



DECHEMA

GDCh

GESELLSCHAFT
DEUTSCHER CHEMIKER

VERBAND DER
CHEMISCHEN INDUSTRIE e.V.
WIR GESTALTEN ZUKUNFT.



VCI

Empfehlungen der Chemiegesellschaften für neue Ausschreibungsinhalte zur Förderung der Material- und Werkstoffforschung

Motivation

Es ist erklärtes Ziel der Chemiegesellschaften, über Verbundforschungsvorhaben die Kooperationen zur Material- und Werkstoffforschung in den stark interdisziplinären Materialwissenschaften zu fördern und damit das notwendige hohe Maß an Vernetzung und Kooperation zwischen den Akteuren aus den unterschiedlichen Bereichen der Wirtschaft und der Wissenschaft zu schaffen. Hierfür ist eine langfristige strategische Unterstützung durch die öffentliche Hand über eine adäquate Förderung von adäquaten Themen zur Material- und Werkstoffforschung notwendig. Dies gilt für dieses Technologiefeld insbesondere, da FuE-Investitionen in der Materialentwicklung wegen der großen Hebelwirkung am Anfang der Innovationskette über die Chemie besonders effektiv für innovative Durchbrüche („technology push“) sind.¹

Die in den Gremien der Chemieorganisationen DECHEMA, GDCh und VCI beteiligten Materialforschungsexperten aus Unternehmen und der Wissenschaft haben Themen, beispielhaft nach Anwendungsfeldern, orientiert an der Themengliederung des Materialforschungsprogramms „Vom Material zur Innovation“ des BMBF, identifiziert und bieten nunmehr an, Inhalte für das „lernende Materialforschungsprogramm“ im Sinne einer weiteren Priorisierung und Konkretisierung der hier aufgeführten Themen aber auch in allen anderen Programmen und Ausschreibungen der Bundesressorts vertieft zu diskutieren. Dies betrifft auch möglichen Input zur Vorbereitung von Ausschreibungen im Rahmen der Materialforschungs-Förderprogramme des BMWi, nicht zuletzt zum Technologie-Transferprogramm Leichtbau (TTLB), womit die Chemiegesellschaften ihren Beitrag zum Ausbau und die Förderung des Leichtbaus mit dem Ziel einer breiten industriellen Anwendung und einen branchen- und materialübergreifenden Technologie- und Wissenstransfer leisten wollen. Darüber hinaus sollen Impulse in die Werkstoff-Plattformen unter anderem unter der BMBF-Dachstrategie „Materialforschung“ gegeben werden. Im Einzelnen müssen die hier aufgeführten Themen und Empfehlungen an die Programme spezifisch angepasst werden, insbesondere hinsichtlich Aufgabenstellung, Struktur des Programms, TRL und Budgetanforderungen.

1. Prozess der Ideengenerierung

Die Chemieorganisationen haben Fachworkshops veranstaltet zwischen der Chemieindustrie und deren Partnern in der industriellen Wertschöpfungskette und ihren Kooperationspartnern in Hochschulen und Forschungsinstituten sowie Multiplikatoren in Forschungsorganisationen und Verbänden, zuständigen Projektträgern und Ministerien.

Dabei wurden die Themen zur Materialforschung gegliedert in die Themenfelder:

¹ Durch Materialinnovationen Deutschland stärken – Empfehlungen für die zukünftige Gestaltung von Förderprogrammen und Ausschreibungen der Forschungsförderung der Bundesregierung, DECHEMA/GDCh/VCI, Juni 2018



DECHEMA

GDCh

GESELLSCHAFT
DEUTSCHER CHEMIKER

VERBAND DER
CHEMISCHEN INDUSTRIE e.V.
WIR GESTALTEN ZUKUNFT.



VCI

- Innovative Materialien für die Energieversorgung (Anwendungsfelder des BMBF-Materialforschungsprogramms „Werkstoffe der Energietechnik“, „Mobilität und Transport“)
- Innovative Materialien für eine effiziente Rohstoffnutzung (Anwendungsfeld des BMBF-Materialforschungsprogramms „Nachhaltiger Umgang mit Rohstoffen und Materialien“ sowie „Werkstoffe für zukünftige Bausysteme“)

Die Workshops wurden inhaltlich so gestaltet werden, dass folgende Querschnittsthemen berücksichtigt werden:

- Circular Economy
- Impact der Digitalisierung auf die Chemie- und Materialforschung
- Product by Process (Einfluss des Produktionsprozesses auf das Produkt)
- In Vorträgen und Diskussionen wurden Themencluster, die aus dem Kreis der Produktionstechnologien von den Chemieunternehmen hervorgegangen sind, als mögliche inhaltliche Schwerpunkte künftiger Ausschreibungen zur Materialforschung umrissen und zur Unterstützung der Forschungsförderer aufgearbeitet.

Die Darstellung erfolgt entlang der technologischen Zielsetzungen für die Phasen

- kurzfristig bis 5 Jahre,
- mittelfristig bis 10 Jahre und
- langfristig > 10 Jahre

mit Empfehlungen zur Ausgestaltung der Fördermaßnahmen. Diese stellen einen Stakeholder-Approach dar mit einem deutlichen Commitment der Unternehmen der deutschen Chemieindustrie für Forschung und Entwicklung in den aufgeführten Themenbereichen.

2. Themen

I. Neue innovative Materialien für die Energiespeicherung

Neue innovative Materialien für die Energiespeicherung werden mit dem Fokus auf folgende Themen gegliedert:

- Kathodenaktivmaterial für Lithiumionen Batterien (LIB) mit einem Prozessfokus
- Anodenaktivmaterial für Lithiumionen Batterien (LIB) mit einem Strukturfokus
- Elektrolyt für Lithiumionen Batterien (LIB) mit einem Materialfokus sowie
- zukünftige Speichertechnologien.

Wichtige Querschnittsthemen sind dabei die Digitalisierung für Hochdurchsatzexperimente und die Circular Economy für geeignete Materialien aus dem Recycling. Weitere Querschnittsthemen stellen die datenbasierte Materialentwicklung mit standardisierten Testverfahren dar, deren Daten für einzelne Projektnehmer zugänglich sind sowie neue Möglichkeiten der Simulation und der Material-Modellierung.

Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder u. gesamtgesellschaftlicher Nutzen	Perspektive (kurz-/mittel-/langfristig) und besondere Förderbedingungen
Kathodenaktivmaterial für Lithiumionen-Batterien	Weitere Verbesserung von Kathodenmaterialien, getrieben durch die Anforderungen der Automobilindustrie (Verbesserung der Leistungsdichte, Sicherheit und Kosten von Batteriekonzepten).	NCM mit weiter erhöhten Ni-Anteilen von > 80% und reduziertem Co-anteil. Oberflächenmodifiziertes NCM für optimierte Lebensdauer und Eigenschaften. Co-freie Kathodenmaterialien	Übergeordnetes Kernthema auf dem Gebiet Ni-reicher Kathodenmaterialien ist die Prozesssicherung für die Oberflächenmodifizierungen des Kathodenmaterialien durch z.B. skalierbare Gasphasenprozesse, die Reduzierung von Prozessschritten zur Kostensenkung und auch Aspekte der Weiterverarbeitung der Kathodenmaterialien zu Elektrodenbändern. Langfristig Co-freie Systeme: dazu neben der Zyklenstabilität u. Energiedichte auch erhöhte Sicherheit; Herausforderung ist auch die Strukturstabilität des Materials bei hohem Ladungszustand für max. Batteriekapazität.	Post 2030 sind Li u. Ni kostentreibende Faktoren: Definition auch visionärer Projekte für Alternativen zu Li und Ni. Neben Grundlagen der Materialentwicklung auch innovative Prozesse zur nachhaltigen. Materialherstellung: Schwerpunkt Prozessinnovationen in der Produktion auch mit Blick auf Rohstoffeinsatz, Energieeinsatz und CO ₂ -Bilanz der Prozesse (ökologischer Nutzen gegenüber asiatischem Wettbewerb als Differenzierung der europäischen Industrie)	Kurz- (Ni-reiches NCM) bzw. mittelfristig (Co-freie Materialien) Da technologische Grenzen erreicht werden, benötigt eine erfolgreiche Entwicklung die Unterstützung mittels Methoden zur Modellierung der Materialfunktion in Verbundprojekten.

Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder u. ge- samtgesellschaftlicher Nut- zen	Perspektive (kurz-/mittel- /langfristig) und besondere Förderbedingungen
Anodenaktivmaterial für Lithiumionen Batterien (LIB)	Materialgestaltung zur Realisierung von Komposit-Elektroden. Wichtige Stichworte sind hier die Mikrostrukturierung, nanostrukturierte Hybridmaterialien, die Erzeugung einer künstlichen Elektrodenschicht (Solid Electrolyte Interface/ SEI) und deren Analytik sowie eine Erhöhung der Zyklenzahl dieser neuartigen Materialien.	Siliziumhaltige Komposit-Elektroden müssen so eingestellt werden, dass die Volumenänderung weitestgehend unterdrückt wird, wobei das auf Systemebene im Zusammenspiel mit Kathode und den Passivkomponenten der Zelle erfolgen kann. Der Sicherheitsaspekt von energiereichen Anodenmaterial bedarf ebenfalls der Betrachtung.	Neben den Komposit-Anoden ist auch der Einsatz einer Li-Metallanode von hohem Interesse für hohe Energiedichten. Ein Grundproblem ist dabei vor allem die Ausbildung von Dendriten und die ebenfalls große Volumenänderung bei der Zyklierung. Auf dem Gebiet der Analytik ist eine Verbesserung der Untersuchungsmöglichkeiten von Oberflächen und Grenzflächen nötig, sowie die Möglichkeit Elektrodenprozesse während des in-situ Aufbaus und in-operando zu untersuchen. Zudem ist eine Standardisierung der Testverfahren unbedingt erforderlich.	Kurz- bzw. mittelfristig Ersatz der derzeit eingesetzten Naturgraphitelektroden in Lithiumionenbatterien für automobiler Anwendungen und Speicheranwendungen	Verbundvorhaben, eventuell mit Folgevorhaben Kurz-, mittelfristig
Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder u. ge- samtgesellschaftlicher Nut- zen	Perspektive (kurz-/ mittel- /langfristig) und besondere Förderbedingungen

Elektrolyt und Separator für Lithiumionen Batterien	Funktionsfähigkeit und Sicherheit der Batterie.	Parasitäre Reaktionen an der Elektrodengrenzfläche insbesondere an Kathodenseite führen zum erhöhten Zellinnenwiderstand, was die Funktionstüchtigkeit der Zellen nachhaltig schädigt. Mit Hinblick auf die Entwicklung von Kathodenmaterialien mit höheren Abschaltspannungen, z.B. Manganreichen NCM und Hochvolt-Spinell ($\text{LiNi}_{0,5}\text{Mn}_{1,5}\text{O}_2$), ist die parallele Entwicklung von hochvoltstabilen ($> 4,5 \text{ V vs. Li/Li}^+$) Elektrolyten unabdingbar.	Einsatz von schwerentflammablen Lösungsmitteln bis hin zu wässrigen Systemen zur Erhöhung der Sicherheit. Reduktion des Fluorgehaltes der LIB. Die Recyclingfähigkeit sollte insbesondere schon im frühen Stadium der Elektrolytentwicklung betrachtet werden.	Kostengünstige, einfach zu beschaffende umweltverträglich herzustellende Materialien mit Recyclingmöglichkeit. Reduzierung der Menge der passiven Elemente, ohne dabei die Leistungsfähigkeit der Batterie zu beeinträchtigen. Dabei können auch funktionalisierte Separatoren den Überschuss an ungenutzten Elektrolyten reduzieren und gleichzeitig die Sicherheit der Batterie erhöhen.	Verbundvorhaben Kurz-, mittelfristig
Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder u. gesamtgesellschaftlicher Nutzen	Perspektive (kurz-/mittel-/langfristig) und besondere Förderbedingungen
Zukünftige Speicher- technologien	Neue Zellchemie mit verbesserter Performance insbesondere auch hinsichtlich Energiedichte, Funktions-	Entwicklung von Festelektrolyte zum Betrieb in automobilen Anwendungen im niedrigen T-Bereich $< 0 \text{ °C}$ und hoher	Ganzheitliche Betrachtung des Gesamtsystems muss bereits früh in der Materialentwicklung eingebunden werden. Auch die Recyclingfähigkeit der neuen	Langfristig gesehen Einsatz im KfZ bzw. Speicheranwendungen denkbar. Reduzierung von Kosten und Erhöhung der Sicherheit.	Verbundvorhaben mit Universitäten wegen hohem Anteil an Grundlagenforschung

	<p>fähigkeit, Kosten und Nachhaltigkeit für zukünftige Entwicklungen vorbereiten, mit Fokus auf Feststoffbatterien mit neuen Festelektrolyten mit hoher Leitfähigkeit inklusive entsprechender effektiver Herstellungsprozesse.</p>	<p>Leitfähigkeit (>10 mS/cm) bei Raumtemperatur. Höhere intrinsische elektrochemische Stabilität des Festelektrolyten und Stabilität gegenüber Anode und Kathode. Herstellungsprozesse, die möglichst wenig Veränderung in etablierten Produktionsabläufen verursachen, insb. bzgl. kostenintensiver Anlagen zur großindustriellen Produktion von Kathodenmaterialien. Neuentwickelte Feststoffelektrolyte sollten dabei im Lösungsmittel und mit anderen Elektrodenmaterialien im Komposit verarbeitbar sein.</p>	<p>Materialien ist zu berücksichtigen. Zusätzliche Themen sind die effektive Aktivierung über Elektrolyte, Binder, Leitadditive etc. in Elektroden sowie Umweltverträglichkeit bzw. Nachhaltigkeit. Neue Zellchemien, wie z.B. Natrium, Aluminium, Magnesium und Calcium. Multivalente Zellchemien versprechen höhere Energie- und Leistungsdichte, sind aber noch am Anfang der Grundlagenforschung. Kostenstruktur und Nachhaltigkeit sollten frühzeitig betrachtet werden.</p>		<p>Langfristig: neue Materialien erforderlich</p>
--	---	---	---	--	--

II. Neue innovative Materialien für die Energiewandlung

Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder u. ge- samtgesellschaftlicher Nut- zen	Perspektive (kurz-/mittel- /langfristig) und besondere Förderbedingungen
PEM-Elektrolyse	PEM Elektrolyse, IrO ₂ /Pt, Katalysatoren zur Produktion von Wasserstoff aus Erneuerbaren Energien als CO ₂ -freier, chemischer Speicher, Verfügbarkeit von Ir	Reduktion der Ir-Beladung auf unter 0,1 g pro kW (aktuell: 1g/kW)	<ul style="list-style-type: none"> - Neue Anodenkatalysatorstrukturen für PEM-Elektrolyse - Stabilität der Katalysatoren, Interaktion Katalysator – Trägermaterial - Untersuchung von Materialkombinationen, Skalierung der Verfahren 	PEM-Elektrolyse für H ₂ -Wirtschaft (mobile Anwendung in BZ und stationär als P2X), Schlüsseltechnologie zur Sektorenkopplung elektrische Energie mit Transport und Chemieindustrie	Verbundvorhaben, eventuell mit Folgevorhaben Kurz-, mittelfristig
Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder u. ge- samtgesellschaftlicher Nut- zen	Perspektive (kurz-/mittel- /langfristig) und besondere Förderbedingungen
Elektroden u. Gasverteilerstrukturen f. PEM-BZ/PEM-Elektrolyse	Elektroden und Gasverteilerstrukturen: Brennstoffzelle & Elektrolyse: Kostengünstige & robuste Herstellverfahren	Langzeitstabilität, Katalysator-konzept zur Nanostrukturierung, bifunktionales ORR/OER Konzept	Neue strukturierte Gasverteilerstrukturen für Elektroden: Materialentwicklung (Ti, Legierungen), Morphologie (Composites, großer Oberfläche, Dichte-	Elektrolyseure (alkalisch, PEM), Wasserstoffproduktion. PEM-Brennstoffzellen für Zero Emission Transport. Aufbau von kritischem Know-	Verbundvorhaben, Systemhersteller einbeziehen Kurz-, mittelfristig

	für Elektroden und Gasverteilerstrukturen, Reduzierung Total Cost of Ownership von Wasser-Elektrolyseuren, Senkung der Kosten von Komponenten und Materialien		Gradient), Prozeßdesign für Massenproduktion mit niedrigen Kosten, Systemintegration & standardisierte Testung der Lebensdauer	How in Deutschland als Beitrag zur globalen Energiewende Serienfertigung von Kern-Komponenten	
Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder u. gesamtgesellschaftlicher Nutzen	Perspektive (kurz-/mittel-/langfristig) und besondere Förderbedingungen
Leistungselektronik für Energiewandler	Materialien für die Leistungselektronik für Anwendungen im Bereich der Mobilität, Elektrolyse, Batterie, PV und Systemintegration im Rahmen der Energiewende allgemein.	Materialien für die Leistungselektronik (SiC, GaN), zum verlustarmen Wandeln, Isolatoren, Keramiken	Materialentwicklung SiC, GaN, Herstellverfahren und Präkursoren	Anwendungen im Bereich der Mobilität, Elektrolyse, Batterie, PV und Systemintegration im Rahmen der Energiewende allgemein	Verbundvorhaben, mittel-, langfristig

Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder u. gesamtgesellschaftlicher Nutzen	Perspektive (kurz-/mittel-/langfristig) und besondere Förderbedingungen
Photovoltaik mit höherem Wirkungsgrad und weniger Ressourceneinsatz > Tandemsolarzellen	Photovoltaik für höhere Energieeffizienz, bessere Flächennutzung durch hohe Wirkungsgrade; ressourcenschonend, da weniger Materialeinsatz pro Fläche; Integration von PV,	Entwicklung von Materiallösungen z.B. – III/-V Halbleiter, Perov-skite, OPV	Neue Materialzusammensetzungen um z.B. Design spezifischer Eigenschaften (Bandlücke...) zu steuern; Ausgangsmaterialien zur Verfügung stellen (aufgereinigte Metallorganika etc); Entwicklung von Recyclingprozessen für die Materialien, bleifreie Materialien etc.	Energieeffizienz, bessere Flächennutzung durch hohe Wirkungsgrade; ressourcenschonend, da weniger Materialeinsatz pro Fläche; Integration von PV	Verbundvorhaben, mittel-, langfristig
Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder u. gesamtgesellschaftlicher Nutzen	Perspektive (kurz-/mittel-/langfristig) und besondere Förderbedingungen
Photokatalyse Herstellung nachhaltiger Energieträger aus H ₂ , CO ₂ und Licht	Mit der Energieumwandlung umgehen > technische Großelektrolyse, neue elektrochemische Technologien (z.B.	Photokatalytische u./o. photoelektrochemische Wandler zur Herstellung stofflicher Energieträger (H ₂ , MeOH, ...)	FuE zu katalytischen Systemen (z.B. geträgerte oder ungeträgerte anorganische Partikel, Elektroden, Elektrolyte, Mechanismen, Device) mit hoher	Katalysatoren, Elektrolyte, Elektroden, Komponenten, ganze Systeme. Wasserstoff und MeOH für chemische Grundstoffindustrie, e-fuels, e-Mobility, Brennstoffzelle.	Verbundvorhaben, Systemhersteller einbeziehen, mittel-, langfristig

	CO ₂ -, N ₂ -Elektrolyse, Kombination mit herkömmlichen Elektrolyseverfahren, z.B. Cl ₂ -Herstellung), Energieeffizienz erhöhen		Effizienz bezügl. Konversion und Selektivität		
--	--	--	---	--	--

III. Neue innovative Membranmaterialien für die Chemie- und Energieproduktion

Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder+ gesamtgesellschaftlicher Nutzen	Perspektive (kurz-/mittel-/langfristig) und besondere Förderbedingungen
Neue Festkörperstrukturen in der als Membranmaterialien	Festkörperionenleiter werden als Sauerstoffleiter heute bereits technisch eingesetzt, beispielsweise in HT-Elektrolyseuren und Brennstoffzellen. Ihre Anwendung in der chemischen Synthese ist	<p>Neue, verbesserte Festkörperionenleiter für Sauerstoffionen und Protonen</p> <p>Erweiterung der Einsetzbarkeit von Membranmaterialien in den „Tiefemperatur“-Bereich (T 200°-600°C)</p>	<p>Modelling: Digitales Screening von Strukturen samt Prädiktion von Eigenschaften Modellierung von Transportvorgängen (Transportmodellierung)</p> <p>Materialien: Erarbeitung präparativer Festkörperchemie als Zugang zu</p>	Erweiterung der Anwendungen auf chemische Reaktionen wie zum Beispiel Dehydrierungen, Ammoniakherzeugung bei gleichzeitiger Reduktion der CO ₂ -Emission	Mittelfristig: grundsätzlich neue Materialien erforderlich

	durch die benötigte hohe Temperatur jedoch eingeschränkt. Eine Absenkung des Temperaturfensters kann die Breite der Anwendungsgebiete erheblich erweitern.	Ausreichende Transporteigenschaften zur Realisierung technischer Prozesse	Membranmaterialien mit neuen Eigenschaften. Angepasste Aktivierungs- und Regenerationskonzepte		
Neue Komposite (Kopplung mit Katalysatorfunktionalität)	In chemischen Prozessen kann die Transportfunktionalität der Membran erst durch die Beschichtung mit katalytisch aktiven Materialien genutzt werden. Eine vertiefte Erkenntnis über die Materialeigenschaften kann wirtschaftlich zugänglichen Prozesse erheblich erhöhen.	Gezielte Zugangsmöglichkeiten von maßgeschneiderten Kompositen durch z.B. Nano-/Mikro-Strukturierung, neuartige Integration von Membran und Katalysator. Erweiterung des Anwendungsspektrums bzgl. der Reaktionsklassen	Modelling: Gekoppelte Simulation/Modellierung der Bulkprozesse (Stofftransport in der Membran, Oberflächenchemie und Membranmaterial-Trägerinteraktion) Charakterisierung: Messungen der Reaktionsgeschwindigkeiten (Kinetik) an den Kompositen Synthese: Komposite mit neuartiger Katalysatorfunktionalität; Methoden zur Mikro-/Nanostrukturierung	Erweiterung der Anwendungen auf chemische Reaktionen wie zum Beispiel Dehydrierungen, Ammoniakherzeugung bei gleichzeitiger Reduktion der CO ₂ -Emission	Kurz- bis mittelfristig Sowohl neue Materialien als auch Optimierung der existierenden Systeme im Fokus
Komponenten-	Entscheidend für die wirtschaftliche Nutzbarkeit neuer	Optimierung der Komponentenfertigung entlang der Felder Material Scale-up, Moduldesign (v.a.	Modelling: Zusammenhänge zwischen Material/Katalysator, Apparate,	Verbesserung der Wirtschaftlichkeit membranbasierende chemischer Prozesse	Kurz- bis mittelfristig Sowohl neue Syntheserouten und Dichtmaterialien

	<p>applikationsrelevanter Kompositmembranen in industriellen Prozessen ist das Moduldesign / neue Möglichkeiten in der Komponentenfertigung. Die derzeit maximal zugängliche Größe der Membran in verfügbaren Bauteilen sowie deren Abdichtung stellt hier die Nutzbarkeit vor klare Grenzen.</p>	<p>Dichtkonzepte/Abdichtung) und Zusammenspiel Material, Apparate und System</p>	<p>Systeme Multiskalen Modellierung</p> <p>Synthese: Scale-up Festkörperchemie zur kostengünstigen Produktion großer Materialmengen für Membranen/Katalysator-Membran-Komposite</p> <p>Modulfertigung: Ganzheitliche Betrachtung des Zusammenspiels Material, Apparate, System, vor allem für neue alternative Dichtkonzepte</p>		<p>als auch Optimierung der existierenden Systeme im Fokus</p>
--	---	--	--	--	--

IV. Innovative Materialien für eine effiziente Rohstoffnutzung

Klimaschutz und die Schonung von Ressourcen erfordern unter anderem einen effizienten Umgang mit Rohstoffen. Dazu können innovative Materialien in verschiedenen Dimensionen beitragen. Materialien müssen dafür zum einen eine möglichst lange Nutzungsphase von Produkten in technischen Kreisläufen ermöglichen. Dafür müssen sie gegenüber heutigen Materialien ertüchtigt werden, teilweise mit neuen molekularen Konzepten, um Kreislauffähigkeit von der Entwicklungsphase an zu implementieren. Zum anderen müssen die Eigenschaften von Produkten und Materialien, die vornehmlich konsumtiv genutzt und in den natürlichen Kreislauf eintreten, der angestrebten Lebensdauer angepasst werden.

Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder u. gesamtgesellschaftlicher Nutzen	Perspektive (kurz-/mittel-/langfristig) und besondere Förderbedingungen
Nutzung alternativer Rohstoffquellen	Gegenwärtig wird der weitaus überwiegende Teil der Kunststoffe aus fossil basierten Rohstoffen hergestellt. Alternative Rohstoffquellen spielen bei der Materialherstellung im	Der Leitgedanke der linearen Ökonomie (<i>take-make-use-dispose</i>) bei der Materialherstellung muss durch das aktive Bestreben für das Schließen von Produktkreisläufen ersetzt werden. Konkret bedeutet das, den Anteil biobasierter Rohstoffe, Nebenprodukte industrieller Prozesse (CO ₂) sowie von	Es besteht ein Innovationsbedarf für geeignete Konversionstechnologien für alternative Rohstoffe in innovative Materialien. - Lignin als Rohstoff für Materialien (<i>lignin-to-materials</i>) bzw. als Rohstoff für die	Alle derzeitigen Anwendungsfelder für Kunststoffe, vornehmlich in technischen Kreisläufen. Lignin-basierte Materialien können in der Bauindustrie und Infrastruktur Verwendung finden. Darüber hinaus	Kurz- und mittelfristige Förderung von Grundlagenforschung (BMBF) sowie Förderung von Leuchtturmprojekten für den Nachweis der Skalierbarkeit der Technologien

	Allgemeinen eine untergeordnete Rolle heute.	Materialien am Ende ihrer Nutzungsperiode („ <i>End-of-life</i> “) signifikant zu erhöhen (Abfallströme z.B. Kunststoffe, Kunststoff-Metall-Verbünde wie in Elektronikschrott), um für neue Produkte einen vorteilhafteren Carbon Footprint zu realisieren	Herstellung von Basischemikalien zur Herstellung von polymeren Werkstoffen. Das umfasst u.a. die Valorisierung des Lignins durch geeignete Prozesse - Cellulose als Ausgangsstoff für die Herstellung von Nanocellulose und die Verwendung in Lightweight Composites - CO ₂ als Baustein für Intermediate für die Herstellung polymerer Materialien	liegen Anwendungsfelder in Konsumgütern, Verpackungen, Transport, Energiespeicherung sowie Landwirtschaft. Diese Beispiele umfassen die Verwendung als Baustein für polymere Materialien. Lightweight-Materialien sind von Bedeutung für alle Arten von Transportanwendungen.	Mittelfristig Förderung des Aufbaus von Pilotanlagen
Recycling-Technologien	Technologien, die ein Schließen von Materialkreisläufen ausgehend von <i>End-of-life</i> -Produkten gestatten. Angesichts der bestehenden Umweltverschmutzung können effiziente Recyclingverfahren dazu beitragen, Abfallströme zu Wertstoffströmen zu	Herausarbeiten und Entwickeln von Optionen für die Wiedergewinnung von Materialien bzw. Bausteinen (chemische Produkte, Metalle) Bewertung unterschiedlicher Recycling-Optionen hinsichtlich des inhärenten <i>Carbon Footprint</i> für den Gesamtprozess Entwicklung innovativer und robuster Verfahren für das physikalische, chemische und biologische	Recyclingverfahren für gemischte, konventionell nicht trennbare Gemische hoher materieller und gestalterischer Komplexität, wie z.B. elektronische Geräte, photovoltaische Anlagen, Windkraftanlagen, Batterien, Composit-Materialien Chemisches Feedstockrecycling für gemischte Kunststoffe (z.B. Shredderleichtfraktionen) Chemisches Monomerrecycling	Verpackungsindustrie Fahrzeugindustrien e-Mobilität Gewinnung erneuerbarer Energien Maschinenbau Elektrik & Elektronik	Mittel-/langfristig

	<p>entwickeln. Das Schließen von Stoff- bzw. Materialkreisläufen trägt so zur Ressourcenschonung und dem Abbau von umweltakumulierten Abfällen bei.</p> <p>Recycling ist dabei eine Strategie, die Materialeffizienz zu erhöhen.</p>	<p>Recycling von Kunststoffen</p>	<p>für gezielte Gewinnung von Monomeren und Oligomeren (thermisch-katalytische Depolymerisationen)</p> <p>Neue Ansätze für physikalische Separation chemisch ähnlicher Polymere</p> <p>Biologisches (enzymatisches Recycling) von Kunststoffen zu Monomeren bzw. Feedstock (Erweiterung des Anwendungsspektrums über Polyester hinaus)</p> <p>Chemische Verfahren zur Rückgewinnung von Edel- bzw. Magnetmetallen (selektives Herauslösen aus Stoffgemischen)</p>		
Materialdissipation	<p>Hervorgerufen durch chemische und physikalische Vorgänge während der Nutzung (wie z.B. Reibung, Verwitterung, etc.) trägt Materialdissipation zur</p>	<p>Verständnis grundsätzlicher Mechanismen der Entstehung und des Eintrags von Materialpartikeln sowie Monitoring während des gesamten Lebenszyklus</p> <p>Entwicklung von anwendungsspezifischen Ansätzen für ein ganzheitliches Management von</p>	<p>Verständnis von globalen Partikelkreisläufen in allen beteiligten Sphären mit einem breiten Ansatz bezüglich Entstehung, Transportmechanismen, Akkumulation und Auswirkungen von Partikeln wie z.B. Mikroplastik</p>	<p>Fahrzeugindustrie (Platin aus Abgaskatalysatoren, Reifenabrieb)</p> <p>Branchenübergreifende Anwendungen von Coatings</p> <p>Alle Arten von Kunststoff-</p>	<p>Mittel- und langfristig</p> <p>Grundlagenorientierte Forschung in breiten Konsortien</p>

	unerwünschten Eintragung von feingeteilten Materialpartikeln in die Umwelt bei.	dissipativen Materialverlusten Reduzierung unerwünschter Materialverluste durch Dissipation		anwendungen	
Hochfunktionelle Materialien	Ein Paradigma bisheriger Materialentwicklung ist die Additivierung und Kombination von Kunststoffen für die Erzielung gewünschter Funktionalitäten (wie z.B. Barrierefunktion, Flammschutz). Die Strategien tragen zu erhöhter Komplexität bei, welche sich in Recyclingprozessen nachteilig auswirkt.	Reduzierung von Komplexität für die Erzielung gewünschter Effekte, Entwicklung von Materialien mit intrinsischen Funktionalitäten, um Additivierung zu vermeiden	Untersuchung von Ansätzen wie z.B. „Function-by-structure“ oder „structure-by-process“ um breite Anwendungsspektren für Basismaterialien anhand von Strukturvariationen einstellen zu können Entwicklung von strukturellen Materialien mit Speicherfunktionen	Energieindustrie E&E Transport-/Automobilindustrie Bauindustrie Verpackung	Kurz- und mittelfristig Grundlagenorientierte Suchforschung Mittel- bis langfristig Breite Konsortien entlang der Wertschöpfungsketten, um schnelle Übertragung von Ergebnissen in Leitwendungen sicherzustellen
Recyclingfähigkeit/Rezyklierbarkeit	Die Rückgewinnung materieller Rohstoffe bzw. das Recycling sind kritische Anforderungen für einen nachhaltigen	Ganzheitliche Betrachtung des Lebenszyklus von Produkten respektive der Materialien. Implementierung von „Design-for-recycling“ – Richtlinien bereits in der Konzeptionsphase, um ein	Entwicklung neuer polymerer Werkstoffe mit signifikant höheren Lebensdauern (z.B. durch intrinsische „Reparaturfunktion“)	Alle Arten von Kunststoffanwendungen (prioritär Verpackungen)	

	Umgang mit Ressourcen. End-of-life-Szenarien werden von Herstellern oftmals in nur ungenügendem Maß berücksichtigt.	leichteres Zerlegen, einfachere Reparaturen, und Materialtrennung und letztlich auch Recycling zu erleichtern. Substitution von Materialien und Materialverbänden mit unvoreilhaftem Carbon Footprints und nachteiligen Recyclingeigenschaften.	Konzepte für Materialien mit reversiblen und gezielt durch externe Stimuli schaltbaren Bindungen („ <i>de/bonding-on-demand</i> “)		
--	---	---	--	--	--

V. Materialien für die heterogene Katalyse

Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder u. gesamtgesellschaftlicher Nutzen	Perspektive (kurz-/mittel-/langfristig) und besondere Förderbedingungen
chem. Produktionsprozesse mit Zero-CO ₂ -emission	Um das Ziel der „Zero-Emission Economy“ in nur 30 Jahren erreichen zu können müssen neue	In nur ca. 20 Jahren neue chem. Produktionsprozesse auf Basis nachhaltig produzierter Elektrizität als Energiequelle bei gleichzeitigem Schließen aller Stoffströme	Elektrisch beheizte Produktionsreaktoren werden sich technologisch bei Verwendung bekannter Wärmeträgermedien nicht sehr von den bekannten Technologien unterscheiden.	Alle katalysierten chem. Produktionsprozesse. Keine CO ₂ -Emission der gesamten Produktionsprozesse.	Mittelfristig (nur 20 Jahre Entwicklungszeit) Verbundprojekte unter Integration aller benötigten Wissenschaftsfelder sind nötig, jeweils um die zu

	chem. Produktionsprozesse in sehr kurzer Zeit entwickelt werden.		Der wesentlich Innovationsbedarf für Katalysatorsysteme ist in der Anforderung begründet, dass in diesen neuartigen chem. Produktionsprozessen keine Abfallstoffe, z.B. CO ₂ , mehr anfallen dürfen. Es müssen Katalysatormaterialien entwickelt werden mit bisher unerreichten Selektivitäten bei gleichzeitig industriell relevanten Produktivitäten.	Vermeidung aller Abfallströme / Nebenprodukte. Schließen aller Stoffströme.	entwickelnden, neuen Prozesse zentriert.
chem. Produktionsprozesse mit Zero-CO ₂ -emission	Die nachhaltige Produktion elektrischer Energie (CO ₂ -frei) könnte zumindest an einigen Standorten zu tages- und jahreszeitlichen Schwankungen der bereitgestellten Menge an Energie führen. Deshalb müssen neue chem. Produktionsprozesse	Neue innovative katalytischer Prozesse, die höchst flexibel auf schwankende Energiebereitstellung reagieren ohne, die auf Grund des Gebots der Vermeidung jeglicher Abfallströme, notwendige höchsten Produktselektivitäten zu verlieren. Optimalerweise behalten diese neuen innovativen Katalysatormaterialien auch die angestrebten hohen Produktivitäten unter der schwankenden Energiebereitstellung.	Neuartige Katalysatorsysteme mit großen Arbeitsfenstern, die auf schwankende Energiebereitstellung unempfindlich bezüglich ihres Selektivitätsspektrum und optimalerweise auch ihrer Produktivität reagieren	Alle katalysierten chem. Produktionsprozesse, die möglicherweise schwankender Energiebereitstellung unterliegen. Keine CO ₂ -Emission der gesamten Produktionsprozesse. Vermeidung aller Abfallströme / Nebenprodukte. Schließen aller Stoffströme.	Mittelfristig (nur 20 Jahre Entwicklungszeit) Verbundprojekte unter Integration aller benötigten Wissenschaftsfelder sind nötig, jeweils um die zu entwickelnden, neuen Prozesse zentriert.

	auf Basis dieser schwankenden, Energiebereitstellung entwickelt werden.				
chem. Produktionsprozesse mit Zero-CO ₂ -emission	Entwicklung neuer chem. Produktionsprozesse auf Basis schwankender, nachhaltig produzierter, elektrischer Energie.	Innovative, synthetische <u>elektrokatalytische</u> Prozesse: Elektrokatalyse ist bereits jetzt ein stark wachsendes Betätigungsfeld in der akademischen Forschung. Elektrokatalyse spielt aber bisher in der industriellen FuE keine herausragende Rolle. Verbundprojekte zw. Industrie und Akademia sollen das wirtschaftliche Potential möglicher elektrokatalytischer Prozesse zur Stoffsynthese herausarbeiten, um den Weg für mögliche zukünftige industrielle Anwendungen zu bereiten.	Neue heterogene Elektrokatalysatormaterialien für den Einsatz in innovativen direkt durch elektrischen Strom getriebenen Prozessen für die synthetische Chemie. Solche neuartigen Materialien für elektrochemische Prozesse werden sich durch besondere elektronische und ionische Leitfähigkeiten auszeichnen, die für die Umsetzungen der jeweiligen organischen Substrate zu den Zielprodukten maßgeschneidert werden müssen.	Alle potentiell elektrokatalytischen Produktionsprozesse für die organische Synthese, die möglicherweise auch schwankender Energiebereitstellung unterliegen. Keine CO ₂ -Emission der gesamten Produktionsprozesse. Vermeidung aller Abfallströme / Nebenprodukte. Schließen aller Stoffströme.	Verbundprojekte aus Akademia und Industrie unter Integration aller benötigten Wissenschaftsfelder, die auf die zu entwickelnden, neuen elektrokatalytischen Prozesse fokussiert werden.

Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder u. gesamtgesellschaftlicher Nutzen	Perspektive (kurz-/mittel-/langfristig) und besondere Förderbedingungen
Nachhaltigkeitsziel: Kreislaufwirtschaft	Geschlossene Materialströme, um Abfallströme zu vermeiden, führen zu neuen, aus bisherigen Abfällen erzeugten Rohstoffen mit bisher unbekanntem Eigenschaften, und vermutlich stark wechselnden Qualitäten.	Herkömmliche Prozesstechnologien und die in ihnen eingesetzten Katalysatormaterialien zeigen bisher nicht die wirtschaftlich notwendige Effizienz (Selektivität, Produktivität, Lebenszeit) bei schwankenden Rohstoffeigenschaften. Deshalb erzwingt das Nachhaltigkeitsziel 'Kreislaufwirtschaft' bisher unerreichter Produktselektivitäten der zu entwickelnden neuartigen Katalysatormaterialien und Produktionsprozessen. Schwankende Rohstoffeigenschaften / -qualitäten dürfen sich nicht negativ auf die Prozessperformance, z.B. die Standzeit eingesetzter Katalysatoren auswirken.	Neue, vermutlich deutlich komplexere Katalysatormaterialien als bisher bekannt müssen entwickelt werden, die gegenüber schwankenden Rohstoffeigenschaften, wie z.B. der Anwesenheit einer Vielzahl von bisherigen Katalysatorgiften tolerant sind und im Vergleich zum Stand der Technik vergleichbare Produktivitäten und Standzeiten zeigen.	Alle katalysierten Produktionsprozesse müssen auf Kreislaufwirtschaft umgestellt werden, so dass Abfallströme in Zukunft vermieden werden können.	Mittelfristig (nur 20 Jahre Entwicklungszeit) Verbundprojekte unter Integration aller benötigten Wissenschaftsfelder sind nötig, jeweils um die zu entwickelnden, neuen Prozesse und den in ihnen einzusetzenden Katalysatoren zentriert.

Nachhaltigkeitsziel: Kreislaufwirtschaft	<p>Wiss. Gesellschaften weltweit haben in Studien Listen sog. „endangered elements“ erarbeitet. Chem. Elemente, wie z.B. Zn, Sn, Ga, Ge, Sb, Bi, Ag, Rh, Pt, Ru, Ir, Ta, Te, V, Mo, Mg, Li, Co, Ni, uvm. Werden in einigen Jahrzehnten verknappen und deren Preise werden erheblich steigen. Diese kritischen Elemente, sofern in der Herstellung katalytischer Materialien eingesetzt, müssen recycelt werden.</p>	<p>In Katalysatoren eingesetzte Elemente müssen als zukünftige, kritische Rohstoffe angesehen und recycelt werden.</p>	<p>Recyclingprozesse von komplexen Katalysatorkompositmaterialien müssen entwickelt werden. Eine besondere Herausforderung besteht hier v.a. darin, dass industrielle Katalysatoren hochkomplexe Kompositmaterialien sind, die nicht einfach in ihre Komponenten aufgetrennt werden können. Daher müssen möglichst preisgünstige Aufarbeitungs- und Recycle-Prozesse entwickelt werden, um diese wertvollen Rohstoffe so zurückzugewinnen, dass sie einer Wiederverwertung in der Produktion neuer Katalysatoren zugeführt werden können. Im Wiedereinsatz in der Katalysatorherstellung besteht die weitere große Herausforderung, da die HT-Katalysatoren sich nur durch Einsatz besonders qualifizierter Rohstoffe herstellen lassen. Die zu entwickelnden Recycling-Prozesse müssen also höchste Produktqualitäten garantieren.</p>	<p>Für die meisten der bisher in der Industrie eingesetzten Prozesskatalysatoren müssen Recycling-Verfahren entwickelt werden; Alle zukünftigen Katalysatormaterialien müssen von Beginn der R&D-Arbeit an unter dem holistischen Aspekt der 100%igen Rezyklierung entwickelt werden; Vermeiden von Abfallströmen.</p>	<p>Mittelfristig (nur ca. 20 Jahre Entwicklungszeit) Verbundprojekte unter Integration aller benötigten Wissenschaftsfelder sind nötig, die jeweils auf die zu entwickelnden, neuen Recyclingprozesse der jeweiligen Katalysatormaterialien fokussieren.</p>
--	---	--	---	--	---

Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themen-feld	Themeneinord- nung und Charak- terisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder+ ge- samtgesellschaftlicher Nut- zen	Perspektive (kurz-/mittel- /langfristig) und besondere Förderbedingungen
Ressourcenschonung	Bereits jetzt sehr teure Stoffe/Elemente, oder in naher Zukunft durch Verknappung teure Rohstoffe müssen in der Katalysatorherstellung vermieden werden. Deshalb muss bereits jetzt frühzeitig nach ubiquitären, billigen Ersatzstoffen gesucht werden.	Neue Katalysatormaterialien auf Basis ubiquitärer, billiger oder preislich stabiler Rohstoffe/Elemente müssen entwickelt werden, wobei deren katalytische Leistungsfähigkeit voll mit dem Stand der Technik vergleichbar sein muss, um die von der chem. Industrie benötigte Produktivitäten und Standzeiten zu garantieren.	Zukünftige Katalysatorsysteme müssen, wo immer möglich, ohne teure oder (inzwischen) seltene Elemente, bzw. zukünftig verknappte und damit teure Rohstoffe hergestellt werden. Sie müssen bevorzugt auf Basis ubiquitärer Materialien und Stoffen herstellbar sein. Die Recyklierbarkeit dieser neuen alternativen Katalysatoren ist von Anfang an ein integraler Bestandteil ihrer Entwicklung. Diese neuen alternativen Katalysatormaterialien müssen hocheffizient vergleichbar mit dem Stand der Technik in ihren Prozessen funktionieren.	Die meisten der bisher in der Industrie eingesetzten Prozesskatalysatoren müssen daraufhin untersucht werden, ob möglicherweise billige, ubiquitäre Ersatzstoffe für teure o. seltene Rohstoffe gefunden werden können; Alle zukünftigen Katalysatormaterialien müssen von Beginn der FuE-Arbeit die Verwendung billiger Ersatzstoffe und die Entwicklung adäquater Recyclingverfahren berücksichtigen. Vermeiden von Abfallströmen. Schonung von „endangered resources“.	Mittelfristig (nur ca. 20 Jahre Entwicklungszeit) Verbundprojekte unter Integration aller benötigten Wissenschaftsfelder sind nötig, die jeweils auf die zu entwickelnden, neuen Katalysatormaterialien auf Basis billiger, ubiquitärer Rohstoffe fokussieren.

Ressourcenschonung	Die industrielle Herstellung von Katalysatoren selbst muss ebenfalls unter den Rahmen Bedingungen „Zero-CO ₂ “ und geschlossener Stoffströme erfolgen.	Die Rahmenbedingung „Zero-CO ₂ “ und geschlossene Stoffströme müssen auch in der industriellen Produktion bestehender und zukünftiger, hoch-komplexer Katalysatorsysteme realisiert werden. Bisher werden nahezu alle großtechnischen Prozesskatalysatoren z.B. wenigstens einem Kalziumschritt mit entsprechender CO ₂ -emission unterzogen. Weitere Abfallströme aus den Herstellungsprozessen sind z.Z. ebenfalls noch nicht in allen Fällen geschlossen.	Verfahren zur großtechnischen Herstellung der zukünftigen, hochkomplexen Katalysatormaterialien müssen unter Berücksichtigung der Vorgaben „Zero-CO ₂ “ und Schließen aller Stoffströme innerhalb der nächsten 20 Jahre entwickelt werden.	Herstellungsverfahren für alle bestehenden Prozesskatalysatoren müssen umgestellt werden. Verfahren zur Produktion zukünftiger, innovativer Katalysatormaterialien müssen von Beginn an unter diesem holistischen Aspekt des Schließens aller Stoffströme, somit dem Vermeiden von Abfallströmen und dem Vermeiden von CO ₂ -Emissionen entwickelt werden	Mittelfristig (nur 20 Jahre Entwicklungszeit); Verbundprojekte aus Akademie und Industrie der jeweiligen Fachbereiche aus Verfahrenstechnik und Chemie, die jeweils um bestehende Verfahren zur Katalysatorherstellung zentriert sind, oder sich auf Verfahrensentwicklung zukünftiger, innovativer Katalysatormaterialien fokussieren.
Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder+ gesamtgesellschaftlicher Nutzen	Perspektive (kurz-/mittel-/langfristig) und besondere Förderbedingungen
Ressourcenschonung	Bestehende, großtechnisch eingesetzte Katalysatorträger sind oftmals als Keramiken bzw. aus	Ersetzen der hochtemperaturgesinterten Spezialkeramiken als Katalysatorträger, da hierbei erhebliche Mengen an CO ₂ freigesetzt wird.	Neuartige, evtl. sogar chem. aktive Katalysatorträgermaterialien, die bei niedrigen Temperaturen auf Basis nachhaltiger Rohstoffe hergestellt werden können und optimalerweise	Alle großtechnisch eingesetzten und geträgerten Prozesskatalysatoren müssen darauf untersucht werden, ob die herkömmlich genutzten keramischen oder metallischen	Mittelfristig (nur 20 Jahre Entwicklungszeit) Verbundprojekte von Akademie und Industrie aus den Bereichen Bioanorganische Chemie, Anorganische

	<p>Stahl gefertigt, bei deren Herstellung sehr hohe Temperaturen für deren Brand nötig sind, mit entsprechend hohem Verbrauch an Erdgas zur Feuerung. Es müssen neuartige, nachhaltiger hergestellte Katalysatorträger entwickelt werden, bei deren Produktion geringere CO₂-Footprints realisiert werden können.</p>		<p>ebenfalls positiv auf die katalytische Performance wirken.</p>	<p>Träger durch neuartige nachhaltig hergestellte Materialien ersetzt werden können; Ein Ersatz würde z.E. zur Energieeinsparung und damit Verringerung der CO₂-Emission beitragen, u.a. könnten nachhaltigere Materialien, z.B. basierend auf Biomineralisierung gefunden werden. Bei der Entwicklung zukünftiger, innovativer Katalysatormaterialien für die „Zero-CO₂“-Kreislaufwirtschaft muss der Aspekt der Verwendung nachhaltiger Träger ein integraler Aspekt eines holistischen Projektansatzes sein.</p>	<p>Chemie, Materialwissenschaft, Katalyse und Verfahrenstechnik, die jeweils um bereits bestehende oder zukünftige neu zu entwickelnden Katalysatormaterialien zentriert sind.</p>
Ressourcenschonung	<p>Bisherig eingesetzte, großtechnische Prozesskatalysatoren basieren oftmals auf fundamentalen Entwicklungen, die vor dutzenden</p>	<p>Neuartige zukünftige Katalysatormaterialien sollen nicht (nur) auf Basis herkömmlicher (i.d.R.) außereuropäischer Rohstoffquellen entwickelt werden. Neue Rohstoffquellen wie z.B. aus dem Urban Mining müssen von Anfang an</p>	<p>Die industrielle Produktion von Prozesskatalysatoren in der EU hängt in sehr großem Maße von außereuropäischen Rohstoffquellen ab. Die Produktion von zukünftigen Katalysatormaterialien für die Kreislaufwirtschaft würde also wie im status-quo</p>	<p>Alle z.Z. großtechnisch eingesetzten Prozesskatalysatoren müssen darauf untersucht werden, ob Rohstoffe zu deren Herstellung aus herkömmlichen Quellen gegen neue, innereuropäische Quellen (Recycling, Urban</p>	<p>Mittelfristig (nur 20 Jahre Entwicklungszeit) Verbundprojekte von Akademie und Industrie aus den Bereichen Anorganische Chemie, Materialwissenschaft, Geowissenschaften, Katalyse und</p>

	<p>von Jahrzehnten gemacht wurden. Diese Katalysatorherstellvorschriften wurden nachfolgend in vielen Schritten weiter verbessert und zu immer höherer Effizienz optimiert. Rohstoffe zur großtechnischen Produktion solcher Hochleistungskatalysatoren sind deshalb aber auch seit Jahren oftmals festgeschrieben. Möglicherweise könnte die Verwendung neuartiger Rohstoffquellen (z.B. aus Urban Mining) für zukünftige, innovative</p>	<p>in die Materialentwicklungsprojekte integriert werden. Derartige neue Rohstoffquellen müssen auch auf ihre Tauglichkeit für die Produktion bestehender Katalysatorsysteme untersucht werden.</p>	<p>erheblich von unbegrenztem Zugang zu diesen Rohstoffquellen abhängen (z.B. von China hauptsächlich kontrollierter Markt der Seltene Erden). Zukünftige, hoch innovative Katalysatormaterialien sollten nicht unter einer derart prekären Marktabhängigkeit entwickelt werden. Darüber hinaus darf durchaus vermutet werden, dass durch Auffinden alternativer Rohstoffquellen, z.B. Urban Mining, und Einsatz dieser neuen Stoffe neue, unerwartet positive Katalysatoreigenschaften zum Vorschein treten.</p>	<p>Mining) ausgetauscht werden können; Bei der Entwicklung zukünftiger, innovativer Katalysatormaterialien für die „Zero-CO₂“-Kreislaufwirtschaft muss der Aspekt alternativer Rohstoffquellen, die die Abhängigkeit vom Ausland reduziert ein integraler Bestandteil des holistischen Entwicklungsansatzes sein.</p>	<p>Verfahrenstechnik (Recycling), die jeweils um bereits bestehende oder zukünftige neu zu entwickelnde Katalysatormaterialien zentriert sind.</p>
--	--	---	---	--	--

	Katalysatormaterialien in der „Zero-CO ₂ -Kreislaufwirtschaft“ neue interessante Eigenschaften ergeben.				
Ressourcenschonung	Herkömmliche Produktionsverfahren von Prozesskatalysatoren beruhen zum Großteil auf fundamentalen Entwicklungen aus der Mitte des letzten Jahrhunderts. In der akademischen Forschung wurde in den letzten zwei / drei Jahrzehnten eine Vielzahl innovativer Syntheserouten zu neuen Materialien entwickelt. Deren	In der akademischen Forschung wurde in den letzten zwei / drei Jahrzehnten eine Vielzahl innovativer Syntheserouten zu neuartigen Katalysatorsystemen beforscht und auf Labormaßstab entwickelt. Diese Methoden reichen von chemical grafting, atomic layer deposition, „chimie douce“, oder biomimetischen Syntheserouten, bis zum Einsatz alternativer Energiequellen in der Katalysatorsynthese, wie z.B. Plasmen, mechanische Energie, Ultraschall, Mikrowellen, etc. Die Katalysatorsysteme, die oftmals so hergestellt werden, sind ebenfalls hoch innovativ, und reichen von atomar definierten „single-site“ Katalysatoren, bio-mimetischen „Enzym“-	Im Stand der Technik werden Industriekatalysatoren oftmals durch vergleichsweise einfache Chemie in wässrigem Lösungsmittel und durch nachfolgende Behandlungsschritte (z.B. oxidierend oder reduzierend) bei vergl. hohen Temperaturen hergestellt. Entsprechend sind die Materialeigenschaften im Rahmen dessen limitiert, was mit den benutzten Technologien eben möglich ist. „Step-Change“ Verbesserungen können nach Jahrzehnten kontinuierlicher Materialoptimierung nicht mehr erwartet werden. Innovative, neue Syntheserouten und -methoden, die in der akademischen Forschung	Diese neuen, innovativen Syntheserouten und -methoden müssen auf ihre Eignung zur Herstellung bereits existierender Katalysatormaterialsysteme geprüft werden. Bei der Entwicklung neuer Materialien für zukünftige katalytische Prozesse der Zero-CO ₂ Kreislaufwirtschaft müssen diese neuartigen Methoden von Projektbeginn an mit beforscht und auf ihre Scale-Up Tauglichkeit geprüft werden. Auf diese Weise hergestellte neuartige Katalysatormaterialien sollten möglichst breit ausgreifend auf potentielle hin Anwendungsgebiete hin untersucht werden.	Mittelfristig (nur 20 Jahre Entwicklungszeit) Verbundprojekte aus akademischen und industriellen Arbeitsgruppen müssen geschaffen werden, die um die jeweiligen neuen innovativen Syntheserouten und -methoden zentriert sind. Besonderes Augenmerk muss hierbei auf Verfahrenstechnik gelegt werden, um identifizierte, erfolgreiche Herstellmethoden für innovative, zukünftige Katalysatorsysteme zu Produktionsprozessen hochskalieren zu können.

	<p>Potenzial zur Produktion von bestehenden Katalysatorsystemen und vor allem zukünftiger neuartiger katalytischer Materialien muss breit beforscht werden.</p>	<p>Katalysatoren, bis hin zu den inzwischen gut beforschten Metall-Organischen-Frameworks und neuartigen Polymeren als Katalysatorträger.</p>	<p>während der letzten 20 - 30 Jahre auf Labormaßstab beforscht wurden, müssen auf ihre Scale-Up Eignung untersucht werden und derart hergestellte Materialien müssen auf ihre Tauglichkeit als industrielle Prozesskatalysatoren (Produktivität, Standzeit) geprüft werden.</p>		
Ressourcenschonung	<p>Additive Manufacturing, vor allem wenn Katalysator plus Reaktor zusammen maßgeschneidert für den jeweiligen Einsatz gedruckt werden könnten, dürfte zukünftig chemische Syntheseprozesse revolutionieren. Noch steckt diese Technologie im Bereich heterogen-katalysierte</p>	<p>Additive Manufacturing wird in Zukunft ermöglichen die integrale Einheit aus Synthesereaktor und Prozesskatalysator auf mehreren Größenskalen in Richtung auf maximale Performance zu optimieren.</p>	<p>Erhebliche Reaktoreffizienzsteigerungen sind durch Optimierung des Stoff- und Wärmetransports auf mehreren Größenskalen, von einigen Metern (Reaktor) bis, eines Tages vielleicht möglichen, einigen Mikrometern (geometrische Katalysatoroberfläche, Formkörper), denkbar; Auf diese Weise erreichte Effizienzsteigerungen werden zu deutlicher Energieeinsparung und Ressourcenschonung (höhere Selektivitäten zu Zielprodukten, höhere Reaktorproduktivitäten) führen.</p>	<p>Bei der Beforschung und Entwicklung neuer Materialien für zukünftige katalytische Prozesse der Zero-CO₂ Kreislaufwirtschaft muss additive manufacturing als potentielle Produktionsmethode von Projektbeginn an mit bearbeitet und auf sein Potential zusätzliche Effizienzsteigerungen zu hebeln geprüft werden. Neue, innovative Katalysatormaterialien sollten möglichst breit ausgreifend auf ihre potentiellen Einsatzmöglichkeiten in Additive</p>	<p>Mittelfristig (nur 20 Jahre Entwicklungszeit). In allen Verbundprojekten aus akademischen und industriellen Arbeitsgruppen muss das Thema additive Manufacturing von Beginn an bearbeitet werden. Es muss vermutet werden, dass für jedes Katalysatormaterial, für jeden neuen Prozess Additive Manufacturing Technologien neu angepasst oder gar erst entwickelt werden müssen, um optimale Reaktor-Katalysator Performances zu</p>

	<p>Prozesse, Reaktoren in den Kinderschuhen, aber sein Potential kann nicht überschätzt werden.</p>		<p>Weitere Energieeffizienzsteigerungen sind vorstellbar, in dem z.B. Kombinationen von Materialien mit unterschiedlichen thermischen Eigenschaften in gemeinsame Strukturen gedruckt werden, die so z.B. chemical looping unter Energiespeicherung „vor Ort“ mit höherer Effizienz ermöglichen.</p>	<p>Manufacturing Prozessen untersucht werden.</p>	<p>erreichen. Man kann davon ausgehen, dass eine Vielzahl an technischen Hürden zu überwinden sein wird, um ein Beispiel zu nennen: Realisierung des nötigen, regelmäßigen Katalysatorwechsels in gedruckten Strukturen.</p>
Energie- und Ressourcenschonung	<p>In situ Charakterisierungsmethoden in der Materialentwicklung, kombiniert mit Data Science</p>	<p>In der akademischen Katalysatorforschung wurden/werden bisher in-situ und in-operando Methoden vor allem dazu eingesetzt um elektronische oder molekulare Strukturen von Katalysatoren vor dem Einsatz, während des Betriebs, oder nach ihrer Benutzung zu charakterisieren. Viele dieser sich noch immer in rasanter Entwicklung befindlichen high end Methoden wurden bislang nur sehr selten dazu genutzt, die phys.-chemischen Prozesse während vielstufiger Katalysatorherstellverfahren näher zu charakterisieren und somit diese</p>	<p>Der Einsatz vieler dieser modernen, direkten Charakterisierungsmethoden in den angestrebten Verbundprojekten werden es ermöglichen chemische Prozesse, die bei der Synthese von Katalysatoren ablaufen, wesentlich besser zu verstehen und somit kontrollier- und steuerbar zu machen. Wenn diese durch in situ Methoden zukünftig verbessert gesteuerten Prozessschritte in der Katalysatorproduktion ihren Einsatz finden, vor allem wenn kombiniert mit den bereits existierenden Felddaten und</p>	<p>In allen Verbundprojekten zur Beforschung und Entwicklung neuer Materialien für zukünftige katalytische Prozesse der Zero-CO₂ Kreislaufwirtschaft müssen moderne in situ Methoden eingesetzt werden, um physikochemische Abläufe in allen Prozessschritten der Katalysatorproduktion zu charakterisieren umso die Datenbasis für die verbesserte Steuerung dieser Prozesse in der Produktion dieser zukünftigen Materialien zu schaffen.</p>	<p>Mittelfristig (nur 20 Jahre Entwicklungszeit) In allen Verbundprojekten aus akademischen und industriellen Arbeitsgruppen muss das Thema in-situ /in-operando Charakterisierungsmethoden von Beginn an mit bearbeitet werden. Es muss vermutet werden, dass der Einsatz dieser modernen Methoden in einem jeden Herstellschritt eines jeden Katalysatormaterials neue Erkenntnisse liefern werden, die es im Gegenzug erlauben werden, diese</p>

		<p>besser versteh- und steuerbar zu machen.</p> <p>In-situ oder in-operando Methoden werden noch seltener in der Katalysatorindustrie als in der akademischen Welt genutzt, weil diese modernen Methoden oftmals sehr teuer in der Anschaffung und im Unterhalt sind.</p>	<p>Methoden der Data Science, werden sie es ermöglichen Materialeigenschaften auch im Tonnenmaßstab einer Produktion konsistent einzustellen und möglicherweise für Spezialanwendungen maßzuschneidern. Dieses vertiefte Wissen über alle Herstellschritte mittels moderne in situ Methoden wird es darüber hinaus erlauben, industrielle Katalysatorherstellprozesse noch energie- und rohstoffeffizienter zu steuern.</p>	<p>Darüber hinaus sollten Verbundprojekte aufgesetzt werden mit dem Ziel existierende Katalysatorproduktionsverfahren mit Hilfe dieser in situ Methoden zu untersuchen. Da herkömmliche Katalysatormaterialsysteme vermutlich noch die nächsten drei Dekaden ihren industriellen Einsatz finden werden, muss man auch deren großtechnische Herstellung mit Hilfe dieser in situ Methoden effizienter und konsistenter steuerbar machen.</p>	<p>Materialproduktionsprozess besser zu kontrollieren und zu steuern. Derartig kontrolliert hergestellte Katalysator-materialien werden wesentlich verbesserte und konsistentere Katalysatorleistungsfähigkeiten erreichen.</p>
--	--	---	---	---	---

VI. Materialien für das Additive Manufacturing

Zukunftsthemen & Nutzen					
Kategorie/ Themenfeld	Themeneinordnung und Charakterisierung	Zielsetzungen	Innovationsbedarf	Anwendungsfelder u. gesamtgesellschaftlicher Nutzen	Perspektive (kurz-/mittel-/langfristig) und besondere Förderbedingungen
Modellierung / Simulation	Material-Prozess-Eigenschaftsbeziehungen; Prozessrealität und resultierende Bauteileigenschaften; Segmentierte Bauteilfertigung; Optimierung der Nachbearbeitung	Erhöhung der Bauteilzuverlässigkeit, Steigerung der Material- und Rohstoffeffizienz; Hilfestellung bei der Verfahrensauswahl der zum Bauteil und zum Werkstoff passenden AF-Methode; Reduzierung des Nachbearbeitungsaufwandes; Eigenschaftsvorhersage für Multimaterialbauteile	Entwicklung geeigneter Methoden zur Eigenschaftsvorhersage und zur Verfahrensauswahl der Verarbeitung bestimmter Werkstoffe sowie zur segmentierten, fertigungs- bzw. materialoptimierten Bauteilfertigung; Schaffung von Werkstoffdatenbanken	Anwendung in allen Einsatzfeldern der AF; Erleichterung des Einstiegs von Bauteilfertigern in die AF	Mittel-/langfristig Einbindung von AF-Neueinsteigern; interdisziplinäre Vorlauforschung; BMBF-Förderung für Material-Data-Space
Hybride Fertigungsverfahren	Kombination von AF-Verfahren untereinander sowie mit konventionellen Formgebungsmethoden; Fügen	Erreichung einer höheren Bauteilkomplexität; Steigerung der Effizienz der Prozesse durch einen bedarfs- bzw. aufwandsgerechten Einsatz konventioneller und AF-Methoden; segmentierte	Weiterentwicklung von Verfahren zur hybriden Fertigung zur Erweiterung des Einsatzgebietes der AF z. B. zur Fertigung großer oder multiskaliger Bauteile;	Einsatzfelder mit Bedarf an Multiskalen-Bauteilen und komplexen Baugruppen, wie z. B. Medizintechnik, Luft- und Raumfahrt, Telekommunikation, Geräte- und	Kurz-/Mittelfristig Verbundprojekte mit Branchenausrichtung; BMWi-Förderung für flexible, individualisierte Bauteilfertigung in Kombination mit

	von Bauteilsegmenten	Bauteilfertigung; Individualisierung/Personalisierung von Serienbauteilen	Implementierung Faser-3D-Druck; Hybridverfahren für kurze Zykluszeiten	Anlagenbau, Leichtbau	konventionellen Fertigungsverfahren
Multimaterialsysteme	Kombination von verschiedenen Werkstoffen und Werkstoffklassen; Funktionsintegration (z.B. Sensorik, Aktorik, Temperaturierbarkeit)	Erweiterung der AF von Mono- zu Multimaterialanwendungen; Multifunktionalisierung von Bauteilen; Einsparung von Fügeprozessschritten und Entwicklung neuer Material- und Eigenschaftskombinationen; Entwicklung neuer Funktionsmaterialien	Werkstoff-Interface-Design für neue Werkstoffverbunde; gradierte Bauteilstrukturen; Werkstoffqualifizierung durch entsprechende Vorbehandlung (z. B. Mahlung, Coating, Konfektionierung);	Branchenübergreifendes Anwendungsfeld, gerichtet auf Bauteile mit neuen Funktionalitäten	Mittel-/langfristig Interdisziplinäre Vorlauforschung, Verbundprojekte, BMBF-Förderung für Einbindung neuer Materialsysteme und Materialkombinationen in AF (insb. Funktionsmaterialien)
In-operando Prüf- und Evaluierungsverfahren	Zerstörungsfreie und Echtzeit-Prüfmethoden als in-line Prozesskontrolle und zur Datengenerierung für Data-Management; In-line Monitoring;	Zeit- und Ressourceneffizienz durch Vermeidung und Reduzierung von Prozessfehlfunktionen und Ausschussbauteilen; Schaffung einer Prozessdatenbasis für Selbstlernende AF-Anlagen unter Nutzung von ML- oder KI-Methoden; Erarbeitung von Qualitätssicherungsmaßnahmen	Entwicklung neuer NDT-Prüfmethoden bzw. Einbindung existierender Prüfmethoden in AF-Anlagentechnik; Erstellung einer geeigneten Prozessdatenbank	Branchenübergreifendes Anwendungsfeld; Erhöhung der Zuverlässigkeit und Reproduzierbarkeit von AF-Methoden; Anlagenbau (Qualitätssicherung)	Kurz-/mittelfristig Interdisziplinäre Vorlauforschung; Verbundprojekte unter Einbindung von Anlagenherstellern und AF-Anwendern; BMWi-Förderung für schnelle Echtzeit-Prüfmethoden

	<p>Definition der Eigenschaften fertiger Bauteile und Strukturen bereits im Entstehungsprozess und Bestimmung von deren optimalen Einsatzgebieten und Einsatzdauer hinsichtlich Funktionalität, Festigkeit, Lebensdauer, etc.</p>	<p>Schaffung von Bewertungssicherheit bzgl. Festigkeit und Lebensdauer bzw. Lebensdauererhöhung von über AF hergestellten Bauteilen</p>			
--	---	---	--	--	--



Mitwirkende Autoren

An diesem Papier haben über die Gremien der beteiligten Organisationen mitgewirkt bzw. waren von den Organisationen beteiligt:

Dr. Nils Bottke/ BASF SE, Kapitel III

Dr. Sigmar Bräuninger/BASF SE, Kapitel III

Dr. Ursula Eul/Fraunhofer Verbund Materials, Kapitel VI

Dr. Andreas Förster/DECHEMA

Dr. Michael Lennartz/BASF SE, Kapitel I

Dr. Gerhard Mestel/Clariant Kapitel V

Dr. Martin Reuter/ VCI

Dr. Stephan Schunk/ HTE GmbH, Kapitel III

Dr. Christian Seitz/BASF SE, Kapitel IV

Normen Szeni/Clariant, Kapitel V

Dr. Hans-Jürgen Weinig/GDCh

Dorit Wolf/Evonik Industries AG, Kapitel V

Dr. Ralf Zuber/Umicore AG, Kapitel II und IV

Wir danken darüber hinaus den zahlreichen Experten, die im Rahmen der Fachdiskussionen über ihre Expertise zur inhaltlichen Ausgestaltung dieser Empfehlungen beigetragen haben.