

Technische Chemie 2003

Die Entwicklungen in der technischen Chemie zielen auf effizientere Verfahren, nicht zuletzt aufgrund des krisenabhängigen Erdölpreises. Daraus ergeben sich Ansätze für Verfahren auf Basis von Erdgas oder nachwachsenden Rohstoffen sowie Synthesen mit neuen Katalysatoren und in alternativen Lösungsmitteln. Als eigenständige Disziplin der Verfahrenstechnik hat sich die Mikroverfahrenstechnik etabliert.

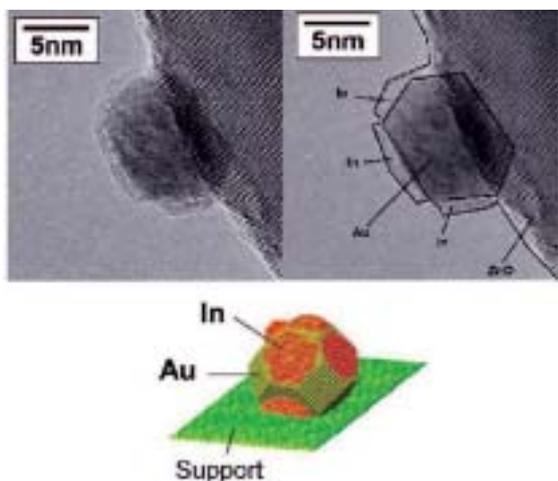


Abb. 1. **HR-TEM-Bild eines Au-Clusters auf In/ZnO.³¹⁾**

◆ Die Trends in der technischen Chemie orientieren sich immer mehr an den praktischen Aufgaben und ungelösten Problemen der chemischen Industrie. Ganz vorne stehen dabei die Katalyse und die Traum-Reaktionen der Petrochemie, z.B. selektive Methan- und Benzoloxidation,¹⁾ Propenoxid-Synthese mit O₂, Dimethylcarbonat aus Kohlendioxid.²⁾ Es ist ein zentrales Ziel, bestehende Verfahren so zu verbessern, dass sie unabhängig vom Erdöl und dessen krisenabhängigem Preis werden. Daraus resultieren neue Ansätze für alternative Verfahren für Zwischenprodukte auf Basis von Erdgas und nachwachsenden Rohstoffen.

Zudem liegt es im Trend, verschiedene Einzeldisziplinen zu kombinieren und Synergien zu nutzen, z.B. zwischen alternativen Lösungsmitteln und Katalyse^{3,4)} oder Nano-partikeln und Polymeren.

Katalyse

◆ Die Katalyse zählt zu den innovativsten Feldern der chemischen Industrie. Das größte Marktsegment sind die Umweltkatalysatoren. Das dynamischste Wachstum besteht jedoch bei Katalysatoren, die für die Synthese von Pharma- und Agrarprodukten sowie Spezialchemikalien verwendet werden.⁵⁾ Einen guten Überblick über die Bedeutung der Katalyse als Schlüsseltechnologie für ein nachhaltiges Wirtschaftswachstum sowie einen Aufgaben- und Problemstellungskatalog gibt die *Roadmap der deutschen Katalyseforschung*.⁶⁾

Wichtige Themen in der Katalyseforschung sind der direkte Einblick in den atomaren Maßstab, schnellere Katalysatorentwicklung durch Miniaturisierung und Automatisierung sowie die Ausrichtung nach dem Vorbild Natur, z.B. Zeozyme.⁷⁾ An Bedeutung gewinnt die Biokatalyse mit dem Potenzial, vielstufige chemische Synthesen durch hochselektive Einschnittverfahren zu ersetzen.

Heterogene Katalyse

◆ Heterogene Katalysatoren können als nanoskalige Architekturen angesehen werden, die chemische Bindungen selektiv lösen und neue bilden. Katalytische Aktivität setzt nicht nur aktive Zentren voraus, sondern auch eine aktive Umgebung und die Selbstorganisation der Reaktanten an den aktiven Zentren. Denn ein aktives Zentrum wird erst durch seine Umgebung dazu gemacht, das Geheimnis der Katalyse liegt in der Kooperation der aktiven Zentren mit ihrer molekularen Umgebung. Dies setzt neue, gezielte Bottom-up-Präparationsmethoden voraus.

Ein aktiver Katalysator muss in der Lage sein, die aktiven Zentren ständig zu regenerieren. Um dies zu studieren, sind In-situ-Methoden erforderlich. Dabei versucht man, nicht nur den katalytischen Prozess auf der Nanoskala zu verstehen, sondern auf dieser Wissensbasis Konsequenzen und Handlungsanweisungen z.B. Präparationsbedingungen abzuleiten, die das katalytische System verbessern.⁸⁾

Katalysatorpräparation

Bei der Katalysatorherstellung geht der Trend weg von traditionellen Methoden wie Fällung, Sol-Gel-Präparation, Leaching oder Templating, hin zu Flammen-Synthese,^{9,10)}

porösem Kohlenstoff als Templat^{11–14)} (porous carbon as template) und dem Einsatz überkritischer Fluide.¹⁵⁾

Viele Arbeiten zeigen, dass es praktisch keinen inerten Träger gibt, sondern dass die katalytische Performance nicht nur durch die aktive Komponente, sondern auch durch gezielte Modifizierung des Trägers maßgeschneidert werden kann.^{16–18)}

Neuere Herstellungsverfahren für Katalysatoren und katalytische Prozesse werden z. B. durch Ultraschall, Plasma oder fotochemische Prozesse unterstützt.^{19,20)}

Fortschritte sind auch bei der Heterogenisierung von Homogenkatalysatoren mit den Techniken getragener Flüssigphasen (supported liquid phase) und löslichen Trägern (soluble supports) zu verzeichnen.^{21–23)}

Rationales Katalysatordesign

Die Untersuchung von Katalysatormaterialien auf die Struktur- und Wirkungsbeziehungen ist das Kernstück des rationalen Ansatzes. Viele Artikel zeigen, wie wenig gesichert unsere Kenntnisse über Strukturen aktiver Oberflächen und dynamischer Katalysatormaterialien sind.²⁴⁾ Für die Methanolsynthese dient seit den 60er Jahren nach dem ICI-Verfahren Cu/ZnO/Al₂O₃ als Katalysator. Obwohl dieser Katalysator bereits als intensiv studiert gilt, liefert er ein schönes Beispiel, wie durch rationales Katalysatordesign Verbesserungen möglich sind. So konnte durch detaillierte Kinetikstudien unter stationären und instationären Reaktionsbedingungen sowie durch physikalisch-chemische Charakterisierungsmethoden zusammen mit der präparativen anorganischen Chemie erreicht werden, dass man die Funktionsweise des Katalysatorsystems unter prozessnahen Bedingungen besser versteht. Dies hat zu neuen Synthesewegen für effektivere Katalysatoren geführt.^{25–29)}

Ein weiteres Beispiel ist die Identifizierung aktiver Zentren bei Goldkatalysatoren, die für die Hydrierung von Acrolein verantwortlich sind (Abbildung 1).^{30,31)}

In-situ-Charakterisierung

Richtungsweisende Arbeiten der Topsoe-Gruppe zeigen in einer In-situ-TEM-Studie,³²⁾ dass Größe, Form und Struktur von Nanomaterialien von den Reaktionsbedingungen (Druck, Temperatur, Partialdrücke) abhängen, also einer dynamischen Veränderung unterworfen sind. Dies zeigt einmal mehr, wie wichtig In-situ-Methoden für ein rationales Katalysatordesign sind.^{33–35)} In letzter Zeit werden Methoden bevorzugt, mit denen sich röntgenamorphe Strukturen analysieren lassen, darunter die Röntgenabsorption (XAS^{34,36,37)}, die Spinresonanz (NMR³⁸⁾, EPR^{35,39)}, die Neutronenbeugung^{40–42)} und DRIFTS.^{43,44)} Einige dieser Methoden, die Aussagen über die Nahordnung um ein Sondenatom liefern, schlagen, kombiniert mit transienten kinetischen Methoden, eine Brücke zwischen Struktur und Wirkung.^{45–47)}

Als Neuling könnte die Einzelmolekül-Kraftspektroskopie zu den In-situ-Methoden kommen, mit der mechanische Experimente mit einzelnen Molekülen möglich sind.^{48–50)} Somit sind detaillierte Einblicke in die Bindungspotenziale sowie quantitative Untersuchungen des Adsorptionsverhaltens möglich. Vor kurzem ist es gelungen, den apparativen Aufwand für diese Methode deutlich zu reduzieren.⁵¹⁾

Kombinatorische Chemie

Die Entwicklung orientiert sich am Immunsystem, das mit kombinatorischen genetischen Strategien, durch molekulare Diversität und selektive Rezeptoren fremde Antigene erkennt. Eine Spezialausgabe der *Applied Catalysis* berichtet über den aktuellen Stand der angewandten Forschung, der Hochdurchsatz-Technologien sowie der theoretischen Ansätze.⁵²⁾

Modellierung

Vom Fernziel der kompletten theoretischen Beschreibung heterogenkatalysierter Prozesse, also der



Abb. 2. DEMIS-Pilot-Reaktor. Degussa und Uhde haben diese Mikroreaktor-Pilotanlage, in der PO aus Propen und H₂O₂-Dampf hergestellt wird, in Betrieb genommen. Mikrostrukturierte Apparate sichern die stabile Verdampfung von H₂O₂ in großen Mengen.⁷⁴⁾

ab-initio-quantenchemischen Beschreibung des aktiven Zentrums plus Mikrokinetik plus Reaktormodellierung, ist man noch weit entfernt. Damit dies möglich wird, sind weiter steigende Rechnerleistung und verbesserte theoretische Methoden die Voraussetzungen.

Dennoch werden katalytische Reaktionen immer mehr mit ab-initio-quantenchemischen Rechnungen (Dichtefunktionaltheorie) beschrieben. Bereits heute sind so bei einfachen Systemen echte Vorhersagen möglich.^{53–61)}

Von besonderem Interesse ist zur Zeit die Oxidation von CO auf Ru. Von der theoretischen Seite hat besonders die Kombination von Dichtefunktionaltheorie-(DFT)-Rechnungen und atomistischer Thermodynamik zur Aufklärung der Struk-

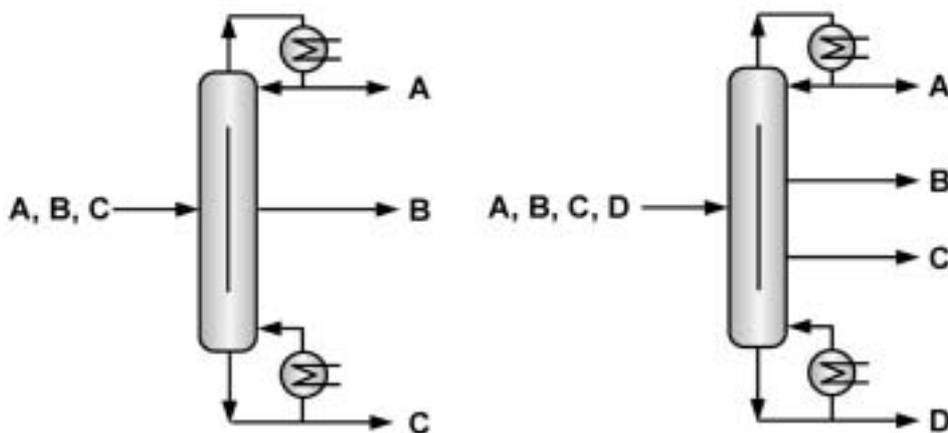


Abb. 3.
Trennwand-
kolonnen.

der Ru-Oberfläche unter realistischen Partialdrücken von O_2 und CO beigetragen. Diese Untersuchungen sind ein bedeutender Schritt, um die Drucklücke zwischen der Oberflächenforschung im Vakuum und der realen Katalyse zu schließen. Daneben existiert noch die Strukturlücke: Ab-initio-Elektronenstrukturuntersuchungen können aufgrund des Rechenaufwandes im Allgemeinen nur relativ einfache Systeme behandeln. Man versucht aber, immer komplexere Systeme zu modellieren; die Grenze des Machbaren liegt heute bei Einsatz der (Spin-)Dichtfunktionaltheorie bei bis zu 1000 Atomen oder etwa 6000 Valenzelektronen.

Homogene Katalyse

◆ Berücksichtigt man Kosten- und Umweltaspekte, so ist der wachsende Bedarf an enantiomerenreinen Wirkstoffen und Spezialchemikalien eine der größten Herausforderungen an die moderne Katalyseforschung. Die homogene Katalyse leistet durch ihre Möglichkeiten zur regio- und enantioselektiven Steuerung von Reaktionen einen wichtigen Beitrag, damit die Anforderungen an die Synthesen erfüllt werden können.^{62–66} So versucht man, Prozesse atomeffizient und selektiv zu steuern. Ein Beispiel ist die technisch bedeutende Übergangsmetall-katalysierte Hydroformylierung von Olefinen. Durch gezielte Ligandenwahl sind sehr hohe Selektivitäten bezüglich

der gewünschten linearen Aldehyde möglich.⁶⁷

Die katalytische Addition von primären oder sekundären Aminen an C-C-Mehrfachbindungen ist eine atomeffiziente Variante zur Synthese von Aminen und Iminen. In diesem Zusammenhang steht vor allem die Bildung des anti-Markownikow-Produkts im Mittelpunkt des Interesses.^{67,68}

Als Alternative zu organischen Lösungsmitteln werden immer mehr ionische Flüssigkeiten eingesetzt. Damit lässt sich die Produktabtrennung in der homogenen Katalyse oft deutlich vereinfachen.⁶⁹

Homogenkatalysatoren werden auf festen Trägern oder in entsprechenden Fluiden immobilisiert.⁷⁰

Chemische Reaktionstechnik

◆ Bei der Ermittlung der chemischen Kinetik über instationäre Methoden sind noch sehr viele Annahmen erforderlich, so dass der Schluss von der instationär ermittelten Kinetik auf eine stationäre Kinetik normalerweise nicht erlaubt ist. So gewinnt bei der Reaktorauslegung die integrierte fluiddynamische Simulation an Bedeutung.

Neuere Entwicklungen auf diesem Gebiet sind z. B. der katalytische Wandreaktor,⁷¹ Membranreaktoren für die homogene Katalyse in überkritischem CO_2 , mikrosystembasierte Pd/Ag-Membranen, Ultraschallbeeinflusste Polymerisation bei Hochdruckflüssigkeiten und die Mizellkatalyse.⁷²

Mikroverfahrenstechnik

Die Mikroverfahrenstechnik hat sich in jüngster Zeit in industriellen Anwendungen etabliert (Abbildung 2). Die Zunahme der Patentanmeldungen^{74,75} und die weltweite Gründung von immer mehr Mikroreaktorfirmen (z. B. Velocys, InnovaTek, MesoFuels) sind dafür Indikatoren. Ein großer Teil der Industrie prüft weltweit den Nutzen mikroverfahrenstechnischer Apparate für ihre Zwecke. So haben zum Beispiel Degussa und Uhde eine Mikroreaktor-Pilotanlage in Betrieb genommen, in der PO aus Propen und H_2O_2 -Dampf hergestellt wird (Abbildung 2). Die mikrostrukturierten Apparate sichern die stabile Verdampfung von H_2O_2 in großen Mengen.⁷⁵

Die Anforderungen an Mikroreaktorsysteme können inzwischen gelistet und auf dieser Basis per Katalog bestellt werden. Das Top-Down-Design ersetzt das in der Vergangenheit oft praktizierte empirische Vorgehen. Der Weg ist frei zum rationalen Design von Mikroreaktoren sowie zur hierarchischen, zielorientierten Prozessentwicklung. Wichtige Arbeiten stammen aus den Bereichen:

- organische Synthesen,^{76–78}
- neue Konzeptionen,^{79–83}
- Energietechnik,^{84–86}
- Simulation.^{87–92}

Die Mikroverfahrenstechnik entwickelt sich immer mehr zur eigenständigen, weithin akzeptierten wissenschaftlichen Disziplin in der Verfahrenstechnik.

Ein Problem beim Einsatz von Mikroreaktoren für die Heterogene Katalyse ist noch die Bestückung der Mikrokanäle mit Katalysatormaterial. Ein Lösungsansatz ist die Verwendung von strukturierten Drähten (structured filamentous catalyst).^{93,94}

Ungewöhnliche Bedingungen, alternative Lösungsmittel

Der Einsatz von Mikrowellen⁹⁵ und Ultraschall^{96,97} in der chemischen Technik führt nach wie vor ein Nischendasein. In der Katalyse

se,⁹⁸⁻¹⁰⁰ bei Fest- und Flüssigphasenreaktionen,¹⁰¹ bei thermischen Trennverfahren (hier vor allem bei Extraktionen und Trocknungen) und bei mechanochemischen Verfahren (z.B. bei der Herstellung von Nanopartikeln und porösen Metalloxiden¹⁰²) werden sie inzwischen häufiger verwendet.

Überkritische Fluide werden inzwischen auch in der Katalyse eingesetzt.¹⁰³⁻¹⁰⁵ So lassen sich Geschwindigkeitssteigerungen, Selektivitätskontrolle, verbesserter Wärme- und Massentransport, Katalysatorlebensdauer und Regenerierung sowie integrierte Trennungen erreichen.^{106,107}

Als alternative Lösungsmittel für Synthesen setzen sich auch ionische Flüssigkeiten immer mehr durch. Ihre reaktionsentscheidenden Eigenschaften wie Löslichkeitsverhalten, Polarität, Viskosität u.a. können durch die Wahl der Kation/Anion-Kombination genau eingestellt werden.^{108,109} Bestimmt man die theoretisch möglichen Kationen/Anionen-Kombinationen, so kommt man auf eine Größenordnung von 10^{18} möglichen ionischen Flüssigkeiten.¹¹⁰ Daher werden diese Lösungsmittel neben überkritischem CO_2 und H_2O , deren reaktionsentscheidende Eigenschaften über Druck und Temperatur eingestellt werden können, als Designer-Lösungsmittel oder Green Solvents bezeichnet.

Erstmalig wurde eine ionische Flüssigkeit im BASIL-Prozess (biphasic acid scavenging using ionic liquids) der BASIL bei der Alkoxyphenylphosphin-Herstellung eingesetzt.^{111,112} Neue Anwendungsgebiete ionischer Flüssigkeiten liegen in der Trenntechnik.^{113,114}

Trennverfahren

Kristallisation

Der Scale-up von Kristallisationsstufen hat bisher darunter gelitten, dass die rationale, physikalisch-chemische Beschreibung des Kristallisationsprozesses sich einer Modellierung entzogen hat. Zur Lösung die-

	Full phase (solid)	Flow (liquid)	CO_2 (supercritical)
Extraktion	CH_2	20 %	sehr
Extraktion	org. Flüssigkeiten (z.B. CH_2)	20 %	sehr
nahe Zukunft	H_2O (z.B. H_2O)	70 %	sehr
Zukunft	CO_2 (z.B. CO_2)	20 %	sehr
nahe Zukunft	ionisch	20 %	z.B. CO_2 (z.B. CO_2)

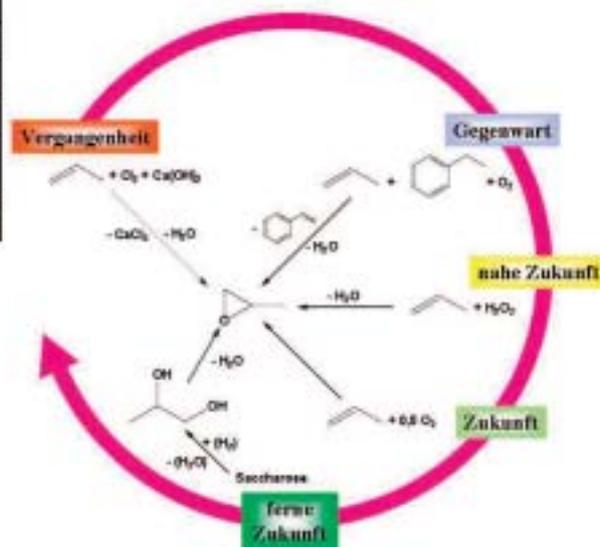
ses Problems gibt es heute mehrere Ansätze:

- Kontrolle des Kristallers durch Messung der Übersättigung und Kristallgröße online,
- Molecular Modelling,
- genauerer Einblick in den Polymorphismus.¹¹⁵

Die Verwendung von grenzflächenaktiven Polymeren – von so genannten doppel-hydrophilen Blockcopolymeren – erweitert die Möglichkeiten der kontrollierten Fällung oder Kristallisation von Anorganika mit neuen Kristallmorphologien und Überstrukturen mit hohem technischen Potenzial.¹¹⁶ Bei diesen Polymeren ist ein Molekülteil im Wesentlichen inert und sichert die Verarbeitbarkeit in Wasser, der andere adsorbiert spezifisch an Kristallflächen und modifiziert so das Kristallwachstum. In dieser Weise lassen sich dann die Partikelgröße, Kristallstruktur, Kristallform sowie eine Überstruktur einstellen. So können z.B. Bariumsulfat und Calciumphosphat in Form von Nanofasern mit 10 nm Dicke und Längen im Mikrometerbereich ausgefällt werden.^{117,118}

Rektifikation

Reaktoren werden zunehmend in destillative Aufarbeitungsschritte apparativ einbezogen. Sie nutzen so-



wohl homogene als auch heterogene Katalyse.

Bei homogen katalysierter Reaktionsführung werden verschiedenartige Einbauten genutzt, um den jeweiligen Verweilzeitanforderungen zu entsprechen (z.B. Glockenböden mit hohem Füllstand). Anstau packungen, abwechselnd übereinander angeordnete geordnete Packungen mit unterschiedlicher spezifischer Oberfläche, sind eine neue Bauform, bei der die Verweilzeit während des Betriebs über eine variable Heizleistung beeinflusst wird. Bei heterogen katalysierten Reaktivdestillationen können neben Packungskonstruktionen mit Pellets in Gewebetaschen auch Mehrkanalpackungen eingesetzt werden, in welche Pellets durch Einschütten eingebracht und durch Herausrieseln ausgetragen werden. Der Katalysatordeaktivierung kann dadurch begegnet werden, dass der Katalysator zusammen mit der Flüssigkeit durch die Kolonne bewegt und ausgetragen wird, um anschließend regeneriert und erneut eingesetzt zu werden.¹¹⁹

Trennwandkolonnen entwickeln sich zunehmend zu einer Standardlösung im Produktionsmaßstab. Zur Zeit sind weltweit etwa 50 Kolonnen in Betrieb.¹²⁰ Neben der klassischen Form für die Trennung von Dreistoffgemischen finden sich Bauformen, bei denen vier Reifractionen gewonnen werden (Abbildung 3). →

Abb. 4. Die PO-Synthese im Wandel der Nachhaltigkeit.

Ein neues Verfahren zur Kunststoffverarbeitung ist das 3D-Druckverfahren. Damit gelingt es, komplexe dreidimensionale Architekturen vom Nanometer- bis in den Zentimeter-Bereich aufzubauen.¹²⁸⁻¹³⁰⁾

Nachwachsende Rohstoffe

◆ „Die Vorräte an Öl und Gas sind begrenzt und werden nur noch 40 Jahre reichen.“ – dieser Satz besitzt seit 40 Jahren Gültigkeit. Der Ersatz fossiler Brennstoffe durch erneuerbare Energiequellen ist langfristig unvermeidbar und kurzfristig wünschenswert, denn wir alle leben zur Zeit vom Kapital und nicht von den Einnahmen. Biomasse kann als einzige erneuerbare Kohlenstoff-Quelle kurzfristig zur Minderung unserer Ölabhängigkeit beitragen.

Um nachwachsende Rohstoffe zu etablieren, reicht es nicht aus, den Anbau der Rohstoffpflanzen zu fördern. Damit sie Erdöl in wirtschaftlich bedeutenden chemischen Synthesen ersetzen können, müssen erst neue Prozesse entwickelt werden.^{131,132)} Einige Beispiele dafür gibt es bereits:

Daimler-Chrysler kooperiert mit VW im Rahmen eines Forschungsprogramms mit Choren Industries bei der Herstellung von so genannten SunFuels. Dazu wollen sie das gesamte Spektrum der Biomasse nutzen.¹³³⁾

Am Forschungszentrum Karlsruhe haben Wissenschaftler ein zweistufiges Verfahren ausgearbeitet, das trockene Biomasse wie Holz oder Stroh zur Synthesegaserzeugung einsetzt. Dazu wird zuerst Biomasse aus maximal 30 km Entfernung an regionale Schnellpyrolyse-Anlagen angeliefert und verflüssigt. Aus dem flüssigen Pyrolyseöl und dem Pyrolysekoks wird eine pumpfähige Suspension (Slurry) hergestellt. Aus circa 20 dieser Pyrolyseanlagen mit $15 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ Strohdurchsatz wird eine zentrale Großanlage beliefert, in der der Slurry in einem Flugstrom-Druckvergaser vergast und anschließend das Synthesegas verwertet wird.¹³⁴⁾

Die Pilotanlage VERENA, in der bei Temperaturen um $650 \text{ }^\circ\text{C}$ verdünnte pflanzliche Restbiomasse (z. B. Traubentrester) zu Synthesegas umgesetzt wird, ist ein Beispiel für den Einsatz von feuchter Biomasse wie Klärschlämmen oder Ernteabfällen. Die Umwandlung erfolgt mit Hilfe von überkritischem Wasser, da hier das Wasser der Biomasse nicht verdampft werden muss.^{135,136)}

Nanostrukturierte Materialien

◆ Von den Möglichkeiten, nanostrukturiertes Material, Partikel, Röhren oder Drähte, herzustellen, hat sich die Synthese mit Hilfe von überkritischen Fluiden in den letzten Jahren einen festen Platz gesichert. Beispiele sind CFD (chemical fluid deposition), RESS (rapid expansion of supercritical solution) oder RESOLV (rapid expansion of a supercritical solution into a liquid solvent).^{137,15)}

Der Trend geht bei der Nanosynthese von unten nach oben, ausgehend von hochreaktiven atomaren oder molekularen Synthesebausteinen werden z. B. durch atomare Selbstassoziation (self assembly) Metallpartikel mit Größenskalierungen vom Subnanometer- bis in den Mikrometer-Bereich hergestellt.^{138,139)}

Nanogoldcluster¹⁴⁰⁾ entpuppen sich immer mehr als Modellsystem, um elementare Prinzipien der Katalyse zu verstehen. Während Cu und Ag schon ab 4 Atomen dreidimensionale Cluster bilden, ist Au bis 13 Atome zweidimensional.^{141,142)}

Metal Organic Frameworks (MOFs) stellen eine neue Klasse von Nanomaterialien mit katalytischer Relevanz dar. Mit einer spezifischen Oberfläche von ca. $3000 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ übertreffen sie diejenige von Aktivkohle (Abbildung 5).

Elias Klemm, Chemnitz
Herbert Vogel, Darmstadt

Das Literaturverzeichnis ist im Internet auf der Nachrichten-Homepage unter www.gdch.de sowie unter www.ct.chemie.tu-darmstadt.de/ak_vogel/index_de.html abrufbar.

STELLENANGEBOTE
VERANSTALTUNGEN
INFORMATIONEN
RUND
UM
STUDIUM
BERUF
UND
KARRIERE

KARRIERESERVICE

STELLENMARKT

GDCh-Karriereservice
und Stellenmarkt
Varenttrappstraße 40-42
60486 Frankfurt am Main

Tel. 0 69/7917-665
Fax 0 69/7917-322

E-Mail karriere@gdch.de
stellenmarkt@gdch.de

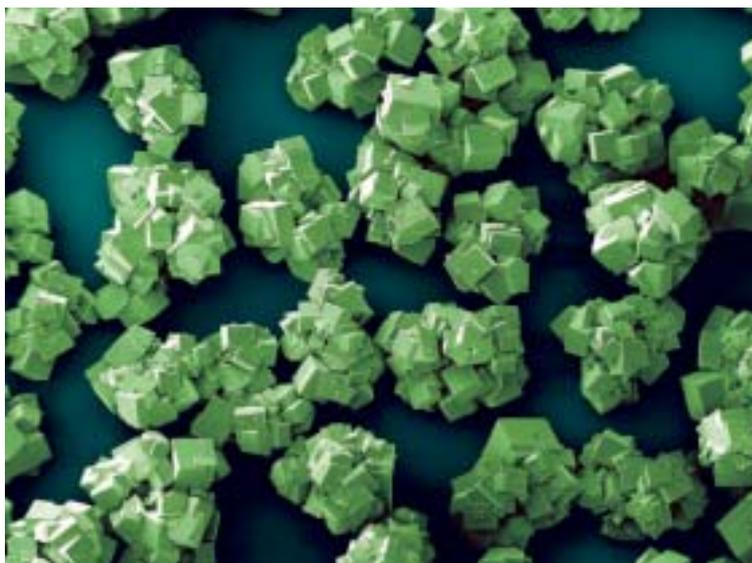


Abb 5.
Metal Organic
Frameworks.
(Foto: BASF)

Neue chemische Produktionsverfahren

◆ Neue chemische Produktionsverfahren haben fast ausschließlich ihren Ausgangspunkt bei neuen Katalysatoren, denn nur katalytische Verfahrenskonzepte sind geeignet, die chemische Produktion nachhaltiger zu gestalten.

Dabei sucht man nach der perfekten Reaktion. In *Science* definiert John F Hartwig (Departement of Chemistry, Yale University, USA) diese so: „A perfect reaction is generally thought to occur with inexpensive reagents, run with fast rates, form 100% yield of product, require no added heat, and generate no waste“.¹²¹⁾ Leider stehen hier Adjektive bzw. Adverbien wie „billig“ und „schnell“ ohne Bezug. Eine bessere Definition wäre: „Ein Syn-

theseweg für ein Produkt ist perfekt nachhaltig, wenn er 100% Atomökonomie und Ausbeute erreicht, CO₂-Neutralität gewährleistet sowie die Herstellkosten der Edukte kleiner sind als die der Produkte“. Ein Beispiel ist der historische Weg der PO-Synthese hin zur perfekten nachhaltigen Reaktion (Abbildung 4).

Die BASF arbeitet mit Dow Chemical an einer Verfahrenstechnik für eine World-Scale-Anlage zur PO-Herstellung auf der Basis von Propylen und H₂O₂ (HPPO-Verfahren).¹²²⁾ Der Vorteil des Verfahren ist, dass keine Koppelprodukte anfallen. Ende 2003 haben die Firmen die Forschungen an der Pilotanlage in Oppau abgeschlossen. 2007 soll eine HPPO-Anlage für 300000 jato in Betrieb gehen. Parallel dazu haben Degussa, der zweitgrößte H₂O₂-Produzent der

Welt, und Uhde denselben Verfahrensweg ausgearbeitet und wollen den Prozess an Sasol, Johannesburg, in Lizenz vergeben. Geplant ist eine 60000 jato Anlage in Südafrika.¹²³⁾

Den weltgrößten Poly-THF-Produktionskomplex (60000 jato PolyTHF und 80000 jato THF) errichtet die BASF in Caojing/Shanghai.¹²⁴⁾

Lurgi trägt mit einem neuen Verfahren zur Herstellung von Polypropylen aus Erdgas dazu bei, den steigenden Bedarf an PP (33 Mio. jato heute, 52 Mio. jato bis 2010) wirtschaftlich effizient über den Rohstoff Erdgas abzudecken. Es konnte jetzt erstmals das nach dem MTP-Verfahren (Methanol to Propylen) hergestellte Propen polymerisiert werden.¹²⁵⁾

Während der Trend bei den Grund- und Zwischenprodukten immer mehr zu Einstranganlagen mit immer höherer Kapazität geht, läuft die Entwicklung bei Fein- und Spezialchemikalien entgegengesetzt. Hier steht die Verkürzung der Entwicklungszeiten durch mobile, modulare, schlüsselfertige Einprodukt-Containernanlagen im Vordergrund.¹²⁶⁾

Bei der Verbesserung technischer Prozesse versucht man, nicht nur die eigentliche Chemie, sondern auch vor und nachgeschaltete Abläufe effektiver zu gestalten. Dazu entwickeln Firmen zur Zeit eigene Werkzeuge (z.B. eSECT der BASF zur Prozesskettenanalyse und Supply-Chain-Simulation), um die gesamte Versorgungskette zu verbessern.

Kunststoffe

◆ Bei der Polymerisation werden verstärkt katalytische Prozesse (Single-site-Katalysatoren wie Ziegler-, Metallocen-Katalysatoren) eingesetzt, um mit wenigen Monomerbausteinen gewünschte Mikrostrukturen (isotaktisch, syndiotaktisch oder ataktische Sequenzen) und Monomersequenzen (unpolar, polar) definiert aufzubauen.¹²⁷⁾ Es ist das Ziel, nach dem Vorbild der Natur, nämlich durch gezielte Verknüpfung von wenigen Bausteinen (hier 20 Aminosäuren, dort ca. 100 Monomerbausteine), völlig neue Designer-Polymere (3D-Strukturen) aufzubauen.



Elias Klemm, Jahrgang 1965, studierte Chemieingenieurwesen an der Universität Erlangen-Nürnberg und promovierte 1995 am Lehrstuhl für technische Chemie bei Gerhard Emig. 2001 habilitierte er sich in Erlangen im Fachgebiet technische Chemie. Von 2001 bis 2003 arbeitete er bei Degussa auf dem Gebiet der Mikroverfahrenstechnik. Seit Oktober 2003 leitet er den Lehrstuhl technische Chemie an der TU Chemnitz. Seine Arbeitsschwerpunkte sind heterogene Katalyse, Mikroverfahrenstechnik und Simulationssoftware.



G. Herbert Vogel, Jahrgang 1951, studierte chemische Technologie an der Fachhochschule und Chemie an der Technischen Hochschule Darmstadt, wo er 1982 promovierte. Von 1982 bis 1993 war er bei der BASF in Ludwigshafen tätig, wo er sich mit der Entwicklung und dem Bau petrochemischer Anlagen beschäftigte. Seit 1993 ist er Professor für technische Chemie an der TU Darmstadt mit den Arbeitsgebieten heterogene Katalyse, Chemie unter überkritischen Bedingungen und nachwachsende Rohstoffe.