmembran (PEM)-Elektrolyse. Letztere bietet konkrete Vorteile im Hinblick auf Effizienz, Flexibilität und Kompaktheit, allerdings ist die Skalierbarkeit der Technologie stark beschränkt





Bild 1: Mithilfe eines 3D-Druckers, der das „Selective Laser Melting“ Verfahren nutzt, können komplexe und neuartige Elektroden aus Edelstahl, Kupfer oder Nickel hergestellt werden.
Foto: Peter Winandy

durch den bislang unumgänglichen Einsatz seltener Edelmetalle, wie Iridium und Platin. Aus diesem Grund bleibt die klassische alkalische Wasserelektrolyse weiterhin eine interessante Technologie. Sie ist eine seit fast einem Jahrhundert entwickelte Methode, welche zur industriellen Herstellung von Wasserstoff genutzt werden kann. Grundsätzlich werden zwei Elektroden, die Anode und die Kathode, in eine hochkonzentrierte Lauge, den Elektrolyt, getaucht und mittels einer porösen Schicht getrennt. Zwischen den Elektroden wird eine Spannung angelegt, wodurch an der Anode Sauerstoff und an der Kathode Wasserstoff entsteht. Der Elektrolyt sorgt dafür, dass ein Ladungsausgleich zwischen den beiden Elektroden stattfinden kann. Einer der Vorteile sind die geringen Investitionskosten und die dadurch gute Skalierbarkeit, da keine teuren Edelmetalle benö-

tigt werden. Verbesserungspotenzial besteht weiterhin beim Wirkungsgrad, da etwa ein Drittel der elektrischen Energie nicht in Form von Wasserstoff gespeichert wird. Hier setzt die Forschung des Lehr- und Forschungsgebiets Elektrochemische Reaktionstechnik an und entwickelt effiziente Elektrodenmaterialien, um den Wirkungsgrad der alkalischen Wasserelektrolyse zu erhöhen. Häufig werden im Labormaßstab effiziente Elektroden entwickelt, die jedoch nie den Weg in die Industrie finden. Das liegt unter anderem daran, dass die im Labor vorhandenen Versuchsparameter und die daraus gezogenen Rückschlüsse oft nicht auf größere Maßstäbe übertragen werden können. Das Projekt PrometH₂eus (angesiedelt im Leitprojekt H₂Giga) widmet sich diesem Problem. Hier sollen hocheffiziente Elektroden entwickelt werden, welche bereits im Labor unter

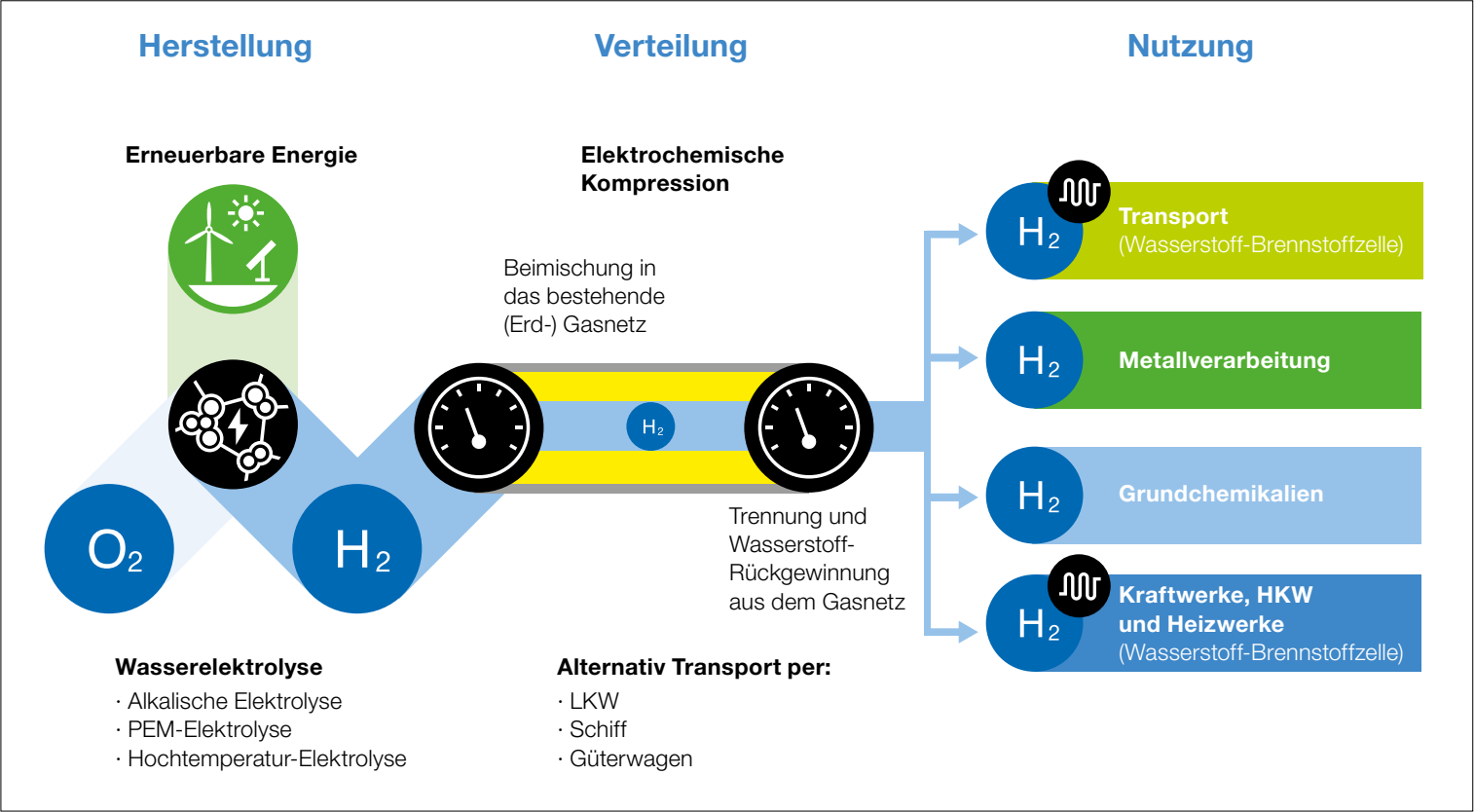


Bild 2: Flussdiagramm zur Herstellung, Verteilung und Nutzung von Wasserstoff

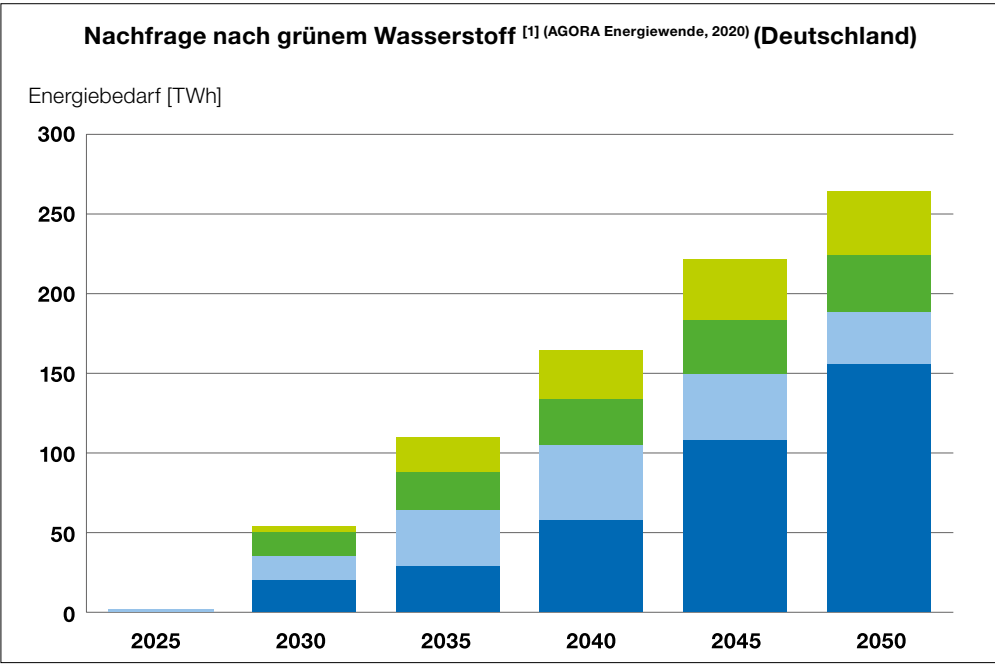


Bild 3: Prognostizierte Wasserstoffnachfrage in Deutschland in den kommenden Jahrzehnten

industriellen Bedingungen charakterisiert werden. Aktuell liegt bereits eine Methode vor, mit der industrielle Temperaturen und Elektrolytkonzentration in den Laboren des Lehr- und Forschungsgebiets Elektrochemische Reaktionstechnik verwirklicht werden können. In enger Zusammenarbeit mit dem Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik werden die Eigenschaften der Elektroden außerdem in Modellen nachgebildet, um auf Basis

der Laborversuche Parameter zu schätzen und Industriebedingungen zu simulieren. Eine Analyse liefert anschließend ein Verständnis über energetische Verluste, um daraus Stellschrauben für Effizienzsteigerungen zu identifizieren. Durch die Übertragbarkeit der Laborversuche in die Industrie soll die Forschung an der alkalischen Wasserelektrolyse beschleunigt und effizienter gestaltet werden. Neben der Optimierung der Elektrodenmate-

rialien spielt die Elektrodengeometrie eine wichtige Rolle, da hierdurch die Menge der aktiven Reaktionszentren beeinflusst wird. Bei konventionellen Aufbauten fehlt es oft an Möglichkeiten, die Geometrie der Elektroden zu optimieren. Herausforderungen sind zum Beispiel der Abtransport der entstehenden Gasblasen von der Elektrodenoberfläche oder die Kontrolle der Elektrodenporosität und dadurch die für die Elektrolyse nutzbare Oberfläche. Werden Gasblasen nicht effektiv abtransportiert, blockieren sie die aktive Elektrodenfläche und reduzieren dadurch die Effizienz. Die Forschungsgruppe Fluidics and Additive Fabrication am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik entwickelt deswegen komplexe 3D-Elektroden, welche die Transportprozesse innerhalb der Zelle verbessern. Die Oberfläche der Elektroden kann hier spezifisch darauf ausgelegt werden, entstehende Gasblasen effizient abzutransportieren. Außerdem ist es durch das gezielte Einbringen von Porositäten in die Elektrode möglich, die aktive Oberfläche zu vergrößern, und somit eine Effizienzsteigerung zu erreichen, siehe Bild 5.

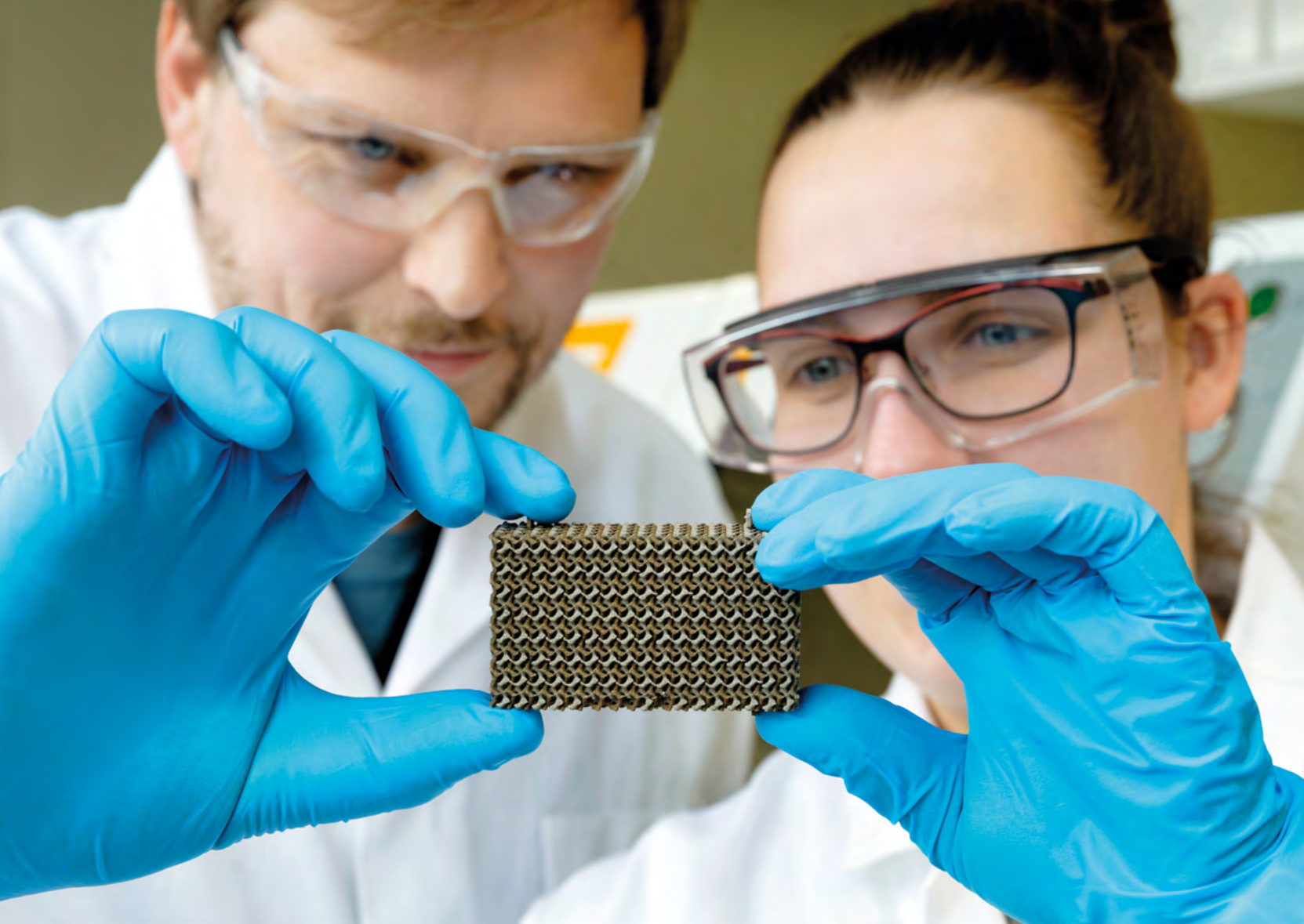


Bild 4: 3D-Elektrode in Form einer „Triply Periodic Minimal Surface“. Anode und Kathode sind hier ineinander verwoben, um sowohl große Oberfläche als auch gute Mischeigenschaften zu erzielen.
Foto: Peter Winandy

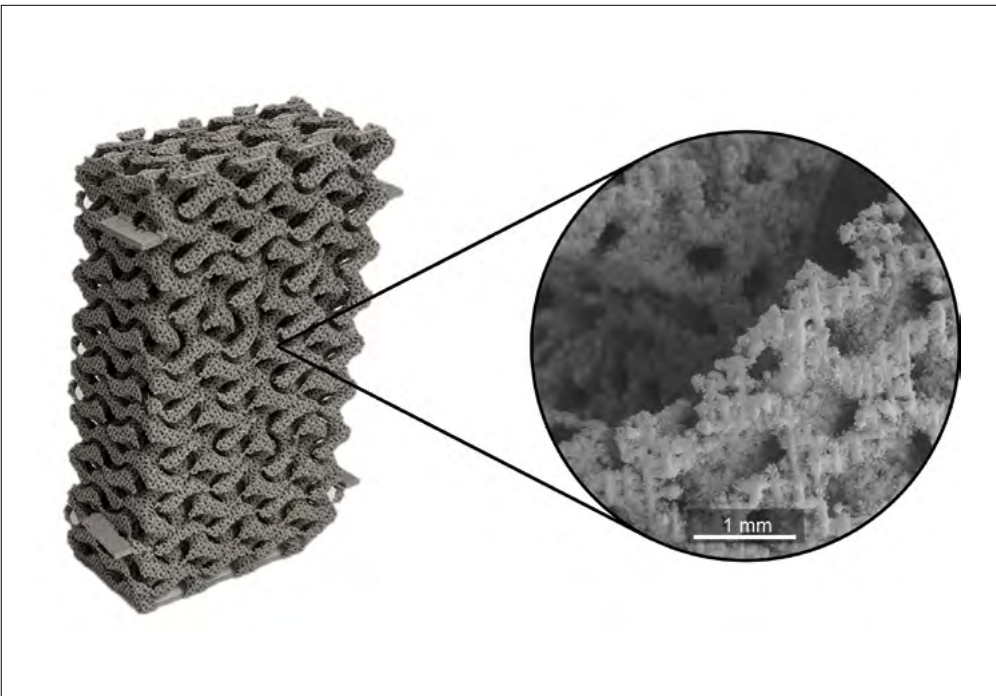


Bild 5: Darstellung einer 3D-Elektrode (links) mit poröser Mikrostruktur (rechts)

Verteilung

Neben einer effizienten und kostengünstigen Herstellung von Wasserstoff ist ebenso dessen Verteilung, also der Transport zwischen Ort der Erzeugung und der Nutzung, entscheidend. Als mögliche Transportmedien werden derzeit Pipelines, Schiffe und Lastkraftwagen diskutiert. Ein entscheidender Nachteil im Vergleich zu dem Transport fossiler Energieträger ergibt sich hierbei aus den Eigenschaften von Wasserstoff. Da Wasserstoff das leichteste uns bekannte Gas ist, muss für einen Transport signifikanter Mengen die Dichte zunächst deutlich erhöht werden. Derzeit wird das Gas dazu entweder durch Abkühlung unterhalb seines Siedepunktes von minus 252 Grad Celsius flüssig transportiert, alternativ kann für einen gasförmigen Transport eine mechanische Kompression auf bis zu 700 bar durchgeführt werden. Bei beiden Verfahren werden aufgrund der



Bild 6: Vollautomatisierter Versuchsstand für die Charakterisierung von neuen Elektrodenmaterialien in einer PEM-Brennstoffzelle
Foto: Peter Winandy



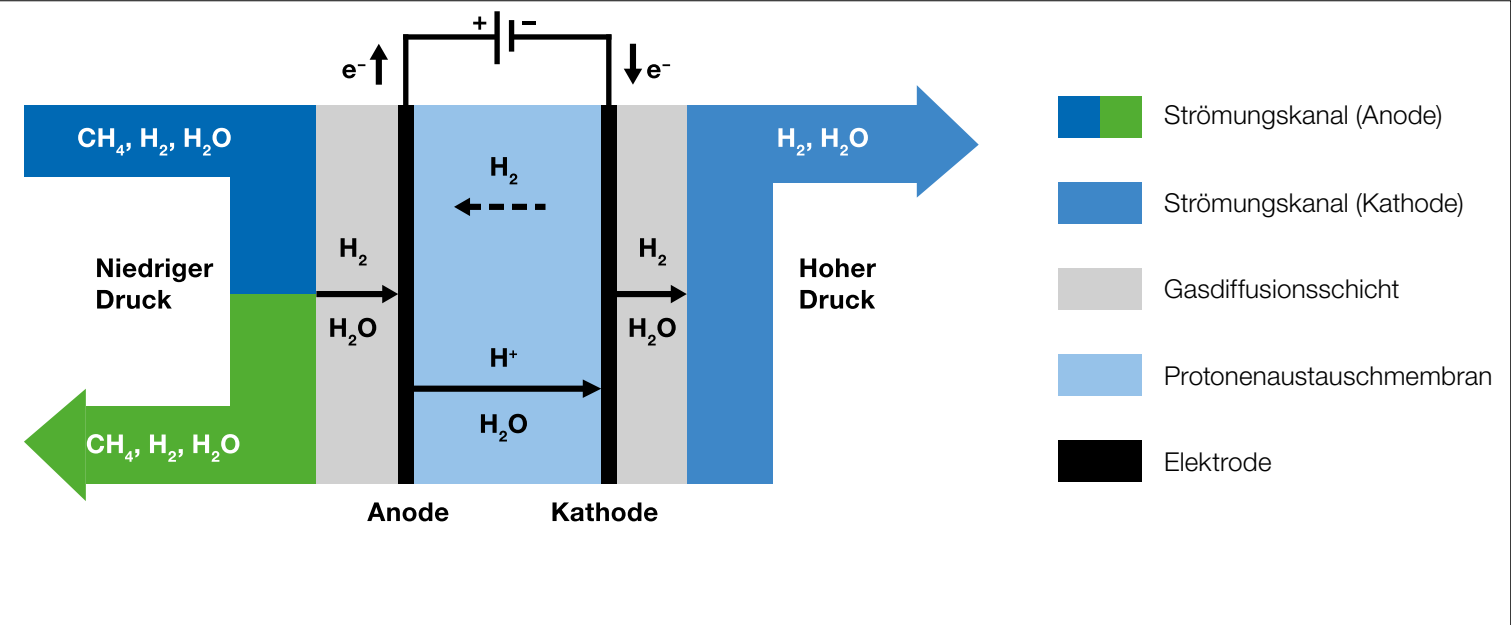


Bild 7: Schematische Darstellung der elektrochemischen H₂-Abtrennung und Kompression

extremen Bedingungen enorme Energiemengen benötigt, um den Wasserstoff transportfähig zu machen, was den Preis in die Höhe treibt. Aus diesem Grund forschen das Lehr- und Forschungsgebiet Elektrochemische Reaktionstechnik, der Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik und der Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik an der elektrochemischen Kompression, um deutlich höhere Wirkungsgrade im Vergleich zur mechanischen Kompression zu erzielen. Die Arbeiten erfolgen im Rahmen des Projektes HylInnoSep, angesiedelt im RWTH-Zukunftscluster Wasserstoff. In der Theorie kann hier isotherm, also ohne Temperaturänderung komprimiert werden, somit fallen keine Verluste in Form von Wärme an. Bei der elektrochemischen Kompression wird der Wasserstoff an der Anode in Protonen umgewandelt und an der Kathode wieder rekombiniert. Der Druck wird also über die elektrochemische Triebkraft zwischen den Elektroden erzeugt. Durch die Druckdifferenz gelangt allerdings auch wieder etwas Wasserstoff durch die Membran zurück, was zu Verlusten führt. Bei der Entwicklung der Technologie liegt ein Fokus auf der Materialentwicklung und der Optimie-

rung des Zelldesigns, da ein möglichst hoher Differenzdruck zwischen Anode und Kathode angestrebt wird. Wenn der Wasserstoff mittels Pipeline transportiert wird, entstehen sehr geringe Betriebskosten und es lassen sich sehr große Wassermengen befördern. Allerdings wäre der Aufbau eines neuen globalen Wasserstoffgasnetzes sehr teuer und würde viel Zeit in Anspruch nehmen. Aus diesem Grund verfolgt HylInnoSep darüber hinaus den Transport von Wasserstoff über das bestehende Erdgasnetz. Dazu kann Wasserstoff zunächst dem Gasnetz beigemischt werden, um dann beim Verbraucher aus dem Netz wieder elektrochemisch herausgetrennt und gleichzeitig komprimiert zu werden. Das Problem hierbei ist, dass die für diese Technologie benötigten Edelmetallelektroden von dem im Erdgas enthaltenen Schwefel und dem an der Anode als Nebenprodukt entstehenden Kohlenmonoxid beschädigt werden würden. Deswegen forscht das Lehr- und Forschungsgebiet Elektrochemische Reaktionstechnik derzeit an hybriden Platin-Eisen-Kohlenstoff-Elektroden, welche kostengünstiger und zudem weniger anfällig für Vergiftungen sind. Dazu werden Messungen der Elektro-

den in verschiedenen Gasgemischen durchgeführt, um Aufschlüsse über die Anfälligkeit der Elektroden gegenüber Verunreinigungen zu erhalten. Der Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik modelliert die elektrochemische H₂-Abtrennung und Kompression, um den Betrieb unter verschiedenen Betriebsbedingungen technisch und ökonomisch auszuwerten. Bild 7 zeigt den Aufbau des Reaktors und die verschiedenen Transportströme, welche dabei berücksichtigt werden.

Nutzung

Die Nutzungsmöglichkeiten von Wasserstoff sind sehr vielseitig und umfassen beispielsweise den Einsatz als Brennstoff in der Glasindustrie, als Reduktionsmittel in der Stahlherstellung oder die stoffliche Nutzung in der Chemieindustrie. Eine der am meisten diskutierten Anwendungen von Wasserstoff ist jedoch die sogenannte Wasserstoffbrennstoffzelle. Hier reagiert Wasserstoff mit Sauerstoff zurück zu Wasser unter Freisetzung von elektrischer Energie, also genau umgekehrt zur Elektrolyse. Dadurch ergibt sich ein breites Anwendungsspektrum im Energie- und Wärmesektor und vor Allem im Verkehrssektor.

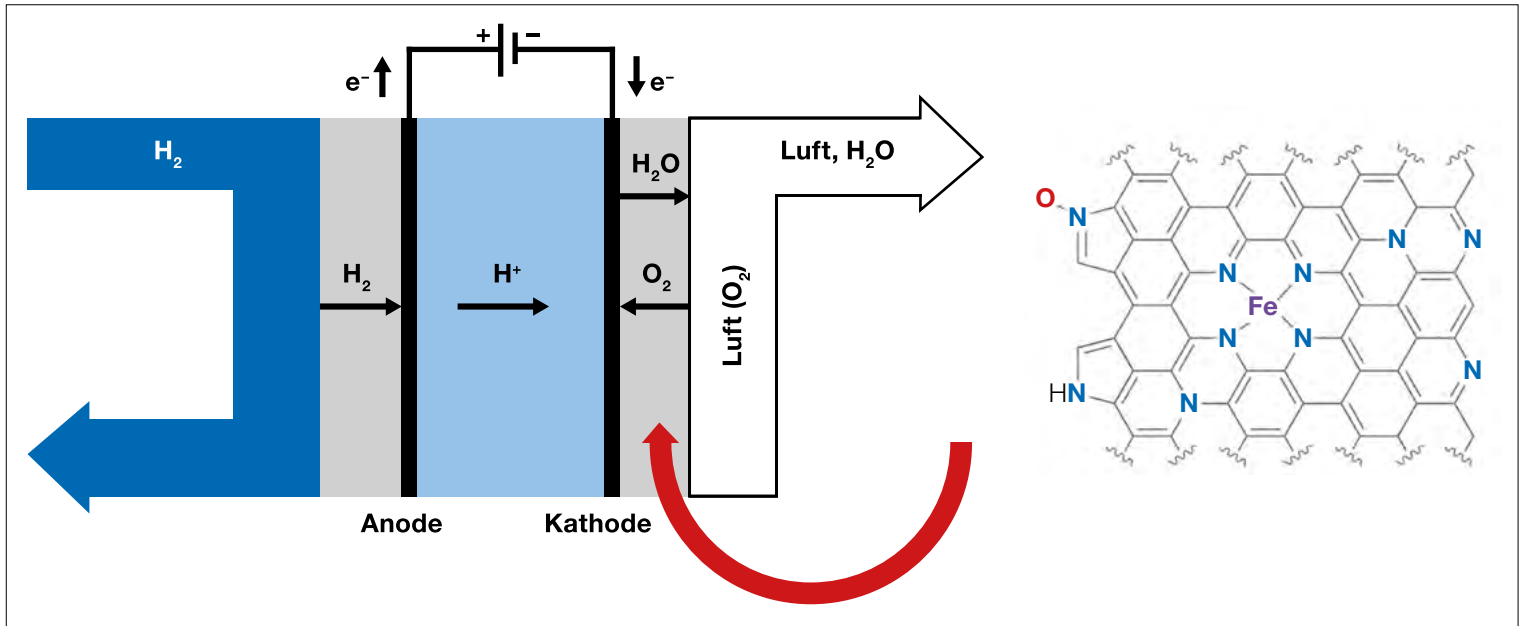


Bild 8: Struktur eines Fe-N-C-Katalysators (rechts) und dessen Anwendung in einer PEM-Brennstoffzelle, kurz PEMFC. Der Katalysator wird an der Kathode für die Reaktion von Sauerstoff und Wasserstoffprotonen zu Wasser eingesetzt.

Unter den verschiedenen Arten von Brennstoffzellen ist die PEM-Brennstoffzelle aufgrund ihrer niedrigen Betriebstemperatur und hohen Effizienz eine sehr aussichtsreiche Technologie für den Einsatz im Verkehrssektor. Auch in ihr werden Elektroden auf Platinbasis eingesetzt, welche die Investitionskosten der Brennstoffzelle in die Höhe treiben. Daher arbeitet das Lehr- und Forschungsgebiet Elektrochemische Reaktionstechnik an der Herstellung, der Testung und der Optimierung von Elektroden auf Basis von Nichteledmetallen für Anwendungen in PEM-Brennstoffzellen. Eisen-Stickstoff-Kohlenstoff-Elektroden (Fe-N-C-Elektroden) sind in dieser Hinsicht sehr vielversprechend, da mit ihnen die Materialkosten in einem PEM-Brennstoffzellenstapel reduziert werden können, siehe Bild 8.

Die Aachener Verfahrenstechnik forscht an verschiedenen Technologien entlang der gesamten Wasserstoff-Wertschöpfungskette, von der Erzeugung, über die Verteilung bis hin zur Nutzung, und trägt damit maßgeblich zur Entwicklung einer zukünftigen Wasserstoff-Ökonomie bei.

Autoren

Christian Marcks, M.Sc. und Niklas Thissen, M.Sc., sind wissenschaftliche Mitarbeiter am Lehr- und Forschungsgebiet Elektrochemische Reaktionstechnik. Univ.-Prof. Dr.rer.nat. Anna K. Mechler leitet das Lehr- und Forschungsgebiet Elektrochemische Reaktionstechnik. Raphael Seidenberg, M.Sc., ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik. Florian Wiesner, M.Sc., ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik. Leonid Wolsky, B.Sc., ist studentische Hilfskraft am Lehr- und Forschungsgebiet Elektrochemische Reaktionstechnik.

CO₂ statt Erdöl tanken?

Kraftstoffe der Zukunft und wie sie zu finden sind:
Ein umfassender Ansatz

Today, 19% of greenhouse gas emissions in Germany are caused by the transport sector. As our society strives to reduce CO₂ emissions, we try to transform the transport sector from relying on fossil resources to a circular economy. To this end, alternative liquid energy sources from agricultural waste and electricity are being intensively investigated today's research and development landscape. Our research focuses on so-called biohybrid fuels as part of the "Fuel Science Center" Cluster of Excellence (FSC) at RWTH Aachen University. The challenge is to develop a production process for a synthetic fuel with high energy density that is economically competitive and carbon-neutral. In this article we introduce a few methodical approaches on how we face this challenge.

Am 12. Dezember 2015 wurde auf der Weltklimakonferenz in der französischen Hauptstadt das „Pariser Klimaabkommen“ beschlossen. Dieses beinhaltet, den Temperaturanstieg im Vergleich zum vorindustriellen Zeitalter auf möglichst 1,5 Grad Celsius zu begrenzen. Um darzustellen, wie dieses Ziel zu erreichen ist, errechnete der Weltklimarat verschiedene Szenarien. Zur Emissions-einsparung wurde die Transformation des Verkehrssektors als ein großer Hebel identifiziert, dieser ist in Deutschland für 19 Prozent der Treibhausgase verantwortlich. Ziel ist daher, die Mobilität von fossilen Energieträgern auf einen kreislaufwirtschaftsbasierten Sektor umzubauen. Dazu werden alternative Antriebskonzepte wie E-Mobilität, Brennstoffzellen, aber auch flüssige Energieträger aus landwirtschaftlichen Abfällen und Strom aktuell erforscht. Die sogenannten Biohybridkraftstoffe stehen im Fokus des RWTH-Exzellenzclusters „The Fuel Science Center“, kurz FSC. Hier sollen flüssige Energieträger aus biobasierten Kohlenstoffmolekülen, CO₂ sowie Wasserstoff aus erneuerbarem Strom entwickelt werden. Anschließend erfolgt eine Optimierung der neuartigen Biohybridkraftstoffe für die modernen Motoren in Hinblick auf eine hocheffiziente und saubere Verbrennung. Der Herstellungsprozess für einen synthetischen Kraftstoff muss dabei ökonomisch konkurrenzfähig und CO₂-neutral stattfinden. Die Verzahnung von Reaktions-, Prozess- und Motorenentwicklung ist für eine frühzeiti-

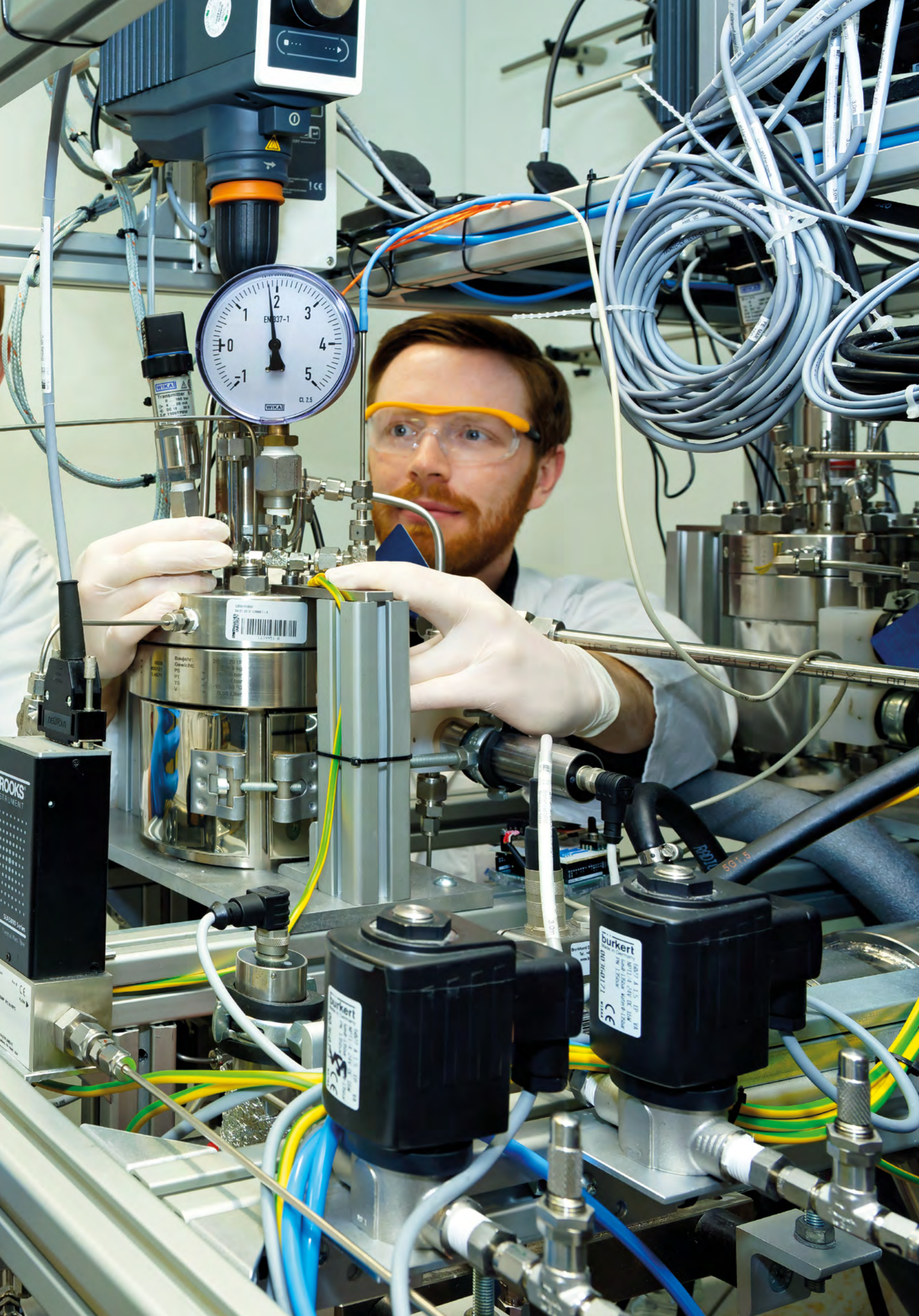
ge Identifikation geeigneter Kraftstoffkandidaten essenziell. Kriterien können eine effiziente Syntheseroute oder günstige Prozessschritte hin zum Kraftstoff sowie Verbrennungseigenschaften, die eine effiziente Nutzung im Mobilitätssektor ermöglichen, sein. Die Aachener Verfahrenstechnik arbeitet an der Schnittstelle zwischen Synthese und Verbrennung. Dabei werden innovative Produktaufarbeitungsstrategien entwickelt sowie bestehende Herstellungsprozesse optimiert. Zuvor muss jedoch geklärt werden, aus welchen Molekülen der Kraftstoff bestehen soll. Erdölbasierte Kraftstoffe basieren auf Kohlenwasserstoffen, herkömmliche Biokraftstoffe aus sauerstoffhaltigen Molekülen wie Ethanol oder Fettsäuremethylestern. Die Anforderungen an einen Kraftstoff sind jedoch nicht an bestimmte stoffliche Zusammensetzung gebunden, sondern an Eigenschaften wie Zündwilligkeit oder Energiedichte. Um den Kraftstoff mit den bestmöglichen Eigenschaften sowie dem effizientesten Herstellungsprozess zu finden, sollten also auch Stoffe und Stoffgemische in Betracht gezogen werden, die traditionell nicht als Kraftstoffe benutzt werden. Mittels Computer werden daher tausende von möglichen Stoffen gescreent, um geeignete Kraftstoffkandidaten zu identifizieren: Zunächst wird eine Vielzahl möglicher Molekülstrukturen durch einen Algorithmus generiert. Um diese auf Tauglichkeit als Kraftstoff zu überprüfen, werden relevante Stoffeigenschaften wie Siedetemperaturen, Dich-



Bild 1: Arbeiten an einer eigenkonzipierten Miniplant. Langzeitexperimente mit Reaktionen und verknüpften Produktaufarbeitungsstrategien können in Anwesenheit der Gase CO_2 und Wasserstoff durchgeführt werden. Es werden Anlagenparameter eingestellt, Proben aus der Anlage entnommen und für die Analyse geprüft.
Foto: Peter Winandy



Bild 2: Visuelle Kontrolle von flüssigen Ausgangsstoffen und Reaktionsprodukten.
Foto: Peter Winandy



ten, Energiegehalte oder Oktanzahlen mit Modellen abgeschätzt. Moleküle, die die Anforderungen erfüllen, werden als Kraftstoffkandidaten gezählt und von Verbrennungsexperten experimentell untersucht. Expertinnen und Experten aus der Chemie und der Biotechnologie suchen dann nach möglichen Synthesewegen zur Herstellung. Neben den Verbrennungseigenschaften des Kraftstoffes ist die kostengünstige und energiesparende Herstellung wichtig. Dazu werden die Energiebedarfe der Syntheseschritte in einem frühen Stadium abgeschätzt. Anschließend wird ein Netzwerk von Syntheseschritten von erneuerbaren Rohstoffen zu verschiedenen Kraftstoffkandidaten erstellt. Dieses Netzwerk lässt sich nach verschiedenen Zielgrößen wie Produktionskosten, CO₂-Fußabdruck oder einem Kompromiss optimieren. Je nach Zielgröße ergeben sich verschiedene Konfigurationen an Syntheseschritten. Die optimierten Netzwerke erlauben einen Vergleich der Herstellungsprozesse von Kraftstoffkandidaten in einem frühen Entwicklungsstadium. Ein weiterer Schritt ist nun, das Netzwerk nicht mehr für einen bestimmten Kraftstoffkandidaten zu optimieren, sondern die stoffliche Zusammensetzung des Kraftstoffes als Stellschraube zu nutzen. Der Optimierer erhält die Kraftstoffspezifikation als Nebenbedingungen. Dieses sogenannte integrierte Kraftstoff- und Prozessdesign ermöglicht es, Synergien im Produktionsprozess zu finden. Ein derart formuliertes Kraftstoffgemisch, der Keton-Ester-Alkohol-Alkan-Blend (KEAA), wurde an einem Motorprüfstand untersucht und erlaubt eine effizientere Verbrennung als herkömmliches Benzin.

Effizienzsteigerungen des Herstellungsprozesses werden durch globale Optimierung eines bestehenden Verfahrens, neue Syntheserouten sowie alternative Aufreinigungsstrategien, die effizienter als konventionelle Trenntechniken sind, geprüft. Die globale Optimierung verfolgt das Ziel, die bestmöglichen Betriebsbedingungen im Sinne niedriger Energiekosten für ein Verfahren mathematisch zu ermitteln. Betriebsbedingungen sind beispielsweise Temperatur und Druck einzelner Apparate. Traditionell werden diese Betriebspunkte für jeden Prozessschritt nach Erfahrung und Faustregeln festgelegt. Die Verkettung von Prozessschritten zu einem Gesamtprozess führt jedoch in der Regel dazu, dass die Betriebspunkte, die die geringsten Kosten des Gesamtprozesses ergeben, sich von den intuitiv gewählten Betriebspunkten unterscheiden. Um den Gesamtprozess zu optimieren, sind aufwendige Simulationen notwendig. Mathematische Algorithmen für die Identifikation von globalen Optima sind kompliziert und werden zurzeit erforscht. Am Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik wird dafür ein solcher Algorithmus entwickelt und speziell auf die Problemstellungen von verfahrenstechnischen Prozessen zugeschnitten. Mit diesem Algorithmus wurde der Gesamtprozess zur Herstellung des Kraftstoffes OME1 global optimiert. Die aktuelle OME-Synthese basiert auf den Basischemikalien Methanol und Formaldehyd, wobei letzteres für einen effizienten Prozess energieaufwendig von Wasser getrennt werden muss. Daher wird am Lehr- und Forschungsgebiet Elektrochemische Reaktionstechnik an neuen Syntheserouten

für die elektrochemische, wasserfreie Erzeugung von Formaldehyd direkt aus Methanol geforscht, um den Prozess energieeffizienter zu gestalten. Dabei wird Wasser im Reaktionssystem vermieden und es wird direkt aus der Umsetzung eine verwendbare OME-Syntheselösung erhalten.

Eine weitere Methodik zur Effizienzsteigerung ist die Implementierung von alternativen Trenntechniken an Stelle von konventionellen, energieintensiveren. Dazu wird am Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik in einem interdisziplinären Ansatz ein Herstellungsprozess zur Synthese verschiedener Kraftstoffkandidaten aus der Molekülgruppe der zyklischen Acetale in Zusammenarbeit mit Kolleginnen und Kollegen aus Biotechnologie und Chemie untersucht. Zyklische Acetale können basierend auf Biomasse und CO₂ hergestellt werden. Diese sogenannten Biohybridkraftstoffe entstehen durch Kopplung mikrobieller, enzymatischer und chemokatalytischer Konversionsschritte. Für diese Prozesse sind alternative Trenntechniken unverzichtbar. Die Kopplung dieser biokatalytischen Konversionsschritte ist aufgrund ihrer Temperatursensitivität nur durch neuartige Trenntechniken mit milden Prozessbedingungen realisierbar. Für die Produktion der zyklischen Acetale ist neben der Auswahl des Katalysators für die einzelnen Konversionsschritte auch die Wahl des Lösungsmittels entscheidend. Zieht man verschiedene Trenntechniken für die Produkte in Betracht, spannt sich ein großer Raum für das konzeptionelle Prozessdesign auf. Sobald ein geeigneter Prozess basierend auf Simulationen identifiziert worden ist, kann dieser detailliert untersucht werden. Oft ist dabei ein Reaktions- oder Trennschritt für

einen Großteil der Prozesskosten verantwortlich, der dann verbessert werden kann. In mehreren Entwicklungsschleifen wird so ein effizienter Herstellungsprozess eines neuen Kraftstoffes entwickelt. Stehen der Kraftstoff und der Herstellungsprozess fest, wird die ökologische und ökonomische Bewertung durchgeführt: Kann sich der neue Kraftstoff gegen bestehende Kraftstoffe durchsetzen? Und falls nicht: Welche Stellschrauben gibt es? Werden die gesetzten Ziele für realistisch befunden, kann eine eingehende Weiterentwicklung der Prozessschritte angegangen werden.

Eine detaillierte Untersuchung zur Steigerung der Effizienz von Reaktion und Trenntechnik wird in Kooperation mit dem Institut für Technische und Makromolekulare Chemie anhand eines exemplarischen Kraftstoffkandidaten aus der Gruppe der zyklischen Acetale entwickelt. Zu dessen Herstellung wird neben biologisch herstellbaren flüssigen Ausgangsstoffen auch CO_2 und Wasserstoff benötigt. Die besondere Schwierigkeit des Projektvorhabens liegt in der Anwesenheit der Gase CO_2 und Wasserstoff, die in die Reaktion unter hohem Druck eingebracht werden. Somit umfasst dieses Reaktionssystem Flüssigkeiten und Gase, deren Zusammenspiel Einfluss auf die Reaktionsgeschwindigkeit, Thermodynamik und Strömungsmechanik hat. Um die Leistungsfähigkeit solcher komplexen Systeme zu steigern, ist ein tiefes Verständnis für die grundlegenden Phänomene notwendig. Die Zusammenarbeit mit Fachleuten aus Chemie und Biologie erlaubt es, die Syntheseschritte zusammen mit der Aufreinigung zu entwickeln und aufeinander abzustimmen. Hier kann mithilfe einer Labor-

anlage die Kombination einzelner Apparate in Langzeitexperimenten getestet werden.

An diese Stelle kann nun die Entwicklungslücke zwischen Labor und Industrie ein Stück weiter geschlossen werden, da sich die Frage der Skalierbarkeit von Prozessen beantworten lässt. Mit Forschungsansätzen wird nun der Weg zu CO_2 -Neutralität weiter besritten und machbare Prozesse werden auf unterschiedlichen Größenordnungen detaillierter untersucht. Angefangen von der computergestützten Gegenüberstellung von Kraftstoffkandidaten und einzelner Prozessschritten führt die integrierte Entwicklung von Kraftstoffen und ihren Herstellungsverfahren zu der Analyse von Phänomenen im Labormaßstab. So wird ein Werkzeugkasten aus einer Vielzahl Methoden entwickelt, der vielseitig anwendbar ist und den Weg in einen CO_2 -neutralen Mobilitätssektor ermöglicht.

Autoren

Philipp Ackermann, M.Sc. ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik.

Moritz Haas, M.Sc., und William von Westarp, M.Sc., sind wissenschaftliche Mitarbeiter am Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik.

Florian Schwarz, M. Sc., ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehr- und Forschungsgebiet Elektrochemische Reaktionstechnik.

CO₂ als Chance

Kohlenstoff aus Luft und Abgasströmen für den
Alltag nutzbar machen

Carbon dioxide (CO₂) drives climate change through its emission in the energy, industry, and mobility sectors. However, CO₂ can also be seen as an opportunity, since it contains carbon, a vital element found in nearly all everyday products. CO₂ can be captured from the atmosphere through the direct air capture process or obtained from point sources, such as power plants and chemical plants or breweries. Once captured, CO₂ can be converted into industrially needed chemicals or valuable everyday products through chemical or biological reactions. Using CO₂ in this way can lower CO₂ emissions and reduce the dependency on fossil resources, as well as lead to the development of new, sustainable products and technologies. It is crucial to continue exploring innovative solutions, to address the challenges of climate change.

Durch die Emission in den Sektoren Energie, Industrie sowie Mobilität steigt die CO₂-Konzentration in der Atmosphäre. Die Nutzung des Klimaschädling kann jedoch auch als Chance gesehen werden, denn CO₂ beinhaltet mit dem Kohlenstoff-Atom ein essenzielles Element. Kohlenstoff ist in den meisten der alltäglich verwendeten Produkte enthalten und kommt zu einem sehr großen Anteil aus fossilen Ressourcen wie Erdöl oder Erdgas. Warum nutzen wir nicht den Kohlenstoff, der in Form von CO₂ den Klimawandel vorantreibt? Dies hätte zwei konkrete Vorteile: Erstens kann die Abhängigkeit Deutschlands von Ländern, die fossile Energieträger in großen Mengen besitzen, reduziert werden. Zweitens kann der weitere CO₂-Ausstoß und damit im besten Fall seine atmosphärische Konzentration gesenkt werden.

Wo kommt CO₂ her? Normalerweise liegt CO₂ in Konzentrationen von ungefähr 0,04 Prozent in der Luft vor und ist damit zu stark verdünnt, um stofflich verwertet werden zu können. Eine Möglichkeit, CO₂ direkt aus der Atmosphäre abzufangen und anschließend in nützliche Chemikalien umzuwandeln, ist das sogenannte Direct-air-capture-Verfahren. Dabei strömt Umgebungsluft durch einen Abscheideapparat, der das CO₂ aus der Luft entzieht und aufkonzentriert, ähnlich wie eine Maispflanze, die für eine effiziente Photosynthese zuerst CO₂ aus der Luft in ihren Zellen ansammelt. Das Direct-air-capture-Verfahren benötigt allerdings Energie zum Aufkonzentrieren aus der Luft. Diese Energie muss durch nachhaltige Methoden wie Wind- und Wasserkraft oder Solartechnik bereitgestellt werden, um schlussendlich eine klimapositive Herstellung von kohlenstoffhaltigen Chemikalien aus aufkonzentriertem CO₂ zu ermöglichen.



Bild 1: Bei der biologischen Methanisierung wird Kohlenstoffdioxid mit Wasserstoff durch spezialisierte Mikroorganismen im Bioreaktor zu nachhaltigem Treibstoff (Biomethangas) umgewandelt.

Foto: Peter Winandy



Bild 2: Klimaschädliches Kohlenstoffdioxid + erneuerbarer Wasserstoff = Nachhaltiges Biomethan!
Von der Erdgastankstelle hin zur kohlenstoffneutralen Mobilität der Zukunft.
Foto: Peter Winandy



 **STAWAG**



Bild 3: Kohlenstoffdioxid wird mittels innovativer chemischer und biotechnologischer Verfahren zu Produkten umgewandelt. Zum Beispiel in Form von CO₂-basiertem Ethylacetat, welches als wertvolle Grundchemikalie in vielen Alltagsprodukten Anwendung findet.

Foto: Peter Winandy

Eine Alternative ist die Möglichkeit, CO₂ direkt von sogenannten Punktquellen zu nutzen. Dies können Kraftwerke, Anlagen der chemischen Industrie, aber auch Biogasanlagen, Brauereien oder Anlagen der Zementindustrie sein. Hier werden große Mengen CO₂ produziert, die bereits in einem gebündelten, aufkonzentrierten Abgasstrom vorliegen. Teilweise muss dieses Gas zwar noch von Kontaminationen befreit werden, aber auch hierfür gibt es bereits innovative Lösungsansätze.

Wie wird das CO₂ aus dem Direct-air-capture-Verfahren oder den Punktquellen nun zu industriell benötigten Chemikalien oder zu wertvollen Alltagsprodukten umgewandelt? Einige CO₂-Nutzungsrouten werden im Folgenden vorgestellt.

Im Projekt GasValor wird die Verwertung von gasförmigen, CO₂-reichen Reststoffströmen aus Punktquellen erforscht. Konkret sollen die Abgase von Biogasanlagen und kommunalen Kläranlagen im Rheinischen Revier genutzt werden, um neben der Reduktion der

CO₂-Emission den Betrieb solcher Anlagen für die lokale Landwirtschaft beziehungsweise die Kommunen finanziell attraktiver zu machen. Ziel ist es, CO₂ als Substrat biotechnologisch mit Mikroorganismen umzusetzen. Eine Vielfalt von spezialisierten Mikroorganismen kann gasförmiges CO₂ zusammen mit einer Energiequelle (zum Beispiel H₂ oder CO) in einer Synthesegasfermentation zu wertvollen Produkten umwandeln. Ein Beispiel für solche Mikroorganismen sind Clostridien, die im Boden und im menschlichen Verdauungstrakt vorkommen. Der biotechnologische Prozess ist gegenüber Verunreinigungen des Gases toleranter als eine chemisch-katalytische CO₂-Umsetzung. Dies ist insbesondere für Klär- oder Biogasanlagen relevant, wo CO₂ in der Regel nicht als Reinstoff, sondern mit einer Reihe von gasförmigen Verunreinigungen anfällt. Im Projekt steht die biotechnologische Umwandlung des CO₂ in den vielfältig nutzbaren Ester Ethylacetat im Mittelpunkt. Diese Chemikalie ist zum Beispiel als Lösemittel in Nagellackentfernern oder als Aromastoff in

Bonbons enthalten. Industriell interessant ist Ethylacetat aber auch für die Entkoffeinierung von Kaffeebohnen oder zur Herstellung von Farben. Durch eine ökonomische Umsetzung des CO₂ zu einem wertvollen, chemischen Produkt können regionale Biogas- und Kläranlagen über die Förderdauer des Erneuerbare-Energie-Gesetzes (EEG) hinaus erhalten und der CO₂-Ausstoß reduziert werden. Zur Entwicklung eines wirtschaftlichen Gesamtprozesses arbeiten die Partner im Projekt fachübergreifend an den Themen Bioprozessoptimierung und Produktaufarbeitung. Im Rahmen des Projektes Carbon2Chem wurde ein mehrstufiger Prozess zur Nutzung der kohlenstoffhaltigen Abgase aus der Stahlindustrie entwickelt. Das im Abgas enthaltene CO₂ wird erst chemisch in einem Amin gebunden und dann zu Ameisensäure hydriert. Anschließend erfolgt eine Umwandlung zum Zielprodukt Methylformiat, einer weiteren Chemikalie aus der Gruppe der Ester. Methylformiat kann unter anderem in der Schädlingsbekämpfung eingesetzt werden,

um Getreide vor dem Befall mit Kornkäfern zu schützen. Der Ester wird aber auch als Lösungsmittel und zur Produktion von organischen Chemikalien eingesetzt. Da die Stahlproduktion bereits nah am technischen Optimum betrieben wird, ist es kaum noch möglich, das im Prozess entstehende CO_2 zu reduzieren. Die direkte Nutzung des CO_2 zur Herstellung von Chemieprodukten bietet daher eine Möglichkeit, die CO_2 -Emissionen dennoch deutlich zu reduzieren. Dies ist entscheidend, da die Menschheit auch in Zukunft Stahl für den Gebäude- und Maschinenbau benötigen wird.

Eine weitere vielversprechende Möglichkeit, CO_2 in Wertprodukte umzuwandeln, bietet die Elektrolyse. In elektrochemischen Reaktoren wird CO_2 mittels erneuerbar erzeugtem Strom in vielfältige Zwischenprodukte wie Formiat, Kohlenstoffmonoxid, Alkohole und Alkene umgewandelt. Einige dieser Zwischenprodukte dienen in der chemischen Industrie als Basis für eine weitere Verarbeitung. Andere Produkte können als Energiespeicher eingesetzt und in Zeiten von Energieknappheit wieder in Strom umgewandelt werden. Idealerweise wird das CO_2 direkt aus Punktquellen in den elektrochemischen Reaktor geführt. Untersucht wird der Einfluss von Verunreinigungen, wie zum Beispiel Schwefel, auf die Katalysatoren im Reaktor. Um potenzielle Probleme durch Gasverunreinigungen zu umgehen, kann, alternativ zur direkten Nutzung des CO_2 aus Punktquellen, eine Aufreinigung des CO_2 mittels einem flüssigen Absorptionsmittel erfolgen. Ein Vorteil der Elektrochemie ist, dass das flüssige Absorptionsmittel mit gebundenem CO_2 dann direkt, ohne Zwischenschritt, in den elektrochemischen Reaktor überführt werden kann. Turbulenzen im Reaktor stellen eine ausreichende Versorgung einer reaktiven Schicht mit CO_2 sicher. Die Aachener Verfahrenstechnik erforscht beide Möglichkeiten und Reaktortypen für die Elektrolyse.

Alle vorangegangenen Verwertungsrouten wandeln CO_2 in ein festes oder flüssiges Produkt um. Aber was kann man noch mit dem überschüssigem CO_2 machen, wenn zum Beispiel die spezifischen Produkte gerade nicht benötigt werden? Das CO_2 kann dann mit Hilfe von erneuerbarem Wasserstoff (H_2) in Methan (CH_4) umgewandelt und als Ersatz für Erdgas im Gasnetz gespeichert werden. Methan aus dem Gasnetz heizt unsere Wohnungen, wird aber auch zur Produktion elektrischer Energie und als Basis für chemische Syntheseprozesse in der Industrie eingesetzt. Die Umwandlung von CO_2 in Methan erfolgt

unter anderem mit Mikroorganismen aus der Gruppe der Archaeen und wird Methanisierung genannt. Dieses Verfahren wurde im Industriemaßstab erprobt und wird bereits an mehreren Standorten, auch in Deutschland, angewendet. Der große Vorteil der biotechnologischen Umwandlung von CO_2 in Methan ist, dass fossiles Erdgas ebenfalls hauptsächlich aus Methan besteht, und so das in Deutschland sehr gut ausgebaute Erdgasnetz mit entsprechenden Transportwegen und Speichern genutzt werden kann. Mit Hilfe der biotechnologischen Methanisierung kann also CO_2 in Form von Methan fossiles Erdgas ersetzen und dabei die bereits verfügbare Infrastruktur nutzen.

Eine Herausforderung bei der Nutzung von CO_2 besteht darin, dass CO_2 ein vollständig oxidiertes Molekül ist. Dies bedeutet, dass CO_2 nicht reaktiv ist und jede Umwandlung zwingend den Eintrag von Energie erfordert. Diese Energie kann in unterschiedlichen Formen und aus verschiedenen Quellen bereitgestellt werden. Beispielsweise kann durch Windkraft nachhaltig produzierte elektrische Energie oder nachhaltiger, grüner Wasserstoff als Energiequelle genutzt werden. Der Ausbau der erneuerbaren Energien ist also nicht nur sinnvoll, um CO_2 -Emissionen aus Kohlekraftwerken zu reduzieren, sondern trägt auch dazu bei, das CO_2 zu nutzen, dessen Emission leider nicht umgangen werden kann.

Autoren

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Jochen Büchs war Inhaber des Lehrstuhls für Bioverfahrenstechnik.

Carla Esch, M.Sc., und Dr.-Ing. Robert Keller sind wissenschaftliche Mitarbeitende am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik. Janik Hense, M.Sc., Christoph Kabatnik, M.Sc., und Robert Kiefel, M.Sc., sind wissenschaftliche Mitarbeiter am Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik.

Katharina Miebach, M.Sc., und Benjamin Schick, M.Sc., sind wissenschaftliche Mitarbeitende am Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik.

Erneuerbare Energien für die chemische Industrie

Wie Stromverbrauch und erneuerbare Energiequellen
synchronisiert werden können

The steady increase of renewable energies poses new challenges to industrial power consumers and the energy infrastructure, requiring a rethinking across all sectors. Demand response allows electricity consumers to contribute to a sustainable and reliable integration of renewable energies into the European power grid. The Kopernikus project SynErgie contributes to these developments in a broad collaboration of industry, scientific institutions, and civil society. This article discusses the concept and challenges of demand response and introduces the research activities of Aachener Verfahrenstechnik and its collaborators.

Der stetig wachsende Anteil erneuerbarer Energiequellen hat in den vergangenen Jahren in Deutschland und der Europäischen Union zu einer umwelt- und klimafreundlichen Strombereitstellung geführt, verursacht jedoch auch einen zunehmenden Druck auf das Stromsystem. Denn im Gegensatz zu den konventionellen Energieressourcen wie Kohle, Gas und Kernenergie, fluktuiert die Verfügbarkeit von Strom aus den wichtigsten erneuerbaren Technologien Fotovoltaik und Windenergie sowohl örtlich als auch zeitlich. Diese Faktoren erzeugen Unsicherheiten in der Preislandschaft des Strommarktes und haben darüber hinaus Einfluss auf die Versorgungssicherheit im europäischen Stromnetz. Energieverfügbarkeit und Energiepreise sind hierbei allgemein stark korreliert, sodass der Strompreis an den kurzfristigen Strommärkten über den Tagesverlauf deutlich variieren kann. Gleichzeitig führen Versorgungsgänge schlimmstenfalls zu Blackouts, bei welchen das Stromnetz lokal zusammenbricht.

Der Druck auf die europäischen Energiemärkte wurde noch einmal zusätzlich durch politische Konflikte verstärkt. Die Versorgungssicherheit für die Zivilgesellschaft und die Industrie bei gleichzeitigem Ausbau erneuerbarer Energien ist deshalb vermehrt Gegenstand politischer Diskussionen und Fragestellung vieler Forschungsprojekte. Die Entwicklung neuer Speichertechnologien bietet hierbei die Möglichkeit einer Strom-

pufferung für eine kontinuierliche Versorgung, ist gleichzeitig aber immer auch mit Umwandlungsverlusten sowie zusätzlichen Investitionskosten verbunden. Demgegenüber erlaubt eine direkte verbraucherseitige Synchronisation mit den Energiequellen, die sogenannte Nachfrageflexibilität, explizit auf die wechselnde Verfügbarkeit von Energie mithilfe der bestehenden Systeme zu reagieren.^[1] Die Grenze zwischen Speichertechnologien und Nachfrageflexibilität ist hierbei nicht immer klar definiert, da viele Industrieprodukte und -prozesse ein inhärentes Energiespeichervermögen aufweisen.^[2,3,4] Intelligente Stromnetze, sogenannte Smart-Grids, sollen die verschiedenen Konzepte schließlich durch eine geeignete Abstimmung von Erzeugung, Speicherung und Verbrauch vereinen.^[5]

Nachfrageflexibilität bei schwankender Energieverfügbarkeit

Die zuverlässige Verteilung von erneuerbarem Strom im europäischen Stromnetz stellt nicht nur eine Herausforderung für die Netzbetreiber beim Ausbau und Betrieb der Infrastruktur dar. Vielmehr bietet der Umgang mit der schwankenden Verfügbarkeit von Energie auch Chancen und Herausforderungen bei den großen Energieverbrauchern. Produktionsprozesse in der Industrie sind häufig für einen definierten Betriebspunkt mit zeitlich invarianter Produktionsmenge, Qualität sowie gleichbleibendem Energiebedarf und -kosten ausgelegt und optimiert. Wechselnde Energieverfügbarkeit und -kosten zwingen Unternehmen nun zu einem Umdenken und bieten wirtschaftliche Anreize für eine Umstellung der Produktionsverfahren in Richtung eines lastflexiblen Betriebs.

Die technische Umsetzung einer solchen Nachfrageflexibilität erfordert sowohl neue Herstellungskonzepte, innovative Designs einzelner Prozesskomponenten, als auch Methoden zur lastflexiblen Betriebsführung. Dabei müssen sowohl die Langlebigkeit der flexibel betriebenen Anlagen, die Sicherheit im dauerhaften Wechselbetrieb, als auch die Einhaltung von Qualitätsanforderungen gewährleistet werden. Die Umsetzung dieser Aspekte wird durch die Aachener Verfahrenstechnik im Rahmen des Kopernikus-Projekts „SynErgie“^[6] in Kooperation mit wissenschaftlichen und industriellen Partnern erforscht.

Nachfrageflexibilität in der chemischen Industrie

Elektrochemische Produktionsverfahren, wie die Chlor-Alkali-Elektrolyse, beziehen elektrischen Strom direkt als Energiequelle für den chemischen Umwandlungsvorgang und sind deshalb attraktive Kandidaten für die Lastflexibilisierung. Die Chlor-Alkali-Elektrolyse ist ein Herstellungsverfahren zur industriellen Produktion von Chlorgas mit Natronlauge und Wasserstoffgas als Nebenprodukten. Die Umsetzung der flexiblen Chlorherstellung untersucht die Aachener Verfahrenstechnik gemeinsam mit der Covestro AG. Hierfür wird ein neuartiges Elektrolysekonzept weiterentwickelt, dass zwischen zwei Betriebsmodi mit unterschiedlichem Strombedarf bei gleichbleibender Produktionsrate der Hauptprodukte wechseln kann.^[6] Der Modus mit hohem Energieverbrauch beinhaltet eine gleichzeitige Wasserstoffproduktion, ein um 30 Prozent reduzierter Stromverbrauch ist bei zusätzlichem Sauerstoffverbrauch unter Verzicht auf die Wasserstoffproduktion möglich. Zur Erprobung und Weiterentwicklung der flexiblen Fahrweise wurde ein automatisierter Versuchsstand aufgebaut und in verschiedenen elektrochemischen Zellen und in einer realen Industriezelle untersucht. Neben der Apparate- und Prozessentwicklung werden im Rahmen einer Lebenszyklusanalyse mögliche Vorteile in den Umweltwirkungen der flexiblen Prozesskonzepte mit konventionellen Elektrolyseanlagen verglichen und bewertet.

Bei der Herstellung biobasierter Carbonsäuren ist im Besonderen die Aufreinigung der fermentativ erzeugten Säuren und die, in Bezug auf die nachhaltige Prozessgestaltung notwendige, stoffliche Wiederverwendung der Hilfsmittel in der Fermentation ein energieintensiver Prozess. Durch eine Elektrifizierung dieser Prozessschritte kann ein lastflexibler Betrieb dieser Anlagenkomponenten erreicht werden. Ein Beispiel hierfür ist der mit der BASF SE entwickelte energieflexible Aufarbeitungsprozess.^[9] Im SynErgie-Projekt entstand ein innovativer elektrifizierter Aufarbeitungsprozess, der emissionsarme, kostengünstige und innovative Prozessschritte für die Produktaufarbeitung ermöglicht. Dabei wird der Gesichtspunkt der Nachfrageflexibilität bei der elektrifizierten Aufarbeitung berücksichtigt. Daneben werden auch die Umweltauswirkungen des energieflexiblen Prozesses analysiert und mit dem konventionellen Herstellungsprozess verglichen. Kryogene Luftzerlegungsanlagen sind Prozesse zur industriellen Herstellung von Gasen wie Sauerstoff, Stickstoff und Argon. Da diese Prozesse fast vollständig elektrifiziert sind und einen hohen Energiebedarf aufweisen, sind sie interessant für die Nachfrageflexibilität. Insbesondere das im Prozess verflüssigte und gespeicherte kalte Gas kann hierbei als inhärenter Energiespeicher eingesetzt werden. Auch lassen sich solche Anlagen wie große Batterien nutzen und ihr Energiebedarf zeitweise drastisch auf bis zu 20 Prozent der

Normalleistung reduzieren. Gemeinsam mit dem Anlagenbauer und Gasproduzenten Linde GmbH entstanden Prozessautomatisierungsstrategien, um einen schnellen und effizienten Wechsel zwischen den Betriebspunkten zu ermöglichen. Insbesondere werden hierfür modellbasierte Regelungsstrategien entwickelt, die eine Echtzeitoptimierung der Anlage durchführen.^[10] Dabei werden auch hybride Modelle, eine Kombination von maschinellem Lernen und physikalischer Modellierung eingesetzt.

Design künftiger Strommärkte

Neben den industriellen Prozessen müssen sich sowohl das Stromnetz als auch der Strommarkt an den steigenden Anteil fluktuierender erneuerbaren Energien anpassen. Aktuell wird der Großhandelsstrompreis in Deutschland nach dem Einheitspreisprinzip bestimmt. Der Transport zu den örtlichen Verbrauchern wird in diesem Prinzip zunächst nicht berücksichtigt. Dabei werden keine örtlichen Unterschiede bei der Stromerzeugung und -verbrauch berücksichtigt, sodass es zu Übertragungsengpässen kommen kann. Aus diesem Grund müssen Übertragungsnetzbetreiber regelmäßig eine manuelle Anpassung durchführen, den sogenannten Redispatch, bei dem Stromerzeuger lokal zu- oder abgeschaltet werden. Die damit verbundenen Zusatzkosten werden auf die Stromverbraucher umgelegt. Im Projekt wird deshalb auch untersucht, wie der Strommarkt in Zukunft besser gestaltet werden kann, sodass die stetig steigenden Redispatchkosten reduziert oder vermieden werden können und eine Abregelung von erneuerbaren Energien umgangen werden kann. Dabei bringt die Aachener Verfahrenstechnik ihre Expertise in numerischer Optimierung ein, denn insbesondere bei örtlich verteilten strategischen Marktteilnehmenden führt die Aufgabenstellung des Marktdesigns zu mehrschichtigen Optimierungsproblemen.

Fazit

Der stetige Ausbau erneuerbarer Energien stellt die Energieinfrastruktur sowie die Industrie vor neue Herausforderungen und erfordert aktuell ein branchenübergreifendes Umdenken. Nachfrageflexibilität bietet hierbei ein Konzept, mit der große wie auch kleinere Stromverbraucher zu einer nachhaltigen und zuverlässigen Integration der erneuerbaren Energieformen in das europäische Stromnetz beitragen können und gleichzeitig von ökonomischen Vorteilen profitieren.

Das Kopernikus-Projekt SynErgie trägt mit einer breiten Kooperation aus Industrie, wissenschaftlichen Partnern und Zivilgesellschaft zu diesen Entwicklungen bei. Insbesondere auch die chemische Industrie ist hierbei mit einer Vielfalt an Forschungsthemen beteiligt.

Quellen

- [1] Mitsos, Asprion, Floudas, Bortz, Baldea, Bonvin, Caspari, Schäfer; Challenges in process optimization for new feedstocks and energy sources, Computers & Chemical Engineering, 2018
- [2] Burre, Bongartz, Brée, Roh, Mitsos; Power-to-X: Between Electricity Storage, e-Production, and Demand Side Management. Chemie Ingenieur Technik, 2020
- [3] Strobel, Fuhrländer-Völker, Weigold, Abele; Quantifying the Demand Response Potential of Inherent Energy Storages in Production Systems. Energies, 2020
- [4] VDI 5207 Blatt 1 – Energieflexible Fabrik. VDI-Richtlinie, 2020
- [5] Farhangi; The path of the smart grid. IEEE power and energy magazine, 2009
- [6] SynErgie-Website; <https://synergie-projekt.de/>
- [7] Sauer, Buhl, Mitsos, Weigold (Hrsg.); Energieflexibilität in der deutschen Industrie: Band 2. Fraunhofer Verlag, 2022. (Öffentlich zugänglich: <https://synergie-projekt.de/aus-synergie/downloads>)
- [8] Brée, Perrey, Bulan, Mitsos; Demand side management and operational mode switching in chlorine production. AIChE Journal, 2019
- [9] Gausmann, Kocks, Pastoors, Büchs, Wierckx, Jupke; Electrochemical pH-T-Swing Separation of Itaconic Acid for Zero Salt Waste Downstream Processing. ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 2021
- [10] Schulze, Caspari, Offermanns, Mhamdi, Mitsos; Nonlinear model predictive control of ultra-high-purity air separation units using transient wave propagation model, 2020

Autoren

Kristina Baitalow, M.Sc., ist wissenschaftliche Mitarbeiterin am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik.

Univ.-Prof. Alexander Mitsos, Ph.D., ist Inhaber des Lehrstuhls für Systemverfahrenstechnik.

Christian Schröder, M.Sc., ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik.

Jannik Lühje, M.Sc., und Jan Schulze, M.Sc., sind wissenschaftliche Mitarbeiter am Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik.



Foto: Peter Winandy

Rest- und Nebenströme zur Produktion von Plattformchemikalien

Bioraffinerieprozesse im Rheinischen Revier

In a sustainable circular economy, biorefinery processes play an important role. By upcycling side and waste streams to platform chemicals they can replace processes based on fossil resources and provide new business opportunities for companies in the food and feed sector. Consequently, they offer potential for industrial and economic growth in a sustainable way. However, due to technical and structural challenges biorefinery processes are yet rarely industrially established. This is why the project UpRePP (Upcycling of Residual Streams for the Production of Platform Chemicals) aims to overcome some of these challenges, bringing biorefinery applications one step closer to industrial implementation.

Für eine nachhaltige Wirtschaftsform muss gesellschaftlicher Wohlstand vom Ressourcenverbrauch entkoppelt werden. Dazu ist die Etablierung von neuen kreislauforientierten Prozessen und Produkten notwendig. Bestandteil einer solchen Kreislaufwirtschaft ist nicht nur das Recycling von bestehenden Wertstoffen, sondern auch die Herstellung von Wertprodukten aus nachwachsenden Rohstoffen. Insbesondere biobasierte Plattformchemikalien wie Carbonsäuren, Amine und Alkohole spielen hier eine zentrale Rolle. Sie können mikrobiell aus kohlenstoffhaltigen Substraten produziert werden und besitzen ein breites Anwendungsspektrum von der Herstellung von Bioplastik bis zum Einsatz als Säureregulator in der Lebensmittelindustrie.^[1] Um auf fossilen Rohstoffen basierende Produkte flächendeckend zu ersetzen, müssen Plattformchemikalien jedoch preiswert sein und in großen Mengen produziert werden können. Der Einkaufspreis der Ausgangssubstrate, wie beispielsweise Stärke und Zucker, ist aber vergleichsweise hoch, da diese auch in der Lebensmittelindustrie benötigt werden. In Kombination mit dem Entwicklungsrückstand zu auf fossilen Rohstoffen basierenden

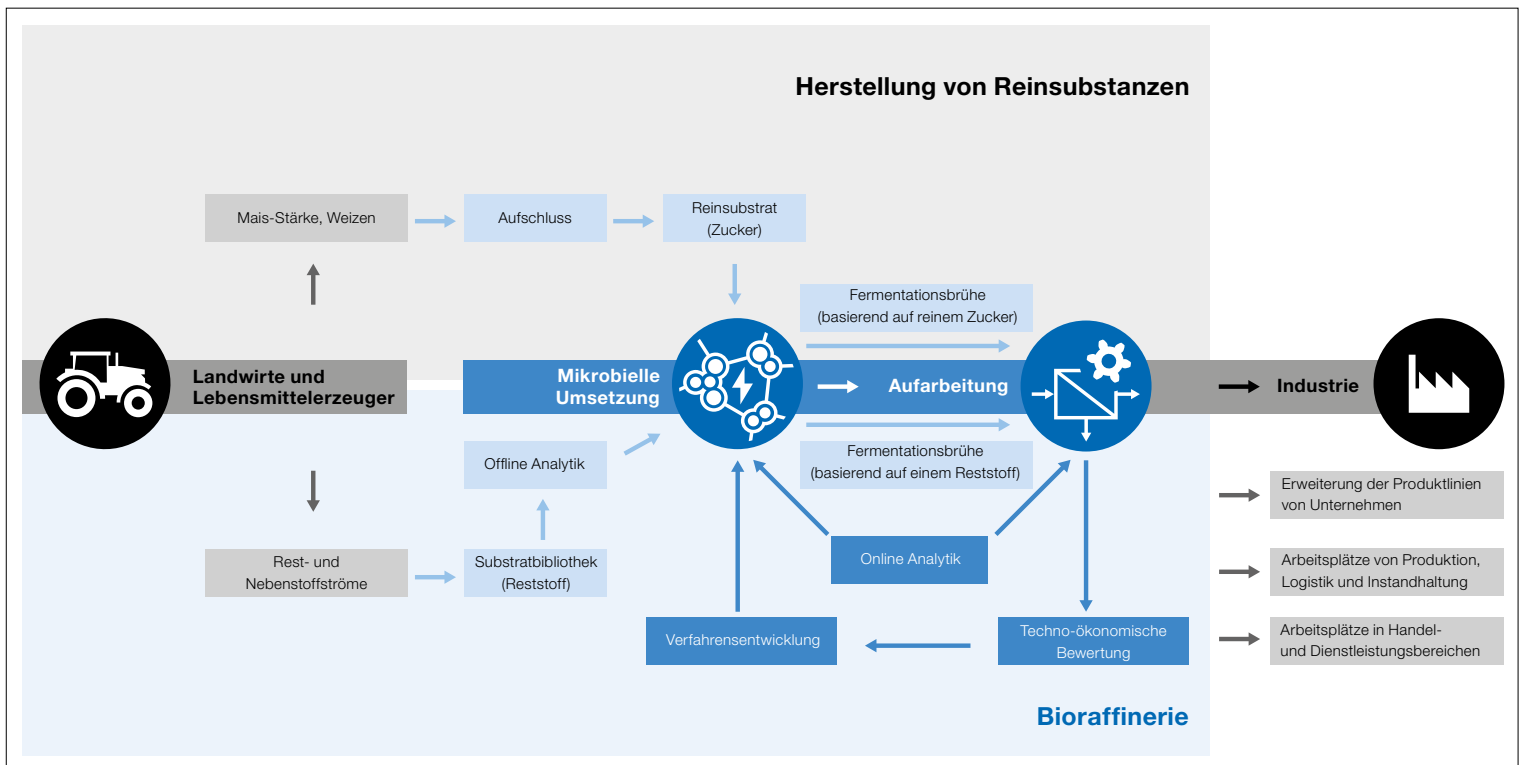


Bild 1: Vergleich einer Bioraffinerie mit der Herstellung von Plattformchemikalien aus Reinsubstraten mit den Anknüpfungspunkten des Projekts „Upcycling von Regionalen Reststoffströmen zur Produktion von Plattformchemikalien“, kurz UpRePP.

Prozessen sind viele Produktionsprozesse für Plattformchemikalien kaum wirtschaftlich.^[1] Eine Möglichkeit zur Verbesserung der Marktposition von biobasierten Chemikalien liegt im Aufbau von dezentralen Bioraffinerien. Statt Reinstoffsubstraten werden in Bioraffinerien lokale Rest- und Nebenstoffströme der Land- und Forstwirtschaft, aber auch der Lebensmittel- und Papierindustrie verwendet. Diese Rest- und Nebenströme werden derzeit hauptsächlich in der Futtermittelherstellung genutzt und sind häufig deutlich preiswerter als Reinstoffsubstrate. Dadurch, dass diese Ausgangssubstrate nicht im Lebensmittelbereich verwendet werden, ist eine hohe Substratverfügbarkeit für die Bioprozesse gegeben. Die biobasierten Chemikalien können dann zur Weiterverarbeitung an Unternehmen der Chemiebranche, aber auch der Verpackungs-, Medizin- und Lebensmittelindustrie verkauft werden. Lokale Betriebe erfahren durch die Implementierung einer Bioraffinerie oder den Weiterverkauf ihrer Rest- und Nebenströme eine Diversifizierung ihres Produktportfolios und einen Wettbewerbsvorteil. Demnach sind Bioraffinerien nicht nur eine Möglichkeit für eine nachhalti-

gere Wirtschaftsweise, sondern bieten Potenzial für industrielles und wirtschaftliches Wachstum.^[2]

Verbesserung der technischen Machbarkeit von Bioraffinerien

Bioraffinerieprozesse erfordern im Vergleich zu konventionellen Prozessen auf Basis von Reinstoffsubstraten einen zusätzlichen Entwicklungsaufwand und sind daher trotz ihres Potenzials bisher kaum in der Umsetzung. In den komplexen Substraten sind in oftmals variabler Zusammensetzung NebenkompONENTEN wie Salze, Aminosäuren, Carbonsäuren und Pigmente enthalten. Diese NebenkompONENTEN können sowohl die mikrobielle Umsetzung als auch die Produktreinheit stark beeinflussen und zusätzliche Prozessschritte notwendig machen. Daher müssen die Prozesse ganzheitlich entwickelt und auf die Reststoffströme abgestimmt werden, sodass die Vorteile einer lokalen Bioraffinerie die Nachteile in der aufwendigeren Verarbeitung aufwiegen. Um eine gleichbleibende Produktqualität zu gewährleisten, sind außerdem robuste Mess- und Regelungstechniken erforderlich.

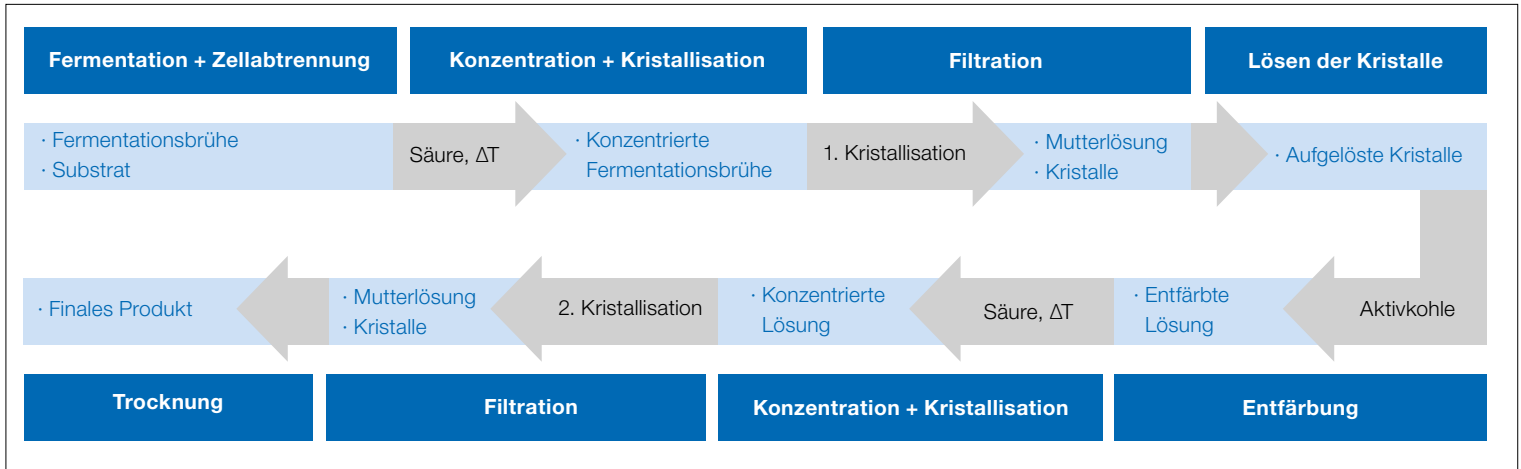


Bild 2: Aufarbeitung von Itaconsäure im Bioraffineriemaßstab

Diesen Herausforderungen begegnet das Projekt „Upcycling von Regionalen Reststoffströmen zur Produktion von Plattformchemikalien“, kurz UpRePP, durch eine interdisziplinäre Prozessentwicklung. Beginnend mit der Analytik und Molekularbiologie über die Fermentation bis hin zur Aufarbeitung werden Bioraffinerieprozesse für verschiedene Produkte etabliert. Richtungsweisend für die Forschung ist der potenzielle Transfer in die industrielle Anwendung. Daher wird für eine Abstimmung der Forschungsgruppen die Prozessentwicklung durch eine techno-ökonomische Analyse begleitet. So können zu Beginn die Haupteinflussgrößen auf die Prozesswirtschaftlichkeit identifiziert werden und die Forschung erfolgt mit Fokus auf einer effizienten und ressourcenschonenden Umsetzung der Substrate.

Dies allein ist jedoch für einen Transfer in den industriellen Maßstab nicht ausreichend. Für Unternehmen bedeutet der Wechsel zu biotechnologischen Prozessen ein hoher finanzieller Aufwand. Eine Möglichkeit, dieses Risiko zu senken, ist die Skalierung der Prozesse in den Pilotmaßstab. Daher werden

vielversprechende Prozesse in der Bioraffinerie der Aachener Verfahrenstechnik im Center for Next Generation Processes and Products (NGP²) in den 100 Litermaßstab gebracht.

Produktion von Itaconsäure

Die UpRePP-Arbeitsgruppen konnten diesen ganzheitlichen Ansatz bereits bei der Herstellung von Itaconsäure erfolgreich demonstrieren.^[3] Zu Beginn des Projekts wurden die Substrate analysiert, um NebenkompONENTEN zu identifizieren. Gleichzeitig wurde eine techno-ökonomische Analyse des Herstellprozesses auf Basis von Reinstoffsystemen angefertigt und frühzeitig wurden zwei wesentliche Kostentreiber identifiziert.

In vielen biotechnologischen Prozessen werden große Mengen an Hilfsstoffen eingesetzt, die nicht rückgewonnen werden und hohe Abwasser- und Abfallmengen verursachen. Insbesondere bei der Herstellung von Carbonsäuren tritt dieses Problem auf. Die Ursache liegt in den unterschiedlichen pH-Werten in der mikrobiellen Umsetzung und der Aufarbeitung. Wird bei neutralen pH-Werten fermentiert, verwendet man eine



Bild 3: Probenahme am Kristaller der NGP² Bioraffinerie
Foto: Peter Winandy

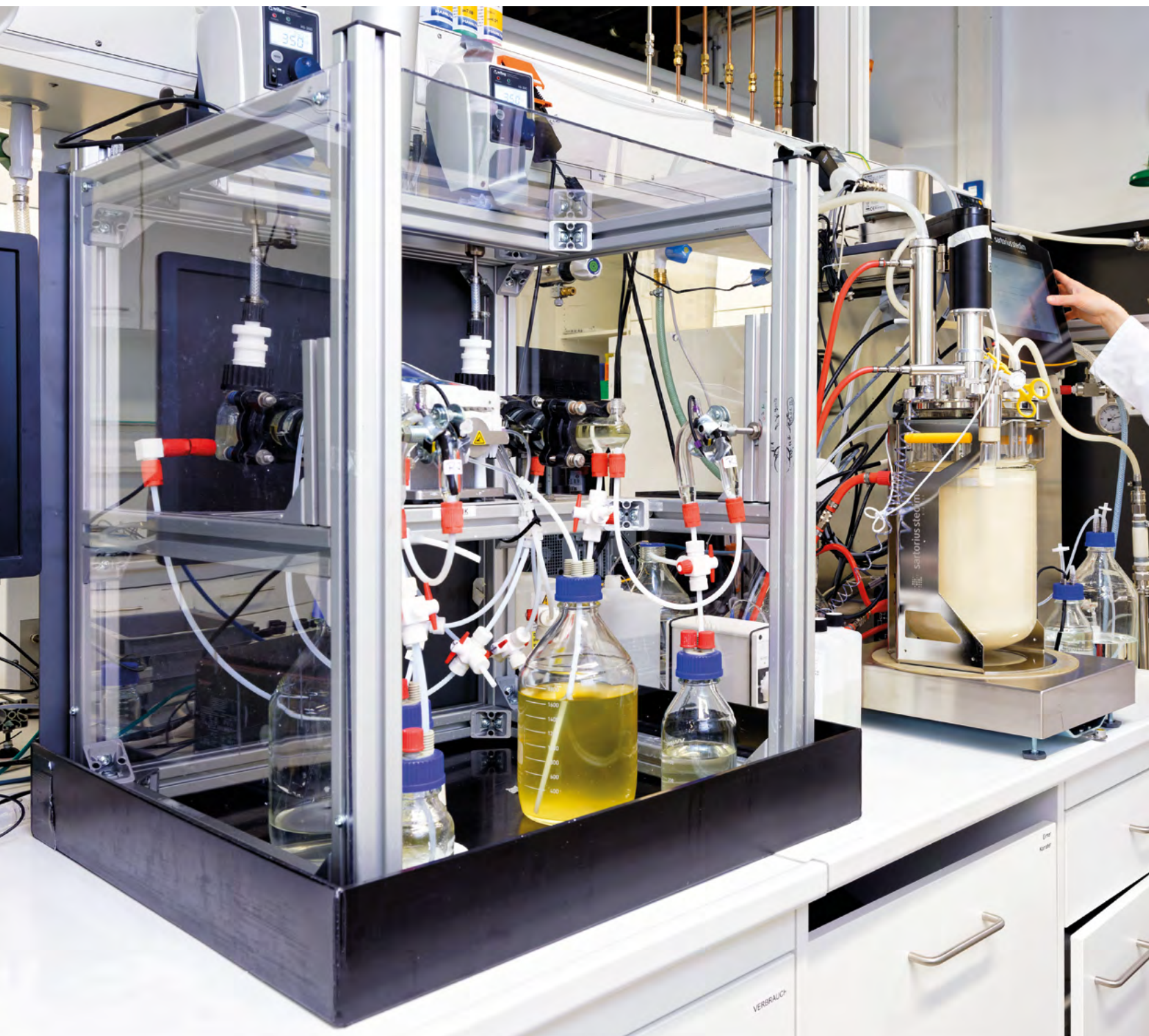


Bild 4: Direkte Kopplung von Fermentation und Aufarbeitung im Labormaßstab

Foto: Peter Winandy

Base als pH-Stellmittel, um den Effekt der Säuren auf den pH-Wert in der Fermentation auszugleichen. Jedoch muss der pH-Wert für die Aufarbeitung durch Hinzugabe von pH-Stellmitteln wiederum gesenkt werden.^[4] Dieses Salz muss kostenpflichtig entsorgt werden und verringert zudem die Ausbeute in der Aufarbeitung. Daher wurde ein Mikroorganismus entwickelt, der Itaconsäure bei niedrigen pH-Werten produziert^[5], sodass die notwendige Menge an pH-Stellmittel und

damit die anfallende Menge an Salz in der Aufarbeitung reduziert wird. Da der Organismus bei der Umsetzung komplexer Substrate eine deutlich niedrigere Aktivität zeigte, wurde auf Basis der Substratanalytik das Fermentationsprofil angepasst, um so eine höhere Produktivität zu erzielen. Der Entwicklungsprozess von Fermentation und Aufarbeitung wurde durch Online-Analytik gestützt. Diese gab detaillierte Informationen zum Prozessablauf und ermöglichte es,



Schwankungen in der Zusammensetzung der Substrate abzufangen. Im Anschluss erfolgte in der Bioraffinerie des NGP² eine Skalierung in den Pilotmaßstab, siehe Bild 2. Die Fallstudie zeigte außerdem, dass die Substrate der zweite wesentliche Kostentreiber neben Anschaffung und Transport zum Bestimmungsort sind. Aus diesem Grund ist für einen wettbewerbsfähigen Prozess eine hohe Produktausbeute erforderlich und eröffnet neue Forschungsfragestellungen. So

liegt eine Möglichkeit zur Verbesserung der Ausbeute in der prozesstechnischen Umgehung der Produktinhibition. Die Produktinhibition ist typisch für die biotechnologische Herstellung von organischen Säuren und Alkoholen. Ähnlich zur Weinherstellung stellen die Organismen die Produktion organischer Säuren ein, sobald eine kritische Konzentration erreicht ist. Für den Start eines neuen Prozesses müssen neue Mikroorganismen herangezogen werden, was zusätzliches Substrat erfordert, welches nicht für die Produktbildung zur Verfügung steht. Diese Herausforderung kann durch eine kontinuierliche Produktabtrennung vermieden werden, die kritische Konzentration wird nicht überschritten und die optimalen Betriebsbedingungen bleiben erhalten.^[6] Durch diese Kombination aus ganzheitlicher Prozessentwicklung, Skalierung und Entwicklung von neuen Technologien können Prozesse mit hohen Realisierungschancen entstehen.^[3] Daher wird der für Itaconsäure umgesetzte Ansatz derzeit auf weitere Moleküle wie α -Ketoglutarinsäure, Äpfelsäure und Erythrit übertragen.

Zukunftsregion Rheinisches Revier

Für eine auf das Rheinische Revier maßgeschneiderte Forschung fehlt noch eine Analyse von potenziell geeigneten Reststoffströmen, die in Bioraffinerien als Substrat eingesetzt werden können. Daher wird in enger Zusammenarbeit mit lokalen Unternehmen eine Substratbibliothek erstellt, in der Substrate hinsichtlich ihres Preises, ihrer Verfügbarkeit und ihrer Zusammensetzung hinterlegt werden. Auch die Größenordnung der Stoffströme ist von Bedeutung, da die Investmentkosten nicht linear mit der Größe der Anlage korrelieren.

Auf Basis dieser Substratbibliothek lassen sich zukünftig Projekte für relevante und lokal anfallende Reststoffströme planen. Durch die Kommunikation mit lokalen Firmen werden gleichzeitig Bedarfe identifiziert und auch finanzielle sowie räumliche Grenzen zur Etablierung der Bioprozesse abgesteckt. Diese regional vernetzte Forschung ermöglicht langfristig eine lokal maßgeschneiderte Prozessentwicklung und trägt dazu bei, dem Rheinischen Revier eine Vorreiterposition in der Bioökonomie zu verschaffen.

Quellen

- [1] Nova Institut. Roadmap for the Chemical Industry in Europe towards a Bioeconomy: Strategy Document. <https://roadtobio.eu/>
- [2] BMBF Nationale Bioökonomiestrategie, https://www.bmbf.de/bmbf/de/forschung/energiewende-und-nachhaltiges-wirtschaften/biooekonomie/biooekonomie_node.html
- [3] Saur, K., Kiefel, R., Niehoff, P., et al, Publication in preparation: Holistic Approach to process design an scale-up for itaconic acid production on complex substrates, Bioengineering, 2023
- [4] Gausmann, M., Kocks, C., Pastoors, J., Büchs, J., Wierckx, N., Jupke, A., Electrochemical pH-T-Swing Separation of Itaconic Acid for Zero Salt Waste Downstream Processing, ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 2021;9(28):9336-9347, DOI:10.1021/acssuschemeng.1c02194
- [5] Hosseinpour Tehrani, H., Saur, K., Tharmasothirajan, A., Blank, LM, Wierckx, N., Process engineering of pH tolerant *Ustilago cynodontis* for efficient itaconic acid production. Microbial Cell Factories, 2019;18(1):213, DOI:10.1186/s12934-019-1266-y
- [6] Kreyenschulte, D., Heyman, B., Eggert, A., et al, In situ reactive extraction of itaconic acid during fermentation of *Aspergillus terreus*. Biochemical engineering journal, 2018;135:133-141, DOI:10.1016/j.bej.2018.04.014

Autoren

Katharina Saur, M.Sc., und Christina Krekel, M.Sc., sind wissenschaftliche Mitarbeiterinnen am Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik. Luca Grebe, M.Sc, ist wissenschaftliche Mitarbeiterin am Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik. Jordy Hofstede, M.Sc., und Dr.-Ing. Jörn Viell sind wissenschaftliche Mitarbeiter am Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Jochen Büchs ist Inhaber des Lehrstuhls für Bioverfahrenstechnik. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Jupke ist Inhaber des Lehrstuhls für Fluidverfahrenstechnik.

Recycling als Rohstoffquelle

Die Entwicklung innovativer Trennverfahren ebnet den Weg zur Kreislaufwirtschaft

The circular economy approach aims at keeping material streams within the economic loop while minimizing material streams discharged at landfills. Sustainable recycling processes producing high-quality material are required to manufacture products on a similar technological level as the recycled products. This challenge is also being addressed at the departments of Aachen Chemical Engineering (AVT) by developing and optimizing separation processes for the recycling of diverse materials, such as plastics, rare earth metals and lithium-ion batteries using experimental and numerical methods. Through close collaboration with relevant stakeholders from industry, the implementation of research results is accelerated.

Nachhaltiges Wirtschaften ist nur möglich, wenn Güter am Ende Ihrer Nutzungsphase so recycelt werden, dass sie für die Produktion gleichwertiger Güter wieder zur Verfügung stehen. Dies ist der zentrale Gedanke des Prinzips der Kreislaufwirtschaft. Vor diesem Hintergrund werden an der Aachener Verfahrenstechnik umfassende Recyclingprozesse für diverse Kunststoffe, seltene Erden und Lithium-Ionen-Batterien entwickelt. So unterschiedlich diese Stoffe sind, so unterschiedlich sind auch die Herausforderungen in den jeweiligen Recyclingprozessen. Innovative Trenntechniken helfen, das Prinzip der Kreislaufwirtschaft in weiten Teilen der Wirtschaft zu ermöglichen.

Pyrolyse und Chemolyse

In den letzten Jahrzehnten wurde ein starker Anstieg der eingesetzten Menge an Polyurethan (PU)-Dämmmaterialien beobachtet. Bei einer mittleren Nutzungsdauer von 20 Jahren muss in den nächsten zehn bis 30 Jahren mit sehr viel PU-Abfall gerechnet werden. Daher ist es notwendig, Lösungen für die Sammlung, die Sortierung und das Recycling dieser

Materialien zu entwickeln und zu etablieren. Dieser Aufgabenstellung nimmt sich der Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik im Rahmen des Projektes „CIRCULAR FOAM – Systemic expansion of territorial CIRCULAR Ecosystems for end-of-life FOAM“ mit Förderung durch die Europäische Union an, wobei die Recyclingrouten Pyrolyse und Chemolyse zum Einsatz kommen.

Als Pyrolyse bezeichnet man die thermische Zersetzung von Materialien unter Ausschluss von Sauerstoff. Dabei ist der große Vorteil der Pyrolyse, dass Sie mit einer Reihe unterschiedlicher Materialien und Zusammensetzungen funktioniert, womit Sie eine Art „Recycling-Allzweckwaffe“ ist. Allerdings ist die Stoffumwandlung in der Pyrolyse nicht sehr spezifisch, wodurch das entstehende Pyrolyseöl aus einer Vielzahl an Komponenten besteht. Um wertvolle Plattformchemikalien wie beispielsweise Anilin aus einem solchen Gemisch zu gewinnen, sind Kenntnisse über Reinstoffparameter und Interaktionsweisen der Komponenten in der Mischung erforderlich. Daher wird an einer Methodik zur Bestimmung des thermodynamischen Verhaltens eines teil-



Bild 1: Fraktionen eines Batchdestillationsversuches
Foto: Peter Winandy



Bild 2: Im dem hier dargestellten Membranmodul sind mehrere Hohlfasern als Membranstützstruktur verbaut. Diese werden am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik mit Polyelektrolyten beschichtet, um die Trenneigenschaften der Membranhohlfasern für die Aufreinigung von Recyclingwasser von Lithium-Ionen Batterien anzupassen.

Foto: Peter Winandy

weise unbekannten Mehrstoffgemisches durch Batchrektifikation geforscht. Ziel ist es, einen für den Prozess geeigneten Satz an thermodynamischen Stoffdaten zu erzeugen, um großskalige Destillationsprozesse zuverlässig simulieren zu können und den Übertrag vom Labor- zum Industriemaßstab zu leisten. Im Gegensatz zur Pyrolyse ist die Chemolyse in der Lage, Polymere gezielt in die gewünschten Bausteine aufzuspalten. Die Anzahl an ungewollten Nebenkomponenten, die die weitere Aufreinigung erschweren, könnte so minimiert werden. Darüber hinaus ist im Vergleich mit anderen Recyclingverfahren eine deutliche Ausbeutesteigerung und höhere Rückgewinnungsrate an Material möglich. Die Aufreinigung des im Projekt hergestellten Chemolysegemisches ist herausfordernd, da das Zielprodukt pMDA (poly-4,4'-Diaminodiphenylmethan) mit einer hohen Reinheit gewonnen werden muss. Diese ist erforderlich, da das recycelte pMDA dem konventionellen Herstellungsprozess von Polyurethan als Drop-in hinzugefügt werden soll. Aufgrund des hohen Siedepunktes des Zielprodukts ist der Einsatz

eines destillativen Trennverfahrens nicht zielführend. Stattdessen beschäftigt sich der Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik mit dem Niedrigenergie-trennverfahren der Extraktion. Um ein Prozessdesign und Scale-up für das im Labormaßstab entwickelte Trennverfahren durchzuführen, wird zuvor das thermodynamische Verhalten des Stoffsystems untersucht und ein Proof of Concept auf Laborskala erbracht.

Enzymatisches Recycling und Upcycling

Etwa ein Drittel des in Deutschland eingesetzten Kunststoffs findet in Verpackungen Verwendung. Um die Vorteile verschiedener Kunststoffe, beispielsweise gute Barriere- oder Stabilitätseigenschaften, zu verbinden, werden oft Verbundfolien aus mehreren Kunststoffen hergestellt. Häufig sind dies Verbünde aus Polyethylen (PE) und Polyethylenterephthalat (PET), die zum jetzigen Stand kaum recyclebar sind. Innovative Lösungen für das Recycling von Verbundkunststoffen und Kunststoffmischung werden im Rahmen des Projekts „MIXed plastics biodegradation and UPcycling

using microbial communities“, kurz MIX-UP, mit Förderung durch die Europäische Union, und des BioSC-Projekts „Solvent swelling to enhance enzymatic and microbial plastics upcycling“, kurz SSWEEP, entwickelt. Bei letzterem soll am Beispiel von Folien aus Polyethylen/Polyethylenterephthalat ein Prozess entwickelt werden, der mit Hilfe eines geeigneten organischen Lösungsmittels zunächst das Polyethylen selektiv auflöst und so für weitere Recyclingschritte zugänglich macht. Am Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik werden dazu aus einer Datenbank von mehreren tausend Lösungsmitteln die vielversprechendsten Kandidaten mit Hilfe quantenchemischer Modellierung maßgeschneidert ausgewählt und deren prozessbezogenes Verhalten experimentell validiert. Gleichzeitig wird das als Feststoff verbleibende Polyethylenterephthalat durch das Institut für Biotechnologie der RWTH und das Institut für Bio- und Geowissenschaften – Biotechnologie des Forschungszentrum Jülich enzymatisch zersetzt und direkt mikrobiell zu Polyhydroxyalkanoaten upgecycelt. Dieses Material kann dann



Bild 3: In einem Scheidetrichter werden durch Gleichgewichtsversuche thermodynamische Daten für die Extraktion ermittelt.
Foto: Peter Winandy



Bild 4: Durch gezielte Anpassung von Prozessparametern können Scandiumsalkristalle kontrolliert wachsen.

Foto: Peter Winandy

beispielsweise bei Lebensmittelverpackungen oder in der Medizintechnik eingesetzt werden und ist zudem biologisch abbaubar.

Wertschöpfungskreislauf für biologisch abbaubare Polyester

Während das Sammeln von Kunststoffabfällen in Deutschland und in den meisten Teilen Europas exzellent ist, wird ein Großteil des gesammelten Plastiks nicht recycelt, sondern mit zweifelhafter Bestimmung nach Südostasien exportiert. Schätzungen gehen davon aus, dass zwischen 5,8 und 12,7 Millionen Tonnen Plastik jährlich in die Weltmeere gelan-

gen. Eine mögliche Lösung für dieses Problem ist der Einsatz von biologisch abbaubaren Kunststoffen. Im Rahmen des BioSC-Projekts „BioPlastiCycle“ erfolgt gemeinsam mit Partnern die Bündelung der interdisziplinären Kompetenzen. Das Ziel ist die Entwicklung eines vollständigen und nachhaltigen Wertschöpfungskreislaufs für das etablierte Polylactid (PLA). Dazu gehören die biobasierte Produktion und Aufreinigung von Monomeren, eine modellbasierte umweltfreundliche Polymerisation und die Optimierung von Polymereigenschaften für eine verbesserte biologische Abbaubarkeit, biologisches und



chemisches Recycling der resultierenden Biokunststoffe sowie eine Bewertung der ökonomischen und ökologischen Auswirkungen dieser Materialien.

Recycling von seltenen Erden

Seltene Erden sind vielseitig einsetzbar und werden unter anderem in Smartphones verwendet. Aber auch in Stahl und Aluminiumlegierungen verstärken sie das Material. Dies ist besonders in der Luft- und Raumfahrt von Vorteil, da stärkeres Material leichtere Bauteile ermöglicht. Allerdings sind viele seltene Erden in Europa nur begrenzt verfügbar und müssen

importiert werden. Um eine übermäßige wirtschaftliche Abhängigkeit zu vermeiden und gleichzeitig nachhaltiger zu wirtschaften, bieten sich alternative Prozessrouten, wie die Gewinnung seltener Erden aus Abwasserströmen der Aluminiumproduktion an. Unter anderem liegt dort Scandium vor, das mithilfe einer Fällungskristallisation als Scandiumfluorsalz gewonnen werden kann. Damit dieser Prozess in einem größeren industriellen Maßstab durchführbar ist, ist es wichtig, den Fällungsprozess so zu kontrollieren, dass die entstehenden Scandiumsalzkristalle genug wachsen und schließlich eine einfache Fest-Flüssig-Trennung durch Filtration möglich wird. Im Projekt „ScAnKri – Entwicklung und Auslegung einer Antisolvent Kristallisation“ wird mit Prozesssimulationen und Experimenten ein Verständnis über die Kristallisationsphänomene erreicht. Darauf aufbauend sind maßgeschneiderte Qualitätsanforderungen zu erfüllen. Durch gezieltes Wachstum der Salzkristalle lässt sich Scandiumsalz in einer stark aufgereinigten Form gewinnen.

Lithium für die E-Mobilität

Lithium-Ionen-Batterien können recycled werden. Dazu müssen diese zunächst zerkleinert werden, wodurch das Anoden- und Kathodenmaterial, die sogenannte Schwarzmasse, freiliegt. Die darin enthaltenen Metalle, insbesondere Cobalt, Nickel und Lithium, werden zugänglich gemacht, indem die Schwarzmasse in starken Säuren aufgelöst wird. Aus dieser sauren Lösung können die verschiedenen Metalle anschließend durch Fällung als Feststoffe zurückgewonnen werden. Dabei wird Lithium als letztes aus einer Lösung mit vielen Verunreinigungen gefällt, was eine besondere Herausforderung darstellt.

Im Projekt „AURRELIA – Optimierung nasser Aufbereitungstechniken zur Rückgewinnung recyclingfähiger Fraktionen aus Lithium-Alt-Batterien“ erforschen die Lehrstühle für Fluidverfahrenstechnik und für Chemische Verfahrenstechnik gemeinsam mit ihren Partnern, unter anderem dem RWTH-Institut für Metallurgische Prozesstechnik und Metallrecycling, eine alternative Recyclingroute. Dazu wird das Lithium bereits während der Zerkleinerung der Lithium-Ionen-Batterien ausgewaschen und eine frühzeitige Separation des Lithiums von den anderen Metallen erreicht. Die Rückgewinnung des Lithiums aus diesem Prozessstrom wird näher untersucht. Zielsetzung ist, Lithium in hoher Reinheit zu erhalten, damit es für die Produktion von neuen Lithium-Ionen-Batterien verwendet werden kann.

Am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik werden Membranen beschichtet, um die selektive Abtrennung von Verunreinigungen zu erreichen. Über elektrochemische Membranverfahren wird das Lithium in der Folge aufkonzentriert. Am Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik wird die Rückgewinnung des Lithiums aus der konzentrierten Lösung durch selektive Fällung untersucht. Während der Fällung reagiert Lithium mit Kohlenstoffdioxid zum Produkt Lithiumcarbonat. Das klimaschädliche Treibhausgas Kohlenstoffdioxid wird dabei im Feststoff Lithiumcarbonat gebunden. Durch die Untersuchung der thermodynamischen Phänomene wird ein detailliertes Prozessverständnis geschaffen, was den Übertrag der Erkenntnisse auf einen breiten Batterie-Materialmix ermöglicht.

Die Aachener Verfahrenstechnik leistet einen Beitrag zur Transformation der Wirtschaft von linearen Rohstoffketten hin zu kreislaufbasierten Materialströmen. Innovative Verfahren und eine ganzheitliche Betrachtung von Prozessen sind dabei von zentraler Bedeutung. Auch die Übertragung der Forschungsergebnisse in die industrielle Umsetzung steht im Fokus. Der Scale-up der entwickelten Recyclingprozesse vom Labormaßstab in den Technikummaßstab findet im hauseigenen Technikum statt.

Autoren

Kerstin Brökelmann, M.Sc., ist wissenschaftliche Mitarbeiterin am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik.

Niclas Conen, M.Sc., Henning Gröschl, M.Sc., Kristina Mielke, M.Sc., Stephan Musholt, M.Sc., und Josia Tonn, M.Sc., sind wissenschaftliche Mitarbeitende am Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik.

Mit nachhaltigen Prozessen zu umweltfreundlichen Produkten

Nachwachsende Rohstoffe und neue Prozesse zur Polymersynthese

Next-generation products often involve advanced polymer materials. Polymers are versatile materials that provide a broad spectrum of properties and application fields for everyday life. Most polymers originate from fossil-based resources with limited recyclability. Furthermore, conventional production and manufacturing processes involve harmful additional materials along the production chain. Hence, to enable sustainable polymers in our everyday life, new production processes that employ sustainable and environmentally friendly synthesis routes within a circular economy need to be established.

Towards this goal, we highlight two projects at the AVT: 1) bio-based raw materials for bio-polymer production and 2) sustainable membrane production processes for molecular separation technologies. In the first project, we present a novel production process to create bio-based monomers for the development of biopolymers. This process realizes the production of the monomer FDCA from fructose in an integrated biphasic production process. The second project deals with the sustainable production of synthetic polymer membranes. Membrane technology is known as a resource- and energy-efficient separation technology. However, the current membrane production process utilizes additional materials and solvents, which are harmful to health and environment. To solve such hurdles, we develop novel green production process alternatives and water-based techniques.

Polymere stecken in fast allen Produkten, von Verpackungen wie Folien oder Flaschen über Haushaltsgegenstände, Smartphones und Elektronikgeräte bis hin zu Autos oder Flugzeugen. Der Begriff „Polymer“ ist zusammengesetzt aus dem griechischen „poly“ für mehrere und „méros“ für Teil und beschreibt die chemische Natur von Polymeren, die vernetzte Strukturen aus vielen Einzelteilen, sogenannten Monomeren, sind. Bei der Zusammensetzung der Einzelteile durch die Polymerisation können sowohl gleichartige als auch verschiedenartige Monomere verbunden werden, in der Regel in sich gleichmäßig wiederholenden Abfolgen. Die Eigenschaften dieser Polymere sind dann mehr als nur das Zusammenspiel der Eigenschaften der einzelnen Monomere, sondern werden zusätzlich durch Länge sowie Art der Verbindung und Weitervernetzung bestimmt. So kommen schnell einzelne Moleküle, die aus mehreren Millionen Atomen bestehen, zusammen. Polymere finden sich übrigens auch überall in

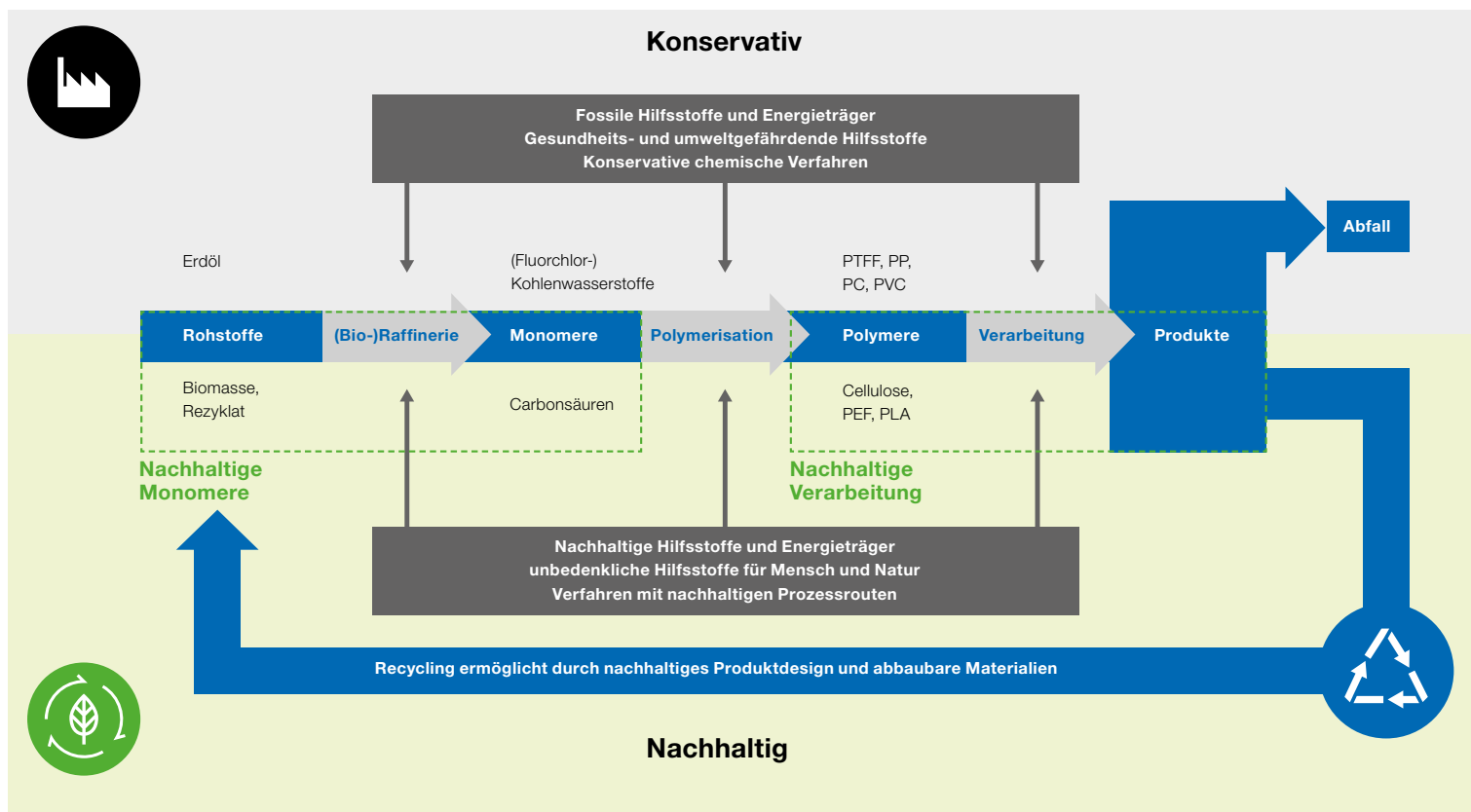


Bild 1: Der Lebenszyklus von Polymerprodukten in der konservativen, linearen Polymerwirtschaft basierend auf erdölbasierten Polymeren (oben). Im Gegensatz dazu ein nachhaltiger, biomassebasierter Polymerlebenszyklus, bei dem Produkte am Ende ihrer Nutzungsdauer durch angepasstes Produktdesign und abbaubare Materialien wieder in den Kreislauf zurückgeführt werden können (unten).

der Natur. Zellulose, der Hauptbestandteil von Zellwänden in Pflanzen, aber auch die DNA im menschlichen Körper sowie das Kollagen in Haaren oder Haut sind Polymere. Die meisten Polymere, ob natürlich vorkommend oder synthetisch hergestellt, bestehen hauptsächlich aus Kohlenstoffatomen. Bei industriell hergestellten Polymeren stammt der Kohlenstoff in der Regel aus fossilen Kohlenstoffquellen, aus Erdöl oder Kohle. Polyethylenterephthalat, kurz PET, ist ein weit verbreitetes Polymer für Flaschen oder Verpackungsmaterialien und basiert auf Rohbenzin, einem Produkt der Erdölraffinerie. Auch die in der Produktion eingesetzte Energie kommt aus fossilen Brennstoffen. Zusätzlich werden für die Herstellung von Polymeren eine Vielzahl von teils umweltschädlichen, toxischen, kanzerogenen oder fortpflanzungsschädlichen Stoffen wie Chloroform, Dimethylformamid oder NMP eingesetzt. Auch werden Polymere oft mit Begleitstoffen wie Weichmachern versetzt, die teils vergleichbare Ge-

fahren bergen. Die damit verbundenen Umweltbelastungen bestehen aufgrund der etablierten chemischen- und Prozessstrukturen, da die Herstellungsverfahren meist vor vielen Jahren konzipiert und etabliert wurden, als Umweltgesetzgebung und Arbeitsschutz noch keinen so hohen Stellenwert hatten. Die meisten Polymere werden außerdem in großen Mengen hergestellt und verarbeitet, sodass eine Umstellung der Produktionsprozesse auf nachhaltigere Produkte für die Unternehmen mit hohen Risiken und Investitionen verbunden ist. Für eine nachhaltige Polymerwirtschaft müssen

- die Monomere aus regenerativen Quellen, wie Biomasse, Recyclingmaterial oder CO₂ aus Abgasen oder zukünftig aus der Luft hergestellt werden;
- die im Polymerisations- und Produktionsprozess eingesetzte Energie aus erneuerbaren Energiequellen stammen und die verwendeten Hilfsstoffe dürfen keine Belastung für Umwelt und Menschen sein;

- die Abbaubarkeit oder das Recycling der Polymere schon bei der Entwicklung bedacht werden, damit die Kunststoffe von heute nicht weiter zur wachsenden Verschmutzung der Umwelt mit Plastikabfällen beitragen.

Zur Synthese von nachhaltigen Polymeren und der Verarbeitung von Hochleistungspolymeren zu Membranen arbeiten die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler der Aachener Verfahrenstechnik in folgenden Projekten:

Nachhaltige Monomere für die Polymerproduktion

Biobasierte Monomere und daraus produzierte Polymere gibt es bereits auf dem Markt, dort fristen sie aber bisher ein Nischendasein. Um das zu ändern, wird ein Syntheseverfahren für ein neues biobasiertes Monomer, sogenannte 2,5-Furandicarbonsäure (FDCA), entwickelt, das schließlich zu Polyethylenfuranat (PEF) polymerisiert werden kann. PEF

hat dann vergleichbare Eigenschaften wie PET und ist auch schon als PET-Ersatz im Einsatz. Coca-Cola nutzt in den USA bereits Flaschen, die aus PEF bestehen. Erforscht wird nun eine Alternative zu dem etablierten chemo-katalytischen Produktionsprozess von FDCA für PEF unter Einsatz erneuerbarer Energien und biobasierter Lösemittel mit geringer Auswirkung auf die Umwelt. Um FDCA zu produzieren, wird in einem ersten Schritt Biomasse zu Fruktose aufbereitet. Die Fruktose wird dann mittels einer säurekatalysierten Hydrierung zu Hydroximethylfurfural (HMF) umgewandelt. Da das HMF nicht besonders stabil ist, muss es noch in diesem Prozess mit einem Lösemittel extrahiert werden. Dafür kann das Lösemittel 2-Methyltetrahydrofuran (2-MTHF) eingesetzt werden, das ebenfalls aus Biomasse gewonnen wird und geringere Auswirkungen auf die Umwelt als vergleichbare Lösemittel hat.

Das so gewonnene HMF wird dann elektrochemisch zu FDCA verarbeitet. Elektrochemie hat gegenüber konventionellen Prozessen den Vorteil, dass Reaktionen mit elektrischer Energie angetrieben werden. Wenn diese Prozesse variabel betrieben werden, können sie zusätzlich dazu beitragen, das fluktuierende Angebot von Strom aus erneuerbaren Energien abzufedern und optimal auszunutzen. Auch kommen elektrochemische Reaktionen normalerweise ohne zusätzliche Lösemittel aus, weil sie meist in wässrigen Lösungen stattfinden. Da Strom die Triebkraft hinter den Prozessen ist, können sie ferner bei moderaten Temperaturen und Umgebungsdruck stattfinden, was die

Prozesskontrolle erleichtert und das Gefährdungspotenzial senkt. All diese Vorteile gibt es auch in der elektrochemischen Synthese von FDCA aus HMF, die in wässriger Lösung bei Raumtemperatur und atmosphärischem Druck stattfindet. Die enge Verknüpfung der beiden Reaktionsschritte zeichnet die Aachener Forschung aus, die nicht nur einen, sondern eine ganze Kaskade von Reaktionsschritten analysiert. Dadurch kann festgestellt werden, ob eine zwischenzeitliche Aufreinigung des HMFs umgangen werden kann, sodass sich das gelöste Produkt direkt im elektrochemischen Reaktor einsetzen lässt. Abschließend kann das synthetisierte FDCA als weißes Pulver auskristallisieren und als Monomer genutzt oder zu PEF polymerisiert werden.

Nachhaltige Verarbeitungsprozesse

In einem weiteren Projekt produziert der Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik aus Hochleistungspolymeren fortschrittliche Produkte wie synthetische Membranen. Eine Membran stellt eine semipermeable Barriere dar, die molekularen Stofftransport kontrolliert und die selektive Trennung von Molekülen ermöglicht – vereinfacht gesagt funktioniert sie wie ein Sieb auf molekularer Ebene. Im technischen Bereich sind Membranen oft mikroporöse Strukturen aus synthetischen Kunststoffen, die weitverbreitet in industriellen Prozessen zur Abtrennung von Komponenten aus Stoffgemischen eingesetzt werden. Konkrete Einsatzmöglichkeiten von Membranen umfassen dabei die Abwasser- und Trinkwasseraufbereitung, Gastrennung, medizinische

Anwendungen zur Unterstützung von Nieren- und Lungenversagen, die Reinigung von biopharmazeutischen Produkten und viele weitere.

Der Großteil dieser Anwendungsszenarien verfolgt nachhaltige Ziele und im Vergleich zu konventionellen Trennprozessen ist Membrantechnologie ressourcenschonend mit einem reduzierten Energiebedarf. Jedoch besteht das Dilemma, dass Membranen für nachhaltige Zwecke aktuell durch Verarbeitungsprozesse erzeugt werden, in welchen hochgradig gesundheits- und umweltschädliche Hilfsstoffe benötigt werden. Darüber hinaus stammen die eingesetzten konventionellen Kunststoffmaterialien aus fossilen Rohstoffen und haben ein geringes Recyclingpotenzial. Aus den genannten Gründen werden gesundheitlich und ökologisch unbedenkliche Herstellungsprozesse für nachhaltige Membranen erforscht.

Bei den Hilfsstoffen zur Membranherstellung handelt es sich insbesondere um reprotoxische, krebserregende und umweltgefährliche organische Lösungsmittel, wie Dimethylformamid (DMF) oder N-Methyl-2-pyrrolidon (NMP). Neue Herstellungsverfahren zur Substitution dieser Lösungsmittel basieren auf dem Einsatz von grünen Lösungsmitteln oder dem vollständigen Ersatz durch wasserbasierte Syntheserouten. Eine Forschergruppe konnte eine solche wasserbasierte Syntheseroute durch die Erschließung neuer Membranmaterialien realisieren. Eine Veröffentlichung und ein Patent^[1] beschreiben den Einsatz unterschiedlich geladener Polyelektrolyte zur Herstellung mikroporöser Membranen durch

einen wasserbasierten Phasentrennungsprozess für Nano- und Ultrafiltration. Neben Einschränkungen der Nachhaltigkeit bei der Membranherstellung bestimmt das sogenannte Membranfouling die Lebensdauer und die Produktivität von Membranen in Filtrationsanwendungen. Insbesondere verursachen ungünstige Konzentrationsprofile sowie die Ablagerung der zurückgehaltenen Komponenten auf der Membranoberfläche das Membranfouling. Um diese Beschränkungen zu eliminieren, soll hocheffizientes, langlebiges und grünes Membransystem basierend auf drei Kerntechnologien entwickelt werden. Diese Kerntechnologien umfassen 1) eine hydrophile Oberflächenmodifikation durch neuartige, wasserbasierte und hochleistungsfähige Mikrogel-Antifouling-Oberflächenchemie, 2) die Integration von Misch-elementen in eine Hohlfasermembranen ohne zusätzlichen Aufwand in der Produktion und 3) ein neuartiges und nachhaltiges Membranmaterial. Die einzelnen Technologien sind in verschiedenen wissenschaftlichen Veröffentlichungen und Patenten berichtet. Darüber hinaus soll das Membransystem durch das Gründungsvorhaben „GreenTwist Membranes“ kommerzialisiert werden. Das Team konnte bereits eine Förderung beim Innovation Sprint 2022 der RWTH erzielen.

Literatur

- [1] Paper: DOI: 10.1016/j.memsci.2020.118632 und Patent: <https://worldwide.espacenet.com/patent/search/family/071069706/publication/EP3919163A1?q=kamp%20emonds>
- [2] Roth, H., Grosskurth, J., Kather, M., Pich, A., Wolff, H., Wessling, M., Membrane system, method for its manufacture and its use, EP19203626 (2019)
- [3] Roth, H., Grosskurth, J., Kather, M., Pich, A., Wolff, H., Wessling, M., Membrane system, method for its manufacture and its use, EP19203626 (2019)
- [4] Tepper, M., Walski, J., Wessling, M., Membrane system, spinneret for manufacturing the membrane system, device including the spinneret and method for forming the membrane system, EP19203629 (2019)
- [5] 10.1016/j.memsci.2022.120599

Autoren

Tobias Harhues, M.Sc., war wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik.

Maik Tepper, M.Sc., war Gruppenleiter Membranentwicklung am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik.

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Matthias Wessling ist Inhaber des Lehrstuhls für Chemische Verfahrenstechnik.

Interdisziplinäre Forschung – das Erfolgsrezept zur Entwicklung nachhaltiger biobasierter Prozesse

Technologien und Prozesse für die nachhaltige Bioökonomie

A goal of the Aachener Verfahrenstechnik is to create new value chains for a sustainable bioeconomy starting from plant-based biomass. Sustainable production of, e.g. healthy food, renewable products, and climate-neutral energy carriers is crucial for a successful bioeconomy. At the Aachener Verfahrenstechnik researchers from different fields of process engineering work together to develop and combine technologies for biomass pretreatment, fermentation, separation and purification strategies. Techno-economic evaluations help choose the most economically viable options. Eventually, the research biorefinery at NGP2 allows the scale up of the bioprocesses to accelerate the increase of technological readiness.

Klimawandel, knapper werdende Ressourcen und eine wachsende Weltbevölkerung sind große Herausforderungen. Um diesen begegnen zu können, muss ein Umdenken hin zu nachhaltigem Handeln und Wirtschaften stattfinden. Die Vereinten Nationen verabschiedeten daher 2015 die „Agenda 2030“, in der Zielsetzungen und Maßnahmen für eine nachhaltige Entwicklung formuliert sind, welche bis zum Jahr 2030 erreicht werden sollen. Die RWTH Aachen, die Universitäten Bonn und Düsseldorf sowie das Forschungszentrum Jülich erkannten die Notwendigkeiten und Potenziale der Bioökonomie früh. Bereits im Herbst 2010 wurde der Gründungsvertrag zum „Bioeconomy Science Center“, kurz BioSC, unterzeichnet. Hier kooperieren aktuell 70 Institute und Arbeitsgruppen der vier Einrichtungen aus den Natur-, Agrar-, Ingenieur-, Wirtschafts- und Sozialwissenschaften in einem systemorientierten Ansatz von der Grundlagenforschung bis hin zur Demonstration und Anwendung. Das Land Nordrhein-Westfalen fördert die Zusammenarbeit seit 2013.

Ein Ziel der Aachener Verfahrenstechnik im Bereich der Bioökonomie ist die Schaffung neuer, von pflanzlicher Biomasse ausgehender Wertschöpfungsketten. Die Entwicklung moderner, biobasierter Herstellungsverfahren für hochwertige Produkte und klimaneutrale Energieträger steht dabei im Fokus. Im BioSC kann die Wertschöpfungskette von der Stammentwicklung, der Fermentation bis zur Aufarbeitungsstrategie bearbeitet und abgestimmt werden. Eine begleitende techno-ökonomische Bewertung der Verfahrensoptionen lässt die Auswahl der jeweils wirtschaftlichsten Variante zu. Um einen hohen Technologiereifegrad zu erzielen, werden Prozesse in der Bioraffinerie des Centers for Next Generation Processes and Products (NGP²) auf den Technologiereifegrad 6 bis 7 gebracht. Die Technologieplattformen des Lehrstuhls für Bioverfahrenstechnik bieten Online-Monitoringtechnologien in Mikrotiterplatten („µTOM“ und „BioLector“-Technologie) und für Schüttelkolben („RAMOS“ und „VIMOS“). Durch eine Kopplung dieser Technologien mit modernster teilweise vollautomatisierter



Bild 1: Forschende bei der Prozessentwicklung zur Nutzung landwirtschaftlicher Restströme für die fermentative Produktion von mikrobiellen Ölen als nachhaltigen Palmölersatz.
Foto: Peter Winandy



Bild 2: Digitales Leitsystem zur Remote Prozessüberwachung und -steuerung eines vollautomatisierten Druckreaktors

Foto: Peter Winandy

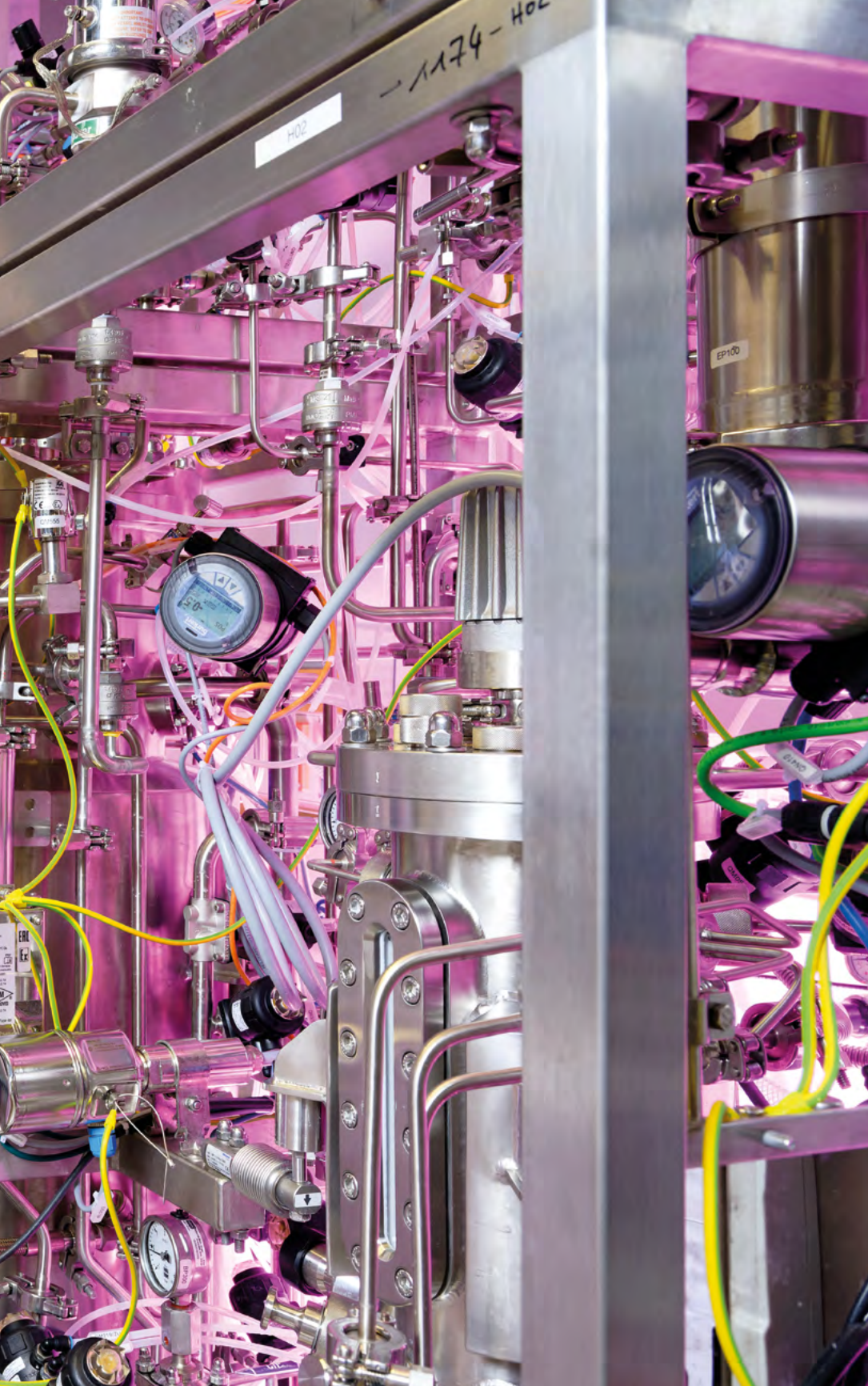
Kultivierungstechnologie wie Induktionsprofilerstellung, Temperaturprofilerstellung, Fütterungsstrategien kann eine schnelle Prozessoptimierung und Validierung im Zwischenmaßstab erfolgen. Aufgrund der verfahrenstechnischen Charakterisierung der Prozesse im kleinen Maßstab kann ein rationales Scale-up von der Mikrotiterplatte bis zum 150-Liter-Druck-Fermenter (≤ 11 bar abs.) erfolgen.

Die Forschung des Lehrstuhls für Fluidverfahrenstechnik arbeitet an Verfahren, die

nachwachsender Rohstoffe nutzen. Da biotechnologische Synthesen meist in wässrigen Flüssigphasenprozessen durchgeführt werden, führt dies zu einem erhöhten Bedarf von Trenntechniken aus den Bereichen der Extraktion, Kristallisation und Chromatographie. Mit den Trenntechniken werden auch die Auswirkungen von Begleitkomponenten sowie grundlegende Phänomene der Trennprozesse untersucht.

Der Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik hat eine langjährige Expertise im

Bereich von Membranverfahren und setzt diese für eine energieeffiziente Trennung von Flüssig- und Gasgemischen ein, wie sie in Bioraffinerieprozessen anfallen. Weiterhin kann mit dichten Membranen eine blasenfreie Begasung von biotechnologischen Fermenter erzielt werden. Ein Fokus sind elektrochemische Konversionen, welche in Bioraffinerien vielfältig einsetzbar sind. Diese werden im Vergleich zu etablierten chemischen Konversionen nicht über erhöhten Druck und Temperatur getrieben, sondern über nach-



haltig erzeugten elektrischen Strom. Der Lehrstuhl für Soft Matter Process Engineering erforscht funktionale Materialien auf Biopolymerbasis, insbesondere von Proteinen und Polysacchariden aus nachhaltigen Rohstoffen. Die Labore sind mit modernen Analysewerkzeugen und -verfahren ausgestattet, um Oberflächeneigenschaften oder intermolekulare Wechselwirkungen der Materialien zu untersuchen. Zur Analyse werden hochauflösende Spektroskopie-, Lichtstreuungs-, Rheologie- und Bildgebungsverfahren

genutzt. Mit Hilfe von Casein, einem Milchprotein, wurden so Mikropartikel entwickelt, die zur Verkapselung bioaktiver Substanzen in der Lebensmittel- und Pharmaindustrie eingesetzt werden. Auch sind calciumreiche regenerierte Caseinfasern entstanden, die als Rohstoff für faserige Lebensmittelprodukte, Gewebegerüste oder biologisch abbaubare Fasern für die Textilindustrie genutzt werden. Die Verknüpfung der Technologien und Technologieentwicklungen einschließlich der Skalierbarkeit von Prozessen in größere

Maßstäbe mit disziplinübergreifenden, systemorientierten Forschungsansätzen im BioSC führte bereits in verschiedenen Projekten zum Erfolg. Ziel im FocusLab Bio² „Integration of next generation biosurfactant production into biorefinery processes“ war ein wettbewerbsfähiger Bioraffinerieprozess zur Produktion von biobasierten Tensiden. Tenside sind oberflächenaktive Substanzen und somit Bestandteile von Waschmittel, Kosmetik oder industriellen Prozessen. Die meisten Tenside werden aus fossilen Rohstoffen hergestellt. Eine nachhaltige Alternative ist die mikrobielle Produktion von Biotensiden, da sie im Gegensatz zu chemischen Verfahren keine hohen Prozesstemperaturen und -drücke erfordert und neben Zuckern auch alternative Kohlenstoffquellen wie Cellulose aus nachwachsenden Rohstoffen nutzen kann. Im Projekt wurde ein Prozess zur Produktion von Biotensiden mithilfe von Bakterien und Pilzen entwickelt. Neue Rohstoffquellen wurden erschlossen, Ausbeuten erhöht und neue Kultivierungskonzepte und analytische Methoden sind entstanden. Eine technologische Weiterentwicklung zum blasenfreien Begasen konnte als Start-up „BioThrust“ ausgegründet werden. Durch den diffusiven Gaseintrag werden Blasen und somit Schaum sowie chemische Antischaummittel gänzlich vermieden. Dadurch ergeben sich einige Vorteile:

- Die verwendeten Reaktoren können komplett mit Fermentationsbrühe gefüllt werden, da kein Raum für den entstehenden Schaum vorgehalten werden muss. Die Produktionskapazität nimmt daher zu.
- Durch die Vermeidung von chemischen Antischaummitteln wird die Aufreinigung der Biotenside stark vereinfacht. Die patentierten Membranmodule wurden mit Kooperationspartnern getestet und erreichten den zweiten Platz des RWTH-Innovation Award 2021.



Bild 3: Öffnung des Sperrventils zum Start der CIP- und SIP- (Cleaning und Sterilisation in Place)- Prozesse für die Vorbereitung des Druckreaktors vor einer Fermentation.

Foto: Peter Winandy

Darüber hinaus wird BioThrust durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz im Rahmen von EXIST gefördert. Seit 2022 als GmbH geführt, will BioThrust die Begasung von Bioreaktoren revolutionieren. Zwei Produktreihen werden entwickelt: Membranrührer, die an Membranmodule gekoppelt sind und 3D-gedruckte, hochporöse Begasungsringe. Ferner wird Technologie an die Anforderungen tierischer Zellen für die Produktion moderner Biopharmazeutika adaptiert.

Auch das Projekt „Surface Active Biomolecules for the Chemical Industry“, kurz Surfln, entstand aus „Bio²“. Hier werden mikrobiologische Produktionsprozesse für die Biotense Liamocin und Serrawettin W1 erforscht, die im Pflanzenschutz und für biobasierte Polymere zum Einsatz kommen. Für die Prozesse werden zunächst die Organismen *Aureobasidium pullulans* und *Pseudomonas putida* in einer Fed-Batch-Fermentation mit einer membranbasierten In-situ-Produktabtrennung kultiviert und anschließend chromatographisch aufgereinigt. Beide Entwicklungen finden simultan und in räumlicher Nähe im NGP² statt, die Pilotierung der Prozesse erfolgt in der NGP²-Bioraffinerie. Das Projekt „Production of a sustainable and tailor-made microbial palm oil substitute from agricultural residues“, kurz NextVegOil, will mikrobielle Ölproduktion aus landwirtschaftlichen Reststoffen ermöglichen. Diese Öle, die Triglyceride, können unter anderem als Ersatz für das weltweit häufig genutzte Palmöl verwendet werden. Dessen Produktion ist bedenklich, da in den Erzeugerländern in Südostasien Regenwald für die Monokulturen gerodet wird, ein Verlust der Biodiversität und hohe CO₂-Emissionen sind die Folge. Daher werden Stämme des Pilzes *Ustilago maydis* für die Triglyceridproduktion getestet. Diese nutzen Maisstroh als Rohstoff und werden

mittels einer am Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik entwickelten Fed-Batch-Fermentation kultiviert. Die mikrobiellen Triglyceride werden unter anderem beim Start-up „FORMO“ auf die Eignung zur Herstellung von veganem Käse untersucht. Führende Unternehmen der Lebensmittel- und chemischen Industrie unterstützen das Projekt.

Weitere Produkte einer nachhaltigen Bioökonomie sind Plattformchemikalien wie Ethanol oder pharmazeutische Wirkstoffe beispielsweise Metaraminol. Im FocusLab „Hybrid Processes for Important Precursor and Active Pharmaceutical Ingredients“, kurz HylmPAc, entstanden nachhaltige Produktionsprozesse. Die Kombination biologischer und chemischer Transformationen mit Trennverfahren ermöglichte die effiziente Herstellung von hochpreisigen Wirkstoffen wie Metaraminol. Durch die Zusammenarbeit des Lehrstuhls für Fluidverfahrenstechnik und des Instituts für Bio- und Geowissenschaften am Forschungszentrum Jülich konnte ein integrierter Produktionsprozess zur nachhaltigen Synthese von Metaraminol erreicht werden, der eine enzymatische Transformation mit einer In-situ-Extraktion zur integrierten Produktabtrennung koppelt. Das Extraktionssystem zeichnet sich durch hohe Leistung und Nachhaltigkeit aus und steigert die Produktausbeute auf bis zu 70 Prozent. Die Erkenntnisse werden nun im Folgeprojekt „Continuous, stable processes for the sustainable enzymatic production of chiral amino alcohols integrating downstream processing“, kurz MetaProcess, genutzt, um die Produktion in einen größeren Maßstab zu überführen und die Umsetzbarkeit in einen industriellen Maßstab zu prüfen.



www.biosc.de

Autoren

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Jochen Büchs war bis März 2023 Inhaber des Lehrstuhls für Bioverfahrenstechnik.

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Jörgen Magnus ist Inhaber des Lehrstuhls für Bioverfahrenstechnik.

Max Dicke, M.Sc., Dipl.-Ing. Robert Dinger und Paul Richter, M.Sc., sind wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik.

Moritz Doeker, M.Sc., ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Bio- und Geowissenschaften im Forschungszentrum Jülich.

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Jupke ist Inhaber des Lehrstuhls für Fluidverfahrenstechnik.

Dr.-Ing. Robert Keller ist wissenschaftlicher Mitarbeiter und Forschungsgruppenleiter am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik.

Fokus

Datenwissenschaften

Maschinelles Lernen, Hybride Modellierung und
Digitale Zwillinge als Forschungsschwerpunkte

Machine Learning methods play an increasingly important role in process engineering when it comes to the optimal design and stable operation of plants and processes via digital twins. This evolution is accelerated by the availability of ever-increasing amounts of data, major advances in machine learning, and automated experimentation. In contrast to traditional mechanistic models, data-driven models do not require detailed system knowledge and in many cases allow for faster computations. Hybrid modeling approaches combine the best of both worlds by reducing the amount of data required by leveraging partially known mechanistic knowledge. Aachener Verfahrenstechnik has therefore identified Machine Learning, Hybrid Modeling, and Digital Twins as research priorities.

Mathematische Modelle sind seit Jahrzehnten Grundlage für die Auslegung und den Betrieb verfahrenstechnischer Prozesse. In der Vergangenheit waren dies überwiegend mechanistische Modelle. Diese stoßen jedoch an Grenzen, wenn geeignete konstitutive Gleichungen fehlen oder ausgeprägte Ortsabhängigkeiten sehr rechenintensive Simulationen bedingen. Die zunehmend automatisierte Erzeugung immer größerer (heterogener) Datenmengen und Fortschritte beim Maschinellen Lernen führen zu einem steigenden Interesse an datenwissenschaftlichen Methoden. Diese ermöglichen die prädiktive Modellierung von Zusammenhängen zwischen vielen Ein- und Ausgangsgrößen, die für eine mechanistische Modellierung nicht gut genug verstanden sind und oft durch eine stark nichtlineare Charakteristik geprägt sind. Gleichzeitig spielt das Maschinelle Lernen für die automatische Extraktion von Informationen aus den akquirierten Datenmengen eine immer wichtigere Rolle.

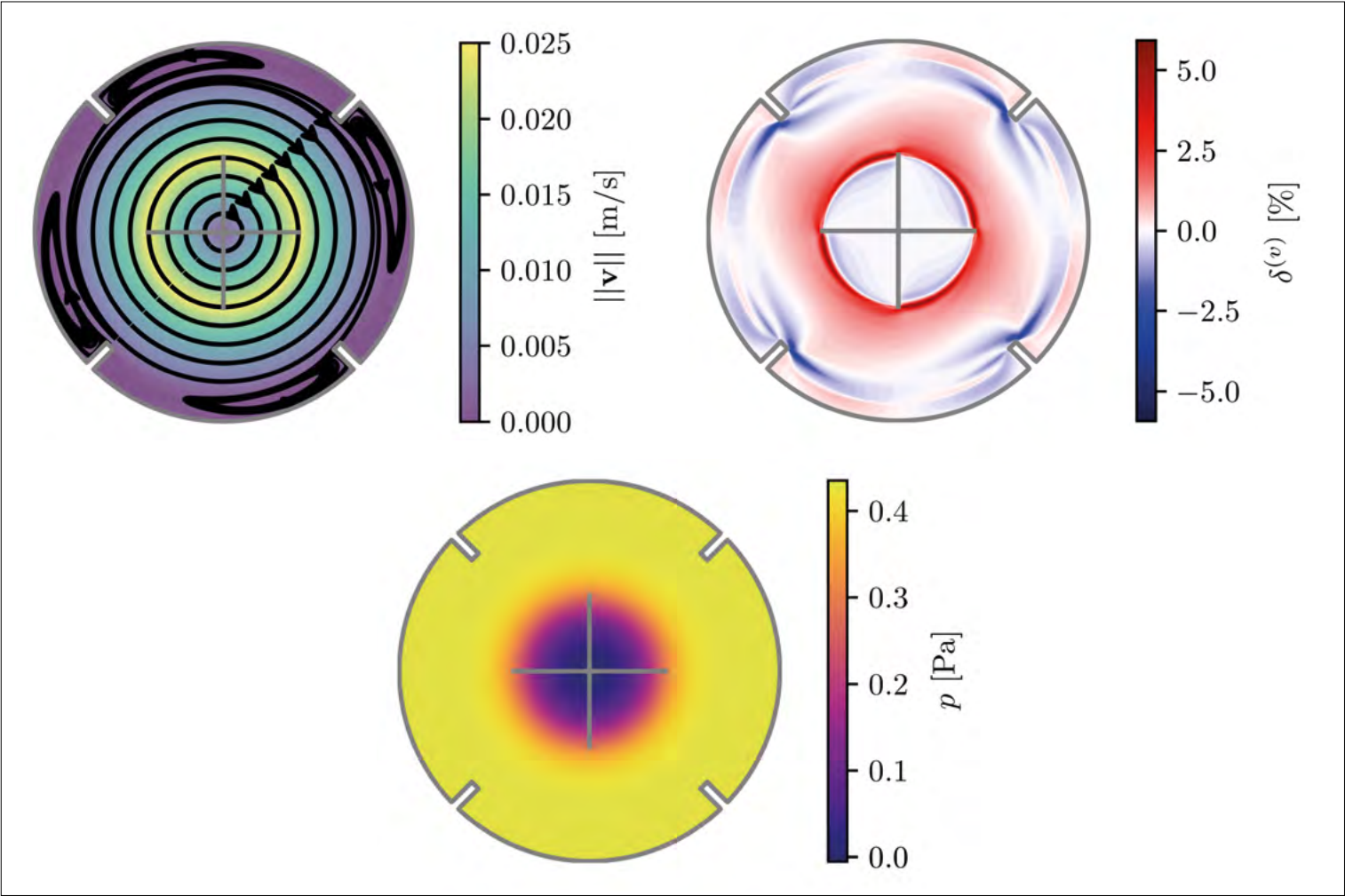


Bild 1: Auswertung eines Physik-informierten neuronalen Netzes (PINN) zur Vorhersage des Strömungsfeldes in einem Bioreaktor: Geschwindigkeitsfeld mit Stromlinien (links), prozentualer Geschwindigkeitsfehler zu einer numerischen Referenzlösung (rechts) und Druckfeld (unten). Grafik: V. Travnikova, D. Wolff, M. Behr, CATS, 2022

Innerhalb des interdisziplinären Gebietes der Datenwissenschaften fokussiert die Aachener Verfahrenstechnik ihre Forschung auf die drei Themen Maschinelles Lernen, Hybride Modellierung und Digitale Zwillinge.

Maschinelles Lernen

Dem Maschinellen Lernen (ML) kommt eine ähnlich große Bedeutung zu wie bisher der numerischen Simulation. Dabei beschränkt sich die Aachener Verfahrenstechnik nicht auf Anwendungen von etablierten Methoden, sondern treibt methodische Weiterentwicklungen an den Schnittstellen des Maschinellen Lernens und der Optimierung sowie Laborautomatisierung voran. Dies erfolgt in Kooperation mit Expertinnen und Experten aus der Mathematik und der Informatik. Auf der Anwendungsseite liegt ein Schwerpunkt in der prädiktiven Modellierung unzureichend verstandener Mechanismen. Von großem Interesse ist der Einsatz sogenannter graphischer neuronaler Netze, kurz GNN,

einer jungen Variante tiefer neuronaler Netze, kurz DNN für Deep Neural Networks, für die Verarbeitung von Daten, die eine Repräsentation als Graphen erlauben. Der Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik kooperiert hier mit dem Lehrstuhl für Informatik 7 (Logik und Theorie diskreter Systeme). Es konnte gezeigt werden, dass GNN das Lernen einer Vielzahl von Moleküleigenschaften, beispielweise Cetan-/Oktanzen und Aktivitätskoeffizienten, ermöglichen und im Vergleich zu etablierten Methoden ebenbürtige oder bessere Vorhersagegenauigkeit liefern. Auch werden GNN mit generativen neuronalen Netzen und Optimierungsverfahren verknüpft, um Moleküle mit gewünschten Eigenschaften zu finden. Ein weiteres Beispiel für nicht ausreichend verstandene Mechanismen ist das Fluten von Kolonnen, welches am Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik mit ML-Methoden analysiert und prädiktiv modelliert wird. ML-Verfahren gewinnen außerdem für die Analyse und Automatisierung von Laborex-

perimenten an Bedeutung. Der Lehrstuhl für Computational Systems Biotechnology kombiniert DNN, mit statistischen Lernverfahren. So sind bei der Lebendzell-Mikroskopie detaillierte Einsichten in die Entwicklung einzelner Zellen möglich. Mikroskopische Zeitraffer-Bilddaten mikrobieller Zellkulturen werden dabei mittels DNN-Methoden segmentiert und klassifiziert, um den Lebenszyklus sowie das Teilungsverhalten der beobachteten Zellen über der Zeit zu verfolgen. Die Kombination aus ML-basierter Datenauswertung und Laborautomatisierung führt zu relativ großen Datenmengen, die Grundlage für das Training datengetriebener Modelle sind. Eine besondere Rolle spielen ML-Ersatzmodelle, wie sie der Lehrstuhl für Computational Systems Biotechnology für die Versuchsplanung bei Hochdurchsatz-Experimenten auf Laborrobotern einsetzt. Ersatzmodelle auf Basis neuronaler Netze und Gaußscher Prozesse sind besonders geeignet, um rechenintensive, nichtlineare Prozessmodelle

zu approximieren, insbesondere, wenn diese in größere Optimierungen eingebettet werden sollen. Hierzu entwickelt der Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik das quelloffene Softwarepaket MeLOn, welches das Training von neuronalen Netzen, Gaußschen Prozessen und weiteren ML-Modellen für die Verwendung in MAiNGO, einem ebenfalls hausintern entwickelten deterministischen globalen Löser, erlaubt. MAiNGO ist zudem effizient im Lösen von Optimierungsproblemen mit eingebetteten ML-Modellen.

Hybride Modellierung

Trotz großer Fortschritte im experimentellen Bereich bleibt die Verfügbarkeit ausreichend großer Datenmengen für ML in einer Vielzahl von Forschungsfragestellungen eine Herausforderung. Zudem können rein datengetriebene Modelle in aller Regel nicht extrapolieren und führen häufig zu physikalisch inkonsistenten Vorhersagen voneinander abhängiger Größen. Wenn zumindest teilweise fundiertes mechanistisches Wissen vorliegt, können hybride mechanistisch-datengetriebene Modelle diese Probleme überwinden. Die Aachener Verfahrenstechnik blickt in der Hybriden Modellierung auf eine lange Historie zurück. DNN-Methoden haben in den letzten Jahren auch hier neue Anwendungsfelder erschlossen.

Die Lehrstühle für Chemische Verfahrenstechnik und Systemverfahrenstechnik entwickelten ein Hybrides Modell für das Design von Ionentrennmembranen und konnten damit neue Erkenntnisse über den Einfluss

von Herstellungsbedingungen auf Membraneigenschaften erlangen. Hybride Prozessmodelle, die mechanistische Komponentenmodelle mit ML-basierten Ersatzmodellen kombinieren, sind am Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik Grundlage für kombinierte Auslegungs- und Betriebsoptimierungen, beispielsweise von Prozessen zur Gewinnung von Elektrizität aus geothermalen Fluiden. Der am Lehrstuhl für Computational Systems Biotechnology entstandene quelloffene Prozesssimulator CADET verbindet in der Chromatographie mechanistische Modelle für den Stofftransport mit ML-Methoden zur Beschreibung des Adsorptionsverhaltens komplexer Moleküle. Hier liegen die Herausforderungen im Training von datengetriebenen Modellen, die in partielle Differentialgleichungsmodelle eingebettet sind. Physik-informierte neuronale Netze (PINN) sind DNN-Modelle, die mit einer zusätzlichen Regularisierung auf Basis mechanistischer Modellgleichungen trainiert werden. Der Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik und das Institut für Energie- und Klimaforschung – Energiesystemtechnik am Forschungszentrum Jülich arbeiten in einem Projekt mit Förderung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft zum Einsatz von PINN zur Vorhersage von Dispersionsschichthöhen in Schwerkraftabsetzern. Der Lehrstuhl für Computational Systems Biotechnology setzt PINN zusammen mit dem Lehrstuhl für computergestützte Analyse technischer Systeme (CATS) für die Bioreaktormodellierung ein, siehe Bild 1.

Digitale Zwillinge

Wenn prädiktive Modelle eines realen Systems bidirektional Daten mit diesem System austauschen, spricht man von einem Digitalen Zwilling, kurz DT für Digital Twin. DT eignen sich insbesondere für den automatisierten Betrieb von Prozessen oder Laboranlagen, sie stellen hohe Ansprüche an Echtzeitdatenerfassung und -verarbeitung und beinhalten häufig datengetriebene Modellanteile. Digitale Zwillinge wurden entsprechend als ein Thema von besonderer Relevanz an der Schnittstelle Datenwissenschaften/Verfahrenstechnik identifiziert, das zukünftig auch in der Helmholtz School for Data Science in Life, Earth, and Energy (HDS-LEE) beforscht wird.

DT werden beispielsweise für die wissensbasierte Entwicklung von biotechnologischen Verfahren in Kombination mit hochauflösender Messtechnik entwickelt. Sie werden ebenso für die Echtzeitbetriebsoptimierung stromintensiver verfahrenstechnischer Anlagen zwecks Lastverschiebung benötigt. Angesichts der sich abzeichnenden direkten und indirekten Elektrifizierung von Prozessen wird dieses Thema, besonders in Hinblick auf die angestrebte Treibhausgasneutralität und Unabhängigkeit von fossilen Brennstoffen Relevanz bekommen. Großes Potenzial besitzen DT auch in der Laborautomatisierung, insbesondere im Umfeld von Hochdurchsatzexperimenten, wie sie der Lehrstuhl für Computational Systems Biotechnology betreibt. Hier werden zur Steuerung von Laborrobotern vollautomatisierte Workflows für die Erfassung und modellbasierte Auswertung von

Messdaten sowie für die autonome Entscheidungsfindung auf Basis prädiktiver Modelle benötigt. DT-Werkzeuge spielen auch in anderen Domänen eine große Rolle. Beispielsweise haben sich der Lehrstuhl für Computational Systems Biotechnology und das Institut für Energie- und Klimaforschung – Energiesystemtechnik am Forschungszentrum Jülich im Zuge der COVID-19-Pandemie einem Konsortium unter Führung von Professor Michael Meyer-Hermann vom Helmholtz-Zentrum für Infektionsforschung in Braunschweig angeschlossen. Hier bringen sie ihre Expertise und Werkzeuge zur Parameterschätzung, Unsicherheitsanalyse und dynamischen Optimierung ein. Gesundheitsämtern sollen mittels eines DT der Bevölkerung modellbasierte Entscheidungshilfen an die Hand gegeben werden.

Ausbildung, Vernetzung und Transfer

Entsprechend der Bedeutung der Datenwissenschaften wurden in den vergangenen Jahren Projekte und Kooperationen initiiert, um Absolventinnen und Absolventen die erforderlichen Kompetenzen zu vermitteln und die Vernetzung zu intensivieren. Hierzu gehören die Helmholtz Graduiertenschule HDS-LEE und das DFG-Schwerpunktprogramm „Machine Learning in Chemical Engineering“. Mit Etablierung des JARA Center for Simulation and Data Science konnte die Region Aachen/Jülich ihr Profil in diesem Bereich stärken.

Zudem wird eine umfangreiche Open-Source- und Open-Access-Strategie verfolgt, um den Transfer und die Reproduzierbarkeit von

Forschungsergebnissen zu gewährleisten. So werden die Quellcodes großer wissenschaftlicher Softwarepakete wie CADET, MAiNGO, DyOS und MeLOn und begleitend zu Publikationen in Fachzeitschriften Daten, Modelle und Quellcodes, vorzugsweise im Git Repository der RWTH, veröffentlicht. Das Thema Forschungsdatenmanagement wird auch durch das Spin-off FURTHResearch aufgegriffen, das innovative Softwarelösungen entwickelt und vertreibt.

Autoren

Dr.-Ing. Manuel Dahmen ist Abteilungsleiter am Institut für Energie- und Klimaforschung – Energiesystemtechnik im Forschungszentrum Jülich.

Dr.-Ing. Eric von Lieres ist Abteilungsleiter, Dr.rer.nat. Katharina Nöh ist Teamleiterin am Institut für Bio- und Geowissenschaften – Biotechnologie im Forschungszentrum Jülich. Univ.-Prof. Alexander Mitsos, Ph.D., ist Inhaber des RWTH-Lehrstuhls für Systemverfahrenstechnik und Direktor des Instituts für Energie- und Klimaforschung – Energiesystemtechnik im Forschungszentrum Jülich. Univ.-Prof. Dr.rer.nat. Wolfgang Wiechert ist Inhaber des RWTH-Lehrstuhls für Computational Systems Biotechnology und Direktor des Instituts für Bio- und Geowissenschaften – Biotechnologie im Forschungszentrum Jülich.

Sauberes Trinkwasser

Neue Methoden der Wasseraufbereitung

Water is undoubtedly the most valuable substance in the world. We need water for drinking, food supply, agriculture, and for hygiene in everyday life. Yet, water shortage and increasing rates of water pollution are threatening more and more regions of the world. The primary concern for providing drinking water is the emergence of organic micropollutants, which are highly mobile and persistent that cannot be removed during conventional treatment processes. Pharmaceuticals, such as antibiotics, constitute one significant portion of micropollutants in water. Additionally, inorganic pollutants accompany organic pollutants in water. Some inorganic contaminants, such as heavy metals, must be completely removed from the water, and the concentration of other ions should be reduced to 0.6-0.9 g/L for drinking water. Hence, a novel combination of technologies and new engineering designs is required to efficiently remove organic and inorganic pollution in water. More importantly, the next generation of water treatment technologies should not pose any environmental risks and primarily utilize green electricity for a sustainable future. At AVT and at our Center for Next Generation Processes and Products (NGP²) we design materials, modules, and processes based on electrochemical techniques to remove organic and inorganic pollutants. New treatment processes can be powered by green electricity, requiring no addition of chemicals.



Wasser ist zweifellos der wertvollste Stoff der Welt. Der Mensch kann ohne Wasser nicht leben. Wir brauchen Wasser zum Trinken, für die Lebensmittelversorgung, die Landwirtschaft und für die Hygiene im Alltag. Dabei bedroht der Mangel und die zunehmende Verschmutzung an verwertbarem Trinkwasser immer mehr Regionen der Welt. Auch die Generalversammlung der Vereinten Nationen hat erklärt, dass sauberes Trinkwasser und sanitäre Einrichtungen für die Verwirklichung aller Menschenrechte unerlässlich sind. Daraus ergeben sich Konflikte, da sauberes Wasser weltweit nicht gut verteilt ist. Wasserknappheit ist in den meisten Regionen zu einer kritischen Herausforderung geworden. Gründe für den Wassermangel und die zunehmende Verschmutzung liegen im Bevölkerungs- und Wohlstandswachstums, der



Bild 1: Vom gelben Abwasser zum klaren Wasser: Das EfectroH2O-Verfahren im Labor.
Foto: Peter Winandy

damit verbundenen Abwässer aus Städten, Industrie und der Landwirtschaft und der globalen Erwärmung. So gelangen beispielsweise die meisten Arzneimittel in großen Mengen in die Gewässer. Nur ein kleiner Anteil der Medikamente kann vom menschlichen Körper aufgenommen werden, der Rest gelangt ins Abwasser. Solche Arzneimittel gehören meist der Gruppe persistenter Schadstoffe an, können also nicht auf natürlichem Weg schnell abgebaut werden. Im Wasser werden sie dann in sehr geringen Konzentrationen von etwa einem milliardstel Gramm pro Liter als Mikroverunreinigungen bezeichnet. Neben den Mikroverunreinigungen enthalten die Gewässer auch anorganische salzartige Verunreinigungen oder Schwermetalle, die entfernt werden müssen. Bei der Wasserversorgung aus salzhaltigen Wässern ist die

Konzentration von Salzen teilweise extrem hoch. So liegt der Wert für Meerwasser im Bereich von 33 bis zu 37 Gramm pro Liter, und muss für Trinkwasser auf 0,6 bis 0,9 Gramm pro Liter gesenkt werden. Je nach Wasserbeschaffenheit müssen also Technologien zur Entsalzung eingesetzt werden. Die Kombination der beiden Verfahren Entsalzung und Entfernung von Mikroverunreinigungen ist ein immer wichtiger werdender Schritt für die Bereitstellung von sauberem Trinkwasser. Am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik werden neuartige Adsorptions- und Entsalzungstechnologien erforscht, die Wasserqualität soll unter minimalem Energieverbrauch deutlich verbessert werden.

Entsalzung und Salz-Wiederverwendung

Für die Entsalzung von Wasser stehen aktuell viele Verfahren technisch zur Verfügung. Dabei haben Membranverfahren die thermischen Verfahren weitestgehend abgelöst und damit den Energieverbrauch dieses Prozesses deutlich gesenkt. Das bekannteste Membranverfahren ist die Umkehrosmose, bei der unspezifisch alle Salze aus dem Wasser gesiebt werden. Neue Entwicklungen nutzen für die Entsalzung die Eigenschaft der Ionen, dass diese eine elektrische Ladung besitzen und sich in einem elektrischen Feld trennen lassen. Gerade für geringe Salzkonzentrationen kann durch die elektrische Entsalzung weiter Energie eingespart werden. Die Kapazitive Deionisierung, kurz CDI für Capacitive Deionization, ist ein Prozess, bei dem das elektrische Potenzial zwischen zwei Ladungs-



Bild 2: Entfernung von Farbstoffen und Salzen aus Abwässern: Kombinierte elektrochemische Oxidation und Entsalzung
Foto: Peter Winandy



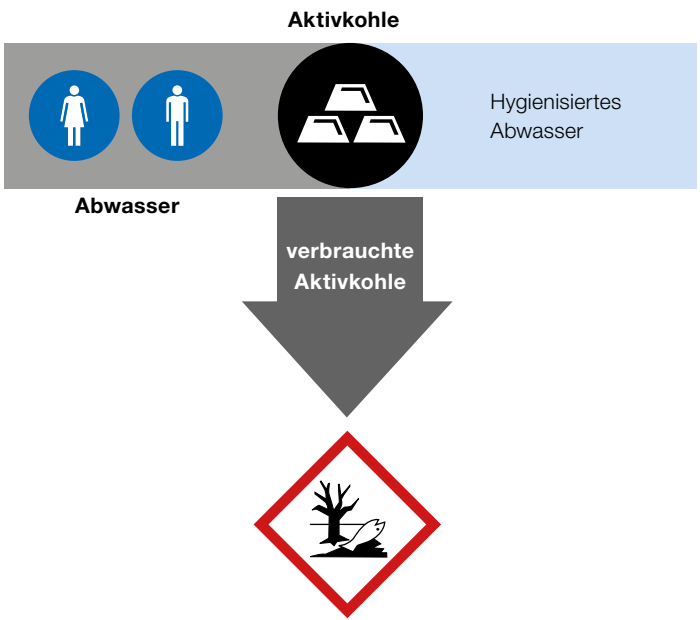
easy-Load[®]
MASTERFLEX[®]
USE 13, 14, 16, 25 TUBING
Assembled in USA Mode

Only MASTERFLEX[®] precision
with MASTERFLEX[®] pumps
for optimum performance.
Other tubing may void
the warranty.

500 ml
60 g/l NaCl

Clean Water

Adsorption



Elektrochemische Oxidation

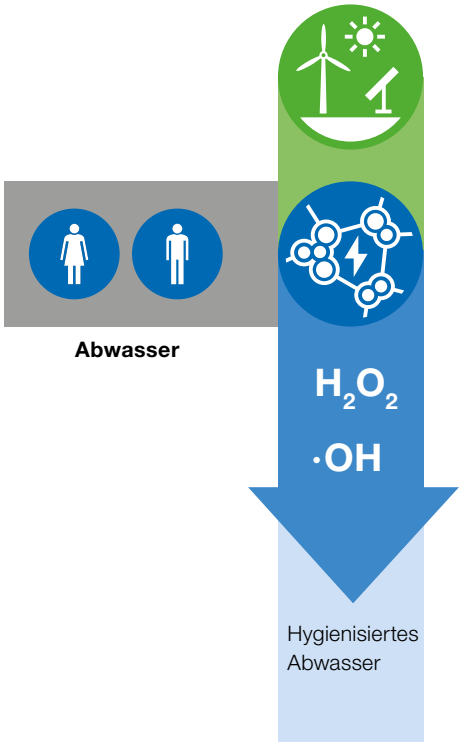


Bild 3: Mikroverunreinigungen entfernen: Vergleich von konventionellen (links) Ansätzen mit denen der Aachener Verfahrenstechnik

überträgern genutzt wird, um einzelne Ionen aus einer zumeist wässrigen Lösung gezielt zu entfernen. Dabei lagern sich die Ionen in der elektrochemischen Doppelschicht an der Oberfläche der Ladungsüberträger, meist poröse Kohlenstoffmaterialien mit großen spezifischen Oberflächen, an und können in einem nachfolgenden Regenerationsschritt durch das Umpolen der Spannung in einen Konzentratstrom überführt werden. In einer Weiterentwicklung werden die statischen Ladungsüberträger durch fließfähige Elektroden ersetzt, kurz FCDI für Flow-electrode Capacitive Deionization. Dadurch entfällt der Regenerationsschritt und das Verfahren ist vollständig kontinuierlich. Die fließfähigen Elektroden bestehen zumeist aus Suspensionen von Aktivkohlepartikeln in einer Elektrolytlösung und werden im Membranmodul durch Ionentauschermembranen von den wässrigen Feedlösungen abgetrennt. Unter dem Einfluss des elektrischen Feldes passieren die Ionen die Ionentauschermembranen und lagern sich in den Poren der Aktivkohlepartikel an; zeitgleich kann die Aktivkohle durch den gleichen Prozess kon-

tinuierlich regeneriert werden. Dies macht FCDI zu einem Elektromembranverfahren mit großem Einsatzpotenzial: Es wird ein vollständig kontinuierlicher FCDI-Prozess ermöglicht, wie er in Aachen im Jahr 2014 als Weltneuheit vorgestellt wurde. Das FCDI-Verfahren wird in der Aachener Verfahrenstechnik für die Behandlung von Industrieabwässern mit hohen Frachten an Nitrat, Sulfat oder Lithium erforscht. Es konnte gezeigt werden, dass die für die Umwelt schädlichen aber industriell äußerst wertvollen Salzionen selektiv aus den Abwasserströmen abgetrennt und als Rohstoff lokal wieder zur Verfügung gestellt werden können. In den letzten drei Jahren wurde das Verfahren zusätzlich aus dem Labormaßstab auf den Anwendungsmaßstab gebracht. Aktuell laufen Pilotierungsversuche bei großen Industriebetrieben, um dort die Vorteile der Technologie zu zeigen.

Entfernung von Mikroverunreinigungen

Neben den Salzen liegen meist auch organische Mikroverunreinigungen in den Abwässern vor. Diese organischen Mikroverun-

reinigungen sind im Gegensatz zu anderen organischen Schadstoffen solche Verbindungen im Wasser, die nicht als Nahrung für Bakterien und andere Mikroorganismen dienen können. Sie besitzen meist keine oder eine nur unzureichende biologische Abbaubarkeit und müssen daher durch physikalisch-chemische Verfahren beseitigt oder zu CO_2 verbrannt werden. Voraussetzung ist, die Mikroverunreinigungen zunächst aus dem Wasser zu holen. Aktivkohle ist ein bekanntes Material für die Adsorption von Mikroverunreinigungen. Sie wirkt wie ein Schwamm, die vielen Poren halten die Schadstoffe fest. Diese sichere Methode zur Entfernung von Mikroverunreinigungen bildet allerdings kontinuierlich einen gefährlichen Schlamm aus gesättigter Aktivkohle, der sorgfältig behandelt werden muss. Außerdem ist für eine kontinuierliche Entfernung von Mikroverunreinigungen eine kontinuierliche Zufuhr von Aktivkohle erforderlich.

Am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik liegt der Fokus auf nachhaltigen Ansätzen, etwa der elektrochemischen Oxidation, die mit erneuerbaren Energien für eine

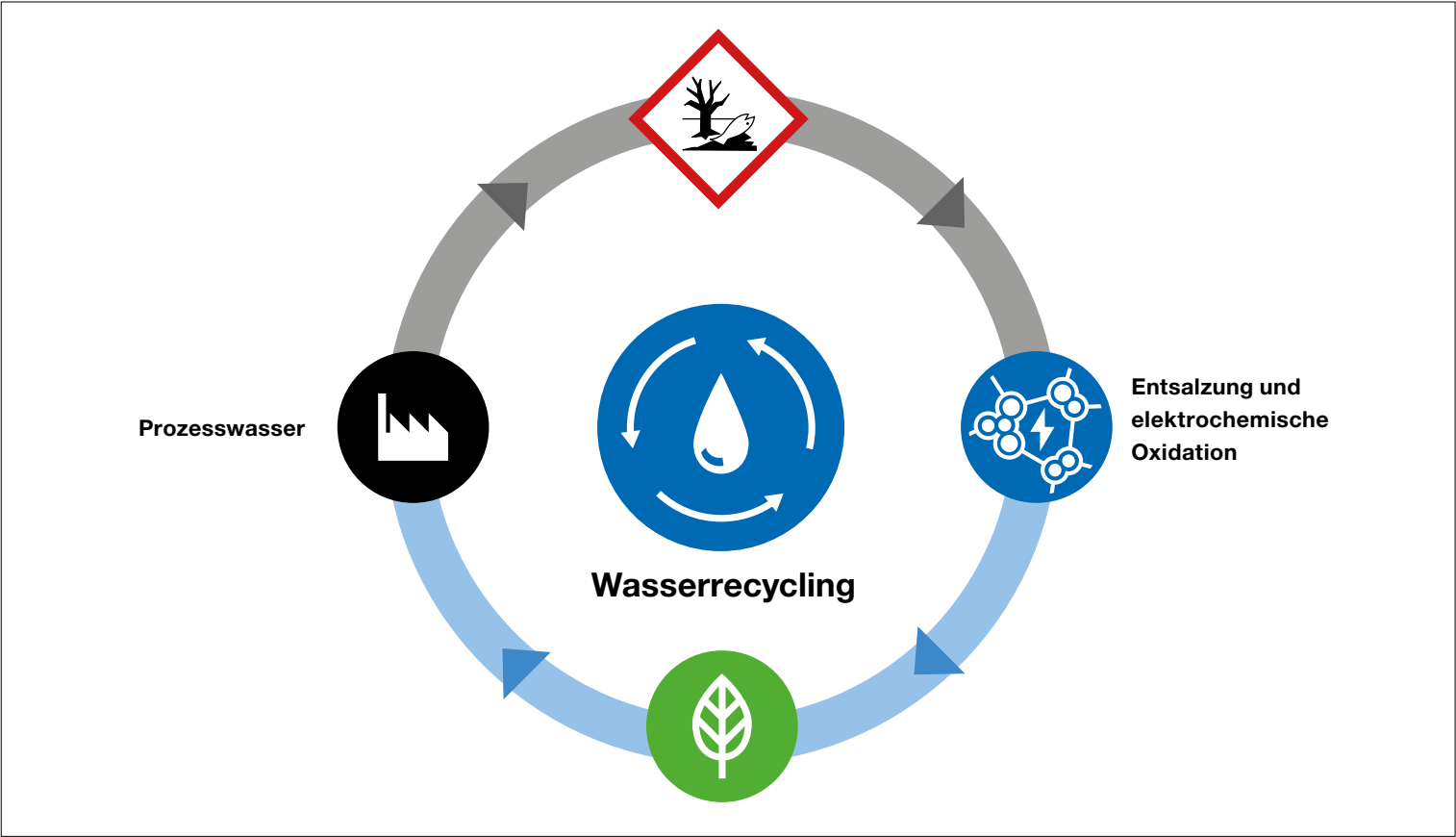


Bild 4: Schema des EfectroH2O-Projekts

saubere Wasserversorgung betrieben werden können. Diese Technologien erzeugen mithilfe von elektrischer Energie Chemikalien, die Mikroverunreinigungen angreifen und zu CO_2 verbrennen können. Die elektrische Erzeugung von Wasserstoffperoxid (H_2O_2) aus Sauerstoff (O_2) und Elektronen ist der erste Schritt in diese Richtung. Obwohl Wasserstoffperoxid selbst ein Oxidationsmittel ist, kann es auch mit einigen Katalysatoren, Chemikalien oder ultravioletem Licht reagieren und Radikale, insbesondere Hydroxid-Radikale, bilden. Hydroxid-Radikale sind das zweitstärkste existierende Oxidationsmittel, das unselektiv alle Mikroverunreinigungen unschädlich macht.

Unter den verschiedenen Methoden zur Bildung von Hydroxid-Radikalen ist die Verwendung von Eisen als Katalysator die umweltfreundlichste und effizienteste Methode, da Eisen ein reichlich vorhandenes und unschädliches Element ist. Allerdings muss die Reaktionslösung sauer sein. Daher muss dem Abwasser für die Behandlung viel Säure zugesetzt werden, und anschließend muss das behandelte Wasser neutralisiert werden,

bevor es in die Umwelt eingeleitet wird. Dies erfordert in der Regel weitere Chemikalien, die dann ebenfalls behandelt werden müssen. Eisen-Katalysatoren konnten fixiert und die Entfernung eines krampflösenden Arzneimittels mit einer Effizienz von 95 Prozent bei neutralem pH-Wert ohne Zugabe von Säure nachgewiesen werden.

Innovation durch Kombination

In Anbetracht der Vorzüge von FCDI und elektrochemischer Oxidation werden diese beiden Technologien kombiniert, um sauberes Wasser für Trinkwasser, landwirtschaftliche und industrielle Zwecke bereitzustellen. Ziel des Projekts „Effect-based Monitoring demonstrates Efficiency of Electrically-driven Water treatment Processes to Remove Salts and Micropollutants from Process Water“, kurz EfectroH2O, einer Zusammenarbeit mehrerer Partner in Deutschland und Indien, ist es, Wasser aus industriellem Textilabwasser zurückzugewinnen. Textilabwasser ist salzhaltig ($\approx 7\text{--}8\text{ g/L}$) und enthält hohe Konzentrationen an organischen Stoffen ($\approx 2,1\text{ g/L}$), bei denen es sich um langlebige Farbstoff-

chemikalien handelt. Es konnte gezeigt werden, dass beide Verfahren erfolgreich gekoppelt werden können und das Wasser energieeffizient gereinigt wird. Somit gelangt nur sauberes Wasser zurück in die Umwelt.

Autoren
Dr.-Ing. Christian Linnartz und Dr.-Ing. Mojtaba Mohseni sind wissenschaftliche Mitarbeiter am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik.

Verfahrenstechnische Methoden in der Medizin

Verbesserung von Diagnosen und Therapien

Medical technology is a rapidly growing field that is revolutionizing the treatment of patients. With the help of advanced technologies and innovative products, diagnosis and therapy options are becoming increasingly precise and effective. The Aachen process engineering departments are researching various questions and problems in medical engineering with highly innovative approaches. This article offers insights into current developments and research projects at these departments.

Die Medizintechnik ist ein schnell wachsender Bereich, der die Behandlung von Patientinnen und Patienten revolutioniert. Mit fortschrittlichen Technologien und innovativen Produkten werden Diagnose und Therapieoptionen präziser und effektiver. Die Lehrstühle der Aachener Verfahrenstechnik forschen an verschiedenen medizintechnischen Fragestellungen mit innovativen Ansätzen, einige Projekte werden im Folgenden vorgestellt.

Auf dem Weg zur computergestützten Krebstherapie

Die Modellierung des Tumorwachstums beim Menschen basiert auf einem bislang nicht validierten Modell. Der Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik hat in Zusammenarbeit mit der Klinik für Gastroenterologie, Stoffwechselerkrankungen und Internistische Intensivmedizin der Uniklinik RWTH Aachen zum Lungen- und Blasen-Tumorwachstum gearbeitet. Eingesetzt wurden Methoden, die regelmäßig für verfahrenstechnische Systeme angewandt werden. In der Studie wurden Daten von tausenden Patientinnen und Patienten verwendet und mittels mathematischer Methoden individuelle Parameter abgeschätzt. Nachgewiesen wurde, dass das Modell die Dynamik des Tumorwachstums nachbilden und sogar vorhersagen kann. Die Behandlungsstrategie kann daher entsprechend den Vorhersagen des Modells angepasst werden.

Lungenunterstützung der nächsten Generation

Viele chronische Atemwegserkrankungen können nur durch eine Lungentransplantation therapiert werden. Spenderorgane sind jedoch nur begrenzt verfügbar. Zwar können extrakorporale Lungenunterstützungssysteme, kurz ECLA, die Funktion der Lunge kurzzeitig übernehmen, eine dauerhafte Lösung in Form einer implantierbaren, künstlichen Lunge ist derzeit jedoch nicht verfügbar. Die aktuellen ECLA-Systeme ermöglichen lediglich Sauerstoff- und Kohlenstoffdioxidaustausch-raten für sedierte Patienten mit reduzierter Stoffwechselaktivität. Unregelmäßigkeiten im Blutfluss zwischen den Membranen und Stagnationszonen im ECLA führen zu Koagulation und damit zu Thrombosebildung. Daher sind neue Ansätze für implantierbare Lungenersatzsysteme notwendig. Die Fortschritte in der additiven Fertigung ermöglichen die Herstellung komplexerer Geometrien. Neue Systeme können die derzeitigen technischen Grenzen überwinden. Mathematisch optimierte Strukturen, die dreifach periodischen Minimaloberflächen, versprechen ein optimales Verhältnis von Oberfläche zu Volumen, eine verbesserte Durchmischung von transportlimitierenden Grenzschichten und weniger Stagnationszonen.

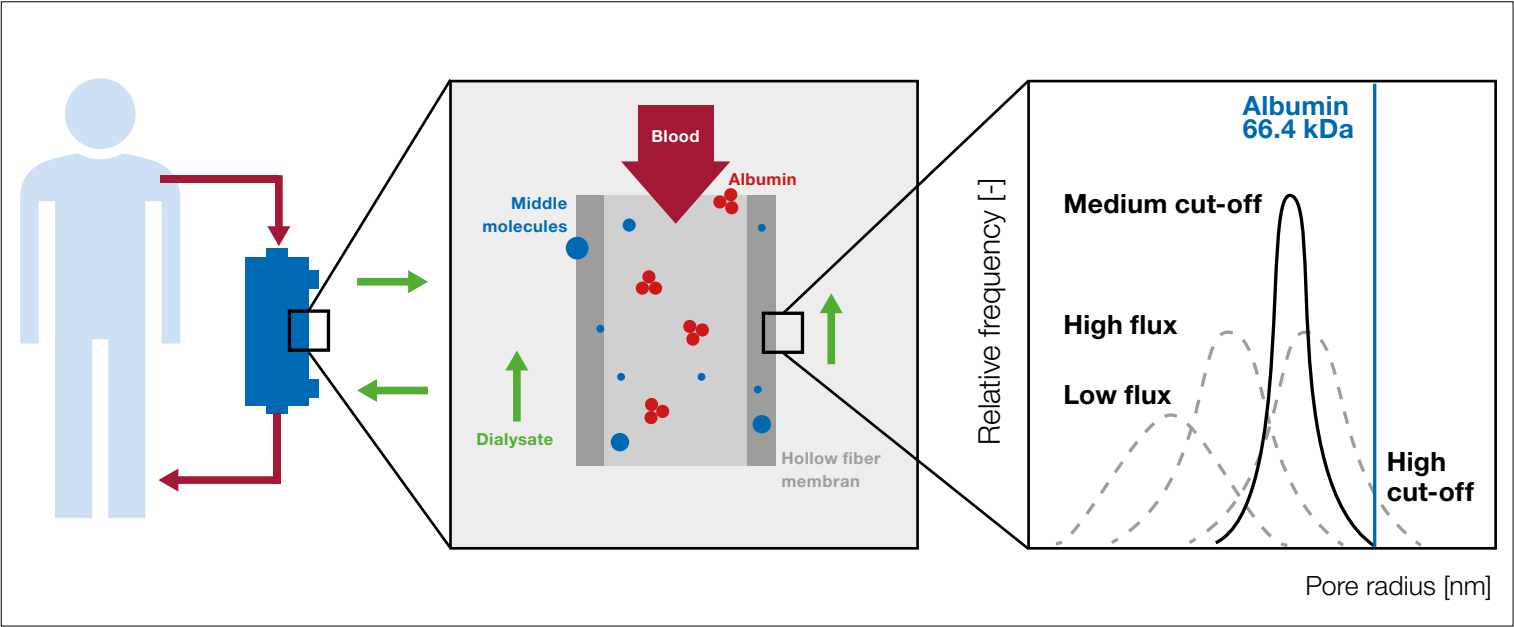


Bild 1: Blutreinigung mittels modifizierter Membranen - Membranentwicklung und Funktionalisierung für schonendere Dialyseverfahren

Im Rahmen des Schwerpunktprogramms „Auf dem Weg zur implantierbaren Lunge“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft führt der Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik mit dem DWI – Leibniz-Institut für Interaktive Materialien e.V., dem Institut für Angewandte Medizintechnik der RWTH und der Medizinischen Hochschule Hannover das Forschungsprojekt „3DLung – Implantierbare künstliche Lunge auf Basis von dreidimensionalen Membranen“ durch. Zusammen mit dem DWI untersucht der Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik verschiedene gasdurchlässige, 3D-druckbare Materialsysteme. In Kooperation mit dem Institut für Angewandte Medizintechnik werden patientenindividualisierte Geometrien simuliert und optimiert. Die Medizinische Hochschule Hannover testet die Materialien auf Biokompatibilität und überprüft anschließend die Implantierbarkeit.

Blutreinigung mittels modifizierter Membranen

Die Niere reinigt den Körper von allen wasserlöslichen Giftstoffen und reguliert den Wasserhaushalt. Die Nephronen sind die kleinste funktionelle Einheit der Niere, als natürliche Membran trennen sie Giftstoffe und überschüssiges Wasser. Durch Krankheiten wie Diabetes, Bluthochdruck, Entzündungen oder Zysten kann das Nierengewebe zerstört

werden, ein Nierenversagen ist die Folge. Die im Körper entstehende Vergiftung zeigt sich durch Atemnot und Wassereinlagerungen, Bauchfelldialyse und extrakorporale Dialyse sind dann Standard in der Therapie. Bei der Bauchfelldialyse dient das Bauchfell als Membran. Hierzu wird Dialysat in den Bauchraum gepumpt, das einen Konzentrationsgradienten erzeugt und so den Stofftransport ermöglicht. Um Entzündungen zu vermeiden, wird das Dialysat mit speziellen Membranen gefiltert. Der Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik forscht an Funktionalisierungen für die Adsorption von gesundheitsschädlichen Bakterien und untersucht die Durchströmung der Membranmodule für die optimale Nutzung der Bindekapazitäten. Bei der extrakorporalen Dialyse wird das Blut durch ein außerhalb vom Körper gelegenes Hohlfasermodule geleitet. Die Porengrößen und ihre Größenverteilung sind entscheidend für das Trennverhalten der Membran. Sind die Poren zu klein, können nur wenige Giftstoffe abgetrennt werden, zu große Poren führen zu einem Verlust von wichtigen Proteinen. Der Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik charakterisiert Hohlfasermembranen für den Einsatz in der Dialyse. Im Fokus stehen die Entgiftungsleistung der Membranmodule bei Laborversuchen mit Blutplasma und der Proteinverlust im Experiment mit Vollblut. Dialysepatienten benötigen am Behandlungs-

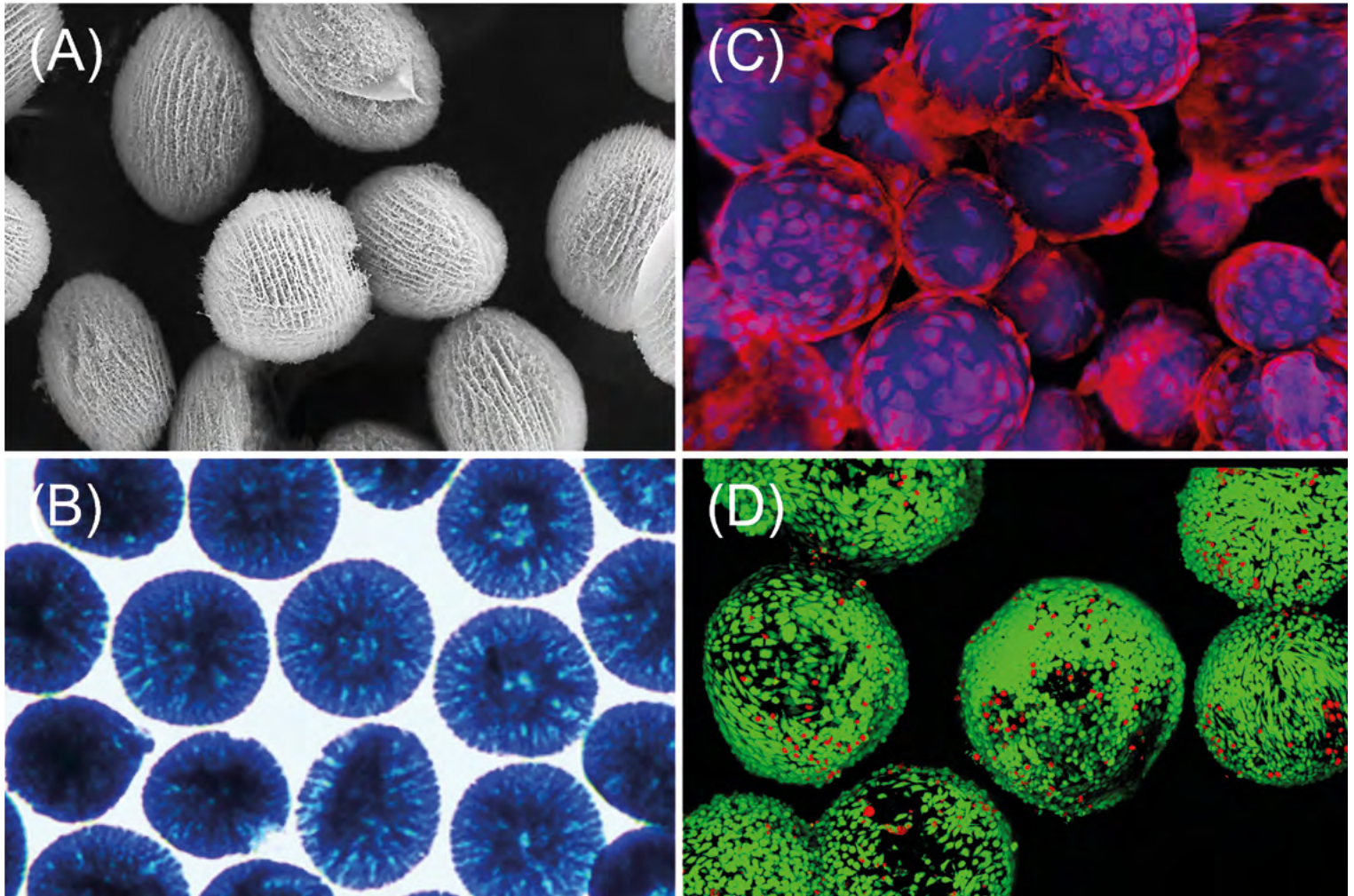


Bild 2: Substrate für Pharmazeutika und biotechnologische Produkte - Spezialisierte Microcarrier für die Zellexpansion

tag größere Mengen Blutverdünner, damit sich im Dialysator keine Blutgerinnsel bilden. Da dies eine große Belastung für den Organismus ist, soll der Einsatz der Blutverdünner auf ein Minimum reduziert werden. Am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik wird daher an blutkompatiblen Oberflächenbeschichtungen geforscht. Zusätzlich werden Enzymbeschichtungen für Membranen entwickelt, die bei Nierenversagen ausgelöst durch eine Blutvergiftung eingesetzt werden.

Substrate für Pharmazeutika und biotechnologische Produkte

In der Industrie sind biologische Moleküle und ganze Zellen hochwertige Substanzen für unterschiedliche Produkte. Dies gilt nicht nur für die Lebensmittelverarbeitung durch Enzyme oder die Herstellung von Cremes und Lotionen mittels Biotensiden, auch im pharmazeutischen und biomedizinischen Bereich werden Moleküle und Zellen eingesetzt. Virale Impfstoffe, die Produktion rekombinanter Pro-

teine sowie Tissue Engineering sind hierbei Einsatzbeispiele. Hergestellt werden diese Produkte meist in Rührkesselbioreaktoren durch die Expansion von biologischen Zellen in Suspensionskulturen. Da vor allem Biopharmazeutika oftmals nur mittels adhärenter Zellarten produziert werden können, müssen den Reaktoren in diesen Fällen mikroskopische Partikel, sogenannte Microcarrier, beigegeben werden. Diese bieten adhärenen Zellen eine Oberfläche um anzuwachsen, sich zu vermehren und das gewünschte Produkt zu erzeugen. Die Kombination aus Rührkesselreaktoren und Microcarrier besticht durch eine hohe Zelldichte, eine gute Skalierbarkeit, geringe Stellflächen sowie eine hochentwickelte computergesteuerte Kontrolle der Wachstumsbedingungen.

Um die natürliche Wachstums Umgebung der Zellen im synthetischen Material zu imitieren, forscht der Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik aktuell an der Herstellung und dem Einsatz von Microcarriern basierend auf

polymerischen Hydrogelen. Diese Hydrogelpartikel bieten die Möglichkeit, infiltrierbare nano- bis mikrometergroßen Porositäten in die Microträger zu integrieren und zentrale mechanische Eigenschaften präzise auf die Bedürfnisse der gewünschten Zellart einzustellen.

Tierische Zellkulturen in Schüttelkolben und Mikrotiterplatten

Die Kultivierung tierischer Zellen stellt an die biotechnologische Prozessentwicklung große prozesstechnische und wissenschaftliche Herausforderungen. Dies liegt unter anderem an langen Prozessdauern, zahlreichen komplexen Nährstoffbedürfnissen der Zellen sowie Empfindlichkeit gegenüber hydromechanischem Stress. Der Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik setzt in der tierischen Zellkultur mit seiner Expertise im Kleinkulturmaßstab im Bereich der Kultivierung in Schüttelkolben und Mikrotiterplatten an.

Die Arbeiten konzentrieren sich auf die Online-Messtechnik in kleinskaligen Kultivierungssystemen. Erste Erkenntnisse zeigen, dass sich die RAMOS-Technologie trotz der sehr geringen Atmungsraten von tierischen Zellkulturen einsetzen lässt, um das Wachstums- und Produktionsverhalten unter verschiedenen Kultivierungsbedingungen zu untersuchen. Die vorhandene Messsensitivität erlaubt es außerdem, kritische Kulturparameter wie Zellviabilitäten und Zellzahlen mit erhöhter zeitlicher Auflösung über den Kultivierungsverlauf zu bestimmen. Der so erweiterte Einblick in das Wachstumsverhalten kann im Anschluss eingesetzt werden, um in industrienahen Prozessen bisher unzureichend verstandene Effekte genauer zu untersuchen. Auch die in Mikrotiterplatten etablier-

te, nichtinvasive BioLector-Technologie wird am Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik für die tierische Zellkultur eingesetzt. Im Vergleich zu Kultivierungen in größeren Bioreaktoren kann so der Durchsatz erhöht werden, während die benötigten Kulturvolumina deutlich reduziert werden. Neben der Identifizierung geeigneter Screeningparameter, steht auch die Frage der Maßstabsübertragung im Zentrum der Untersuchungen. Die Übertragbarkeit von Prozessen zwischen Mikrotiterplatten, Schüttelkolben und gerührten Bioreaktoren muss gegeben sein, um die Vorteile des erhöhten Durchsatzes in Mikrotiterplatten nutzen zu können. Durch die erhöhte Sensibilität von tierischen Zellkulturen gegenüber hydromechanischer Beanspruchung rückt dieses Scale-up-Kriterium stärker in den Fokus als es bei prokaryotischen Systemen der Fall ist.

Autoren

Dipl.-Ing. Robert Dinger ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik.

Dr.-Ing. Franziska Hagemann, Lukas Hirschwald, M.Sc., und Sebastian Rauer, M.Sc., sind wissenschaftliche Mitarbeitende am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik.

Mohammad El Wajeh, M.Sc., ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik.

Dr.-Ing. John Linkhorst ist Oberingenieur und Forschungsgruppenleiter „Fluidics and Additive Fabrication“ am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik.

Von der Forschung in die Wirtschaft

Ausgründungen der Aachener Verfahrenstechnik

At Aachener Verfahrenstechnik we not only conduct research, but transform this research into new companies. Aachen Process Engineering offers a whole range of committed founders a platform to implement their ideas as spin-offs or start-ups companies. Thus, in recent years, some research topics have been transformed into lively businesses, which we would like to present here.

In den letzten Jahren haben einige Forschungsthemen der Aachener Verfahrenstechnik als Ausgründung, Spin-off oder Start-up den Weg in die Wirtschaft genommen. Hier einige Beispiele:

AixCAPE® e.V. ist ein Konsortium zur Förderung neuer Technologien und zur Beschleunigung des Innovationstransfers auf dem Gebiet der computergestützten Prozess- und Anlagentechnik für Energie- und Stoffumwandlung. Anwendungsorientierte Forschung und Software-Prototypentwicklung sind hier Kernaufgaben. Das Konsortium wurde im Jahr 2002 zusammen mit führenden Unternehmen der Prozessindustrie als Spin-off des Lehrstuhls für Prozesstechnik (heute Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik) gegründet.

2010 entstand die S-PACT GmbH als Spin-off der Aachener Verfahrenstechnik und des Instituts für Technische und Makromolekulare Chemie. S-PACT übernimmt die nächste Stufe der Technologieverwertung nach AixCAPE. Eine erforschte und getestete Methodik zur Spektrenanalyse wurde durch S-PACT in die kommerzielle Software PEAXACT überführt. Auf dieser Basis werden im Kundenauftrag anwendungsspezifische Analysemethoden zum Einsatz auf spektroskopischen Prozessanalysatoren erstellt.

Software und Services für digitale Anlagen bietet pnb plants & bytes GmbH. Ein Arbeitsschwerpunkt des 2019 entstandenen Start-ups ist Consulting bei der Anwendung und Weiterentwicklung des Standards DEXPI zum Austausch von Rohrleitungs- und Instrumentierungsdiagrammen im Auftrag mehrerer Global Player aus der Prozessindustrie. In diesem Zusammenhang hat pnb die DEXPI-Schnittstellen kommerzieller CAE-Werkzeuge getestet und hat Expertise in Datenanalyse, -modellierung und -integration.

Die Elektrochemie ist ein schnell wachsendes Forschungsgebiet, da sie erneuerbare Ressourcen, hohe Flexibilität und eine breite Palette unentdeckter Möglichkeiten bietet. Die elektrochemische CO₂-Reduktion, die elektrochemische Herstellung von Plattformchemikalien, die elektrochemische Wasserstoffverdichtung und die Wasserelektrolyse sind einige Beispiele dafür, was die Elektrochemie für die Welt leisten kann. Die flex-X-cell GbR löst dabei ein wichtiges Problem: Die Entwicklung neuer elektrochemischer Prozesse geht immer mit der Entwicklung einer elektrochemischen Zelle einher. Diese werden oft nach Maß gefertigt und auf einen bestimmten Prozess zugeschnitten. Die Vergleichbarkeit der wissenschaftlichen Ergebnisse wird daher einerseits erschwert, andererseits muss für jede neue Reaktion eine neue Zelle entwickelt werden, ein zeit-

und arbeitsaufwendiger Prozess, den flex-X-cell seit 2021 mit einer flexiblen Zelle für die Kunden löst.

Die Anzucht von Organismen und Zellen in Bioreaktoren, beispielsweise zur Herstellung von Arzneimitteln, benötigt Sauerstoff. Dieser wird bisher über sogenannte Sparger oder Fritten in Form von Gasblasen in den Reaktor eingebracht. Die Ausgründung BioThrust hat ein Membranmodul entwickelt, mit dem komplett blasenfrei ausreichend Sauerstoff zugeführt werden kann und die Zellen wesentlich schonender kultiviert werden. Außerdem bildet sich kein Schaum, der sonst oft bis zu 50 Prozent des Reaktorvolumens einnimmt. Dank dieser technischen Neuerung konnte die Prozessausbeute teilweise mehr als verdoppelt werden. Die BioThrust GmbH, gegründet 2022, arbeitet derzeit an der Markteinführung der Technologie.

Bei der Entsalzung von Wasser geht es nicht nur um die Erzeugung von Süßwasser, sondern auch um die Rückgewinnung wertvoller Salze. Amovion will die Stoffkreisläufe von Salz und Wasser schließen. Genutzt wird die innovative elektrochemische FCDI-Technologie. Diese ermöglicht die Ionen-Wasser-Trennung mit hoher Wasserrückgewinnungsrate und kann vollständig mit erneuerbarer Energie betrieben werden. Die patentierte Technologie wurde für eine Palette von Salzen und

Salzgehalten demonstriert und getestet, von der Wasserreinigung über die Salzmetathese bis hin zum Salzrecycling, beispielsweise von Lithium.

Autoren

Dr.-Ing. Christian Linnartz ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik.

Dr.-Ing. Johannes M. M. Faust war wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik und Geschäftsführer der AVT.

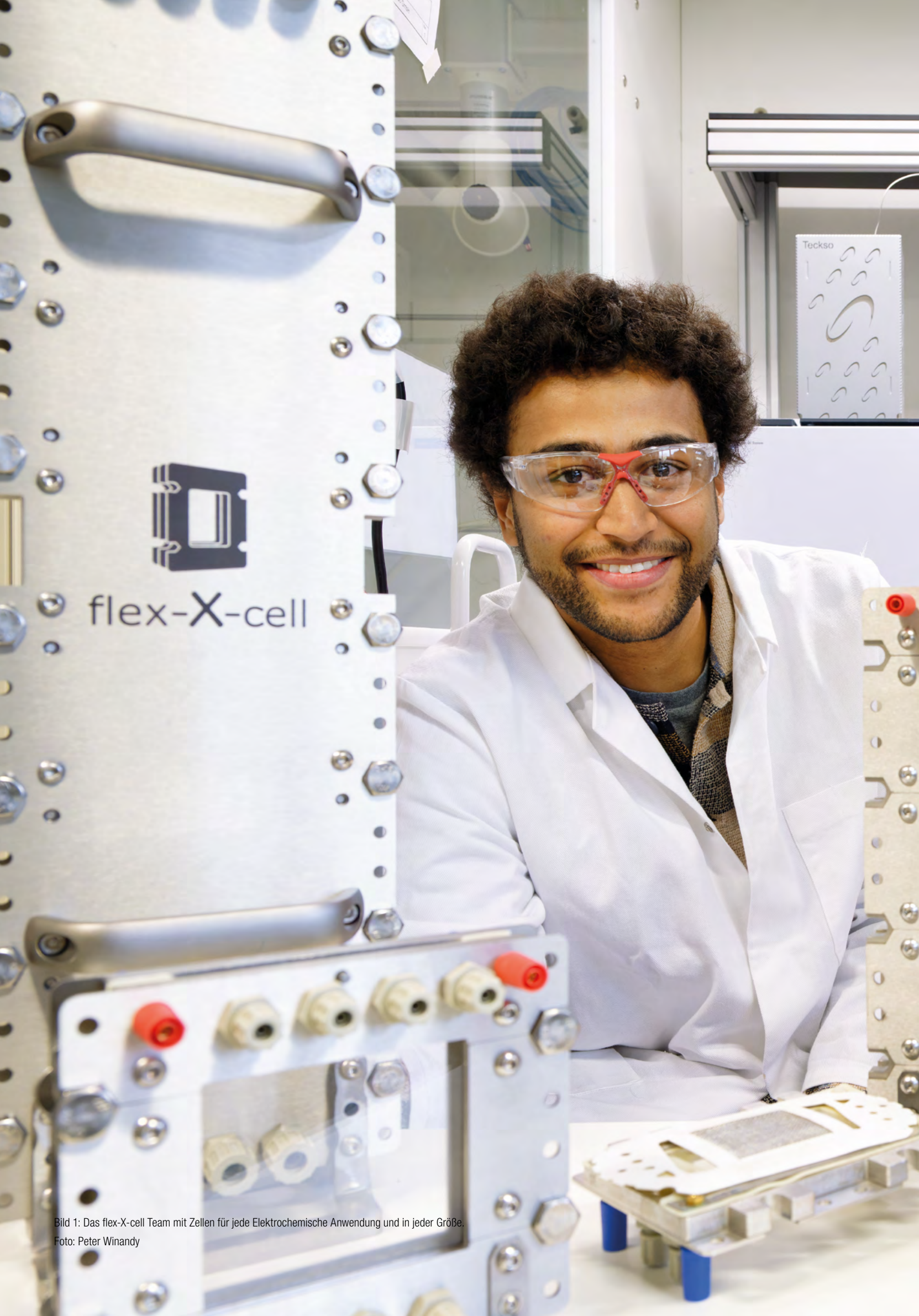
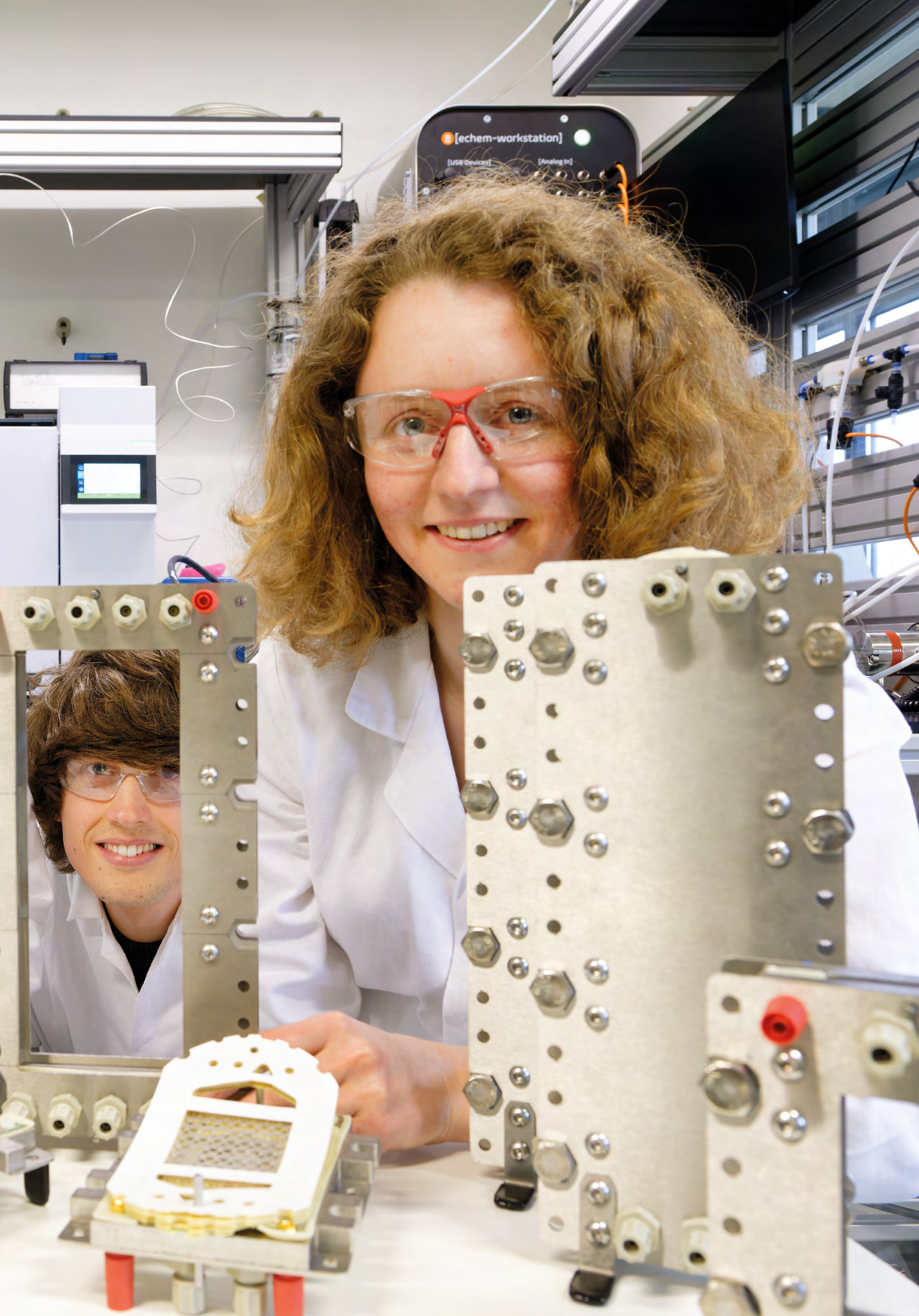


Bild 1: Das flex-X-cell Team mit Zellen für jede Elektrochemische Anwendung und in jeder Größe.
Foto: Peter Winandy



Innovative Lehre für die Studierenden

In addition to AVT's outstanding research, another aspect achieves significant impact in providing technical solutions to the challenges of the 21st century: Training the next generation of leaders for industry and academia. AVT transfers the knowledge and skills developed in research directly to the next generation during their education. We empower students to apply academic knowledge in practice and society. After all, what good is research if it never leaves the ivory tower? In addition to providing deep expertise at the abstract/theoretical level, we involve our students in practical (research) activities wherever possible.

For our Bachelor's and Master's students we do this by implementing innovative small group-based teaching concepts, organizing student competitions, running a club dedicated to the production of alcoholic cultural goods, hosting summer schools, as well as offering massive online open courses for thousands of participants. For our doctoral and postdoctoral researchers as well as in our vocational training, learning is primarily done by doing. Knowledge transfer is a top priority at AVT.

Studierende der Studiengänge Maschinenbau, Umweltingenieurwissenschaften, Verfahrenstechnik, Wirtschaftsingenieurwesen, Computational Engineering Science und Simulation Science lernen an der Aachener Verfahrenstechnik. Ihnen sollen nicht nur die in der Forschung erarbeiteten Erkenntnisse und Fähigkeiten vermittelt werden, darüber hinaus ist es Ziel, die Studierenden zu befähigen, die Erkenntnisse in Praxis und Gesellschaft anzuwenden. Genutzt werden dabei nicht nur die klassischen Lehrmethoden wie Vorlesung und Übungen, wie folgende Beispiele zeigen.



Bild 1: Das Modellfahrzeug ChemCar wird für den Start vorbereitet.
Foto: Peter Winandy

In der Lehrveranstaltung „Verfahrenstechnik im Team“ bearbeiten die Studierenden in Kleingruppen konzeptionelle, gruppenübergreifende, verfahrenstechnische Projekte aus aktuellen Forschungsthemen. Neben den fachlichen Lernzielen wird das selbstständige Projektmanagement sowie die Kommunikations- und Teamfähigkeit gefördert. Die praktische Anwendung des erlernten Wissens steht im Mittelpunkt des Wahlfachs „Angewandte chemische Verfahrenstechnik“. Der experimentellen Arbeit im Labor schließt sich eine rechnergestützte Datenauswertung und Simulation der Arbeit an. Teamarbeit und Aufgabenteilung bis hin zu industrienahen

Auswertemethoden werden hier vermittelt. Im Wahlfach „Rechnergestützte Prozessentwicklung“ können die Studierenden mit der führenden Prozesssimulationssoftware der chemischen Industrie einen Prozess aufbauen. Die einzelnen Verfahren, die zuvor erlernt, berechnet und verstanden wurden, können anschließend rechnergestützt zu einem Prozess kombiniert werden. Die Teams vergleichen Prozessalternativen und analysieren diese im Hinblick auf Kosten, Sicherheit und Umweltbelastung. Für RWTH-Studierende bietet die Aachener Verfahrenstechnik eine Summerschool zum Thema „HydroGrid 2035 – Wasserstoffver-

sorgung von Deutschland“ an. Dort werden vielseitige Themen rund um Wasserstoff wie Erzeugung, Gesetzesrahmen, Infrastruktur und Lagerung in Exkursionen und spannenden, interaktiven Vorträgen vermittelt.

 [www.avt.rwth-aachen.de/
go/id/xvhjr?#aaaaaaaaaaxvkxk](http://www.avt.rwth-aachen.de/go/id/xvhjr?#aaaaaaaaaaxvkxk)



Bild 2: Das ChemCar fährt angetrieben von chemischen Reaktionen.

Foto: Peter Winandy

Der Online-Kurs „Mathematical Optimization for Engineers“ ist über die Plattform EdX frei verfügbar. Kurze Lernvideos, Übungen und Quizze ermöglichen ein Verständnis für das breite Spektrum der Optimierungsalgorithmen.

Lernen in Wettbewerben und Arbeitsgruppen

Auch mit der Teilnahme an Wettbewerben lernen Studierende Forschungsaufgaben zu bearbeiten. Sie können unter Begleitung von Promovierenden und Postdocs Ideen vorschlagen, bearbeiten und abschließen, wodurch Selbstständigkeit, intellektuelle Kre-



aktivität und Organisation gefördert werden. Unterstützt werden jedes Jahr Teams in den Wettbewerben EURECHA, Chemplant und ChemCar. Im europaweiten Wettbewerb EURECHA werden Lösungen für ein verfahrenstechnisches Problem mit computergetstützten Werkzeugen für die Simulation und Optimierung von Prozessen entwickelt. Das

Siegerteam präsentiert seine Ergebnisse auf einem internationalen Symposium und veröffentlicht diese. Die Teams der Aachener Verfahrenstechnik gewannen den EURECHA-Wettbewerb die letzten vier Jahre in Folge! Im nationalen Wettbewerb Chemplant werden verfahrenstechnische Lösungskonzepte entwickelt, ein Konsortium aus Industrieun-

ternehmen und -verbänden formuliert die Aufgaben. Der Fokus liegt auf den drei Themenbereichen Digitalisierung und Industrie 4.0, Prozessplanung und Konzeptionierung neuer Anlagen sowie Nachhaltigkeit in der chemischen Industrie. Beim nationalen ChemCar-Wettbewerb wird ein von (bio-)chemischen Reaktionen angetriebenes Fahrzeug entwickelt, bewertet wird in den Kategorien Kreativität, Sicherheit und Rennergebnis. Zuletzt gewann das Aachener Team den ChemCar-Wettbewerb im Jahr 2021.

Die Grundoperationen der Fermentation und Destillation werden in der Sake AG und der Branntwein AG vermittelt. Teilnehmende der Sake AG erlernen die Herstellung sowie die kulturellen und traditionellen Hintergründe rund um die japanische Sakeproduktion. Die Branntwein AG zeigt indes den Einsatz der Destillation als klassisches thermisches Trennverfahren. In Gruppenarbeit werden alle Schritte zur Branntweinherstellung aus Früchten erarbeitet, geplant und umgesetzt.

Autoren

Univ.-Prof. Alexander Mitsos, Ph.D., ist Inhaber des Lehrstuhls für Systemverfahrenstechnik.

Jan F. Pyschik, M.Sc., und Anita Ziegler, M.Sc., sind wissenschaftliche Mitarbeitende am Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik.

Impressum

Herausgegeben im Auftrag des Rektors
der RWTH Aachen
Dezernat 3.0 – Presse und Kommunikation
Templergraben 55
52056 Aachen
Telefon +49 241 80 - 93687
pressestelle@rwth-aachen.de
www.rwth-aachen.de

Redaktion:
Angelika Hamacher

Titelbild: Am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik werden die hier dargestellten Hohlfasern beschichtet, um die Membran auf diverse Trennaufgaben wie die Aufreinigung von Recyclingwasser von Lithium-Ionen-Batterien anzuwenden.
Peter Winandy, Aachen

Gestaltung:
Kerstin Lünenschloß, Aachen

Druck:
image Druck + MEDIEN GmbH, Aachen

Nachdruck einzelner Artikel, auch auszugsweise, nur mit Genehmigung der Redaktion.

Für den Inhalt der Beiträge sind die Autoren verantwortlich.

ISSN-Nummer 0179-079X



In vielen Recyclingprozessen von Lithium-Ionen-Batterien fällt Lithium-haltiges Wasser an. Dieses wird am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik aufgereinigt und mittels des elektrochemischen Membranverfahrens der kapazitiven Deionisierung mit Fließelektroden aufkonzentriert.

Foto: Peter Winandy

