

# Roadmap der chemischen Reaktionstechnik

initiiert von der Fachsektion Reaktionstechnik

1. Auflage · Mai 2010

# Inhaltsverzeichnis

<b>Vorwort</b>	<b>3</b>
<b>1. Was ist Reaktionstechnik?</b>	<b>4</b>
<b>2. Bedeutung der Reaktionstechnik</b>	<b>6</b>
<b>3. Experimentelle Reaktionstechnik</b>	<b>8</b>
A. Laborreaktoren	8
B. Hochdurchsatztechnologie	9
C. Dynamische Methoden	9
D. In-situ Messmethoden, Visualisierung von Phasengrenzflächen	10
<b>4. Mathematische Modellierung und Simulationstechniken</b>	<b>12</b>
A. Multiphysik	12
B. Multiskalige Systeme	12
C. Mehrphasenströmungen	13
D. Simulationsmethoden und mathematische Algorithmen	13
<b>5. Reaktordesign und Prozessentwicklung</b>	<b>16</b>
A. Optimierung von Transportvorgängen im Reaktor	16
B. Miniplantentechnik und experimentelles Scale-up	18
C. Apparateentwicklung	20
D. Prozessintensivierung	23
<b>6. Beispiele aus der Praxis</b>	<b>27</b>
A. Das Uhde EnviNOx®-Verfahren	27
B. HPPO-Technologie von Evonik und Uhde	28
C. Autoabgaskatalyse	29
D. Simulationsgestütztes Produktdesign in der Hochdruckpolymerisationstechnik	31
E. Membranreakorttechnologie für effiziente Reaktionsführung mit hochselektiven Homogenkatalysatoren	32
F. Cracker-Entwicklung und Veränderung der chemischen Rohstoffbasis	33
<b>7. Ausblick</b>	<b>36</b>
<b>8. Liste der Autoren</b>	<b>39</b>

# Vorwort

Der Vorstand der ProcessNet-Fachsektion Reaktionstechnik hatte sich im Februar 2009 entschlossen, für das Fachgebiet der Chemischen Reaktionstechnik eine Roadmap zu erstellen. Im September 2009 wurde ein etwa 10-köpfiges Vorbereitungskomitee installiert, das sich der Aufgabe annahm. Es erfolgte im Mitteilungsblatt der Fachsektion (Info-Brief Nr. 4, September 2009) ein Gliederungsvorschlag und ein Aufruf an alle Mitglieder, zu den einzelnen Gliederungspunkten beizutragen. Auf dieser Basis entstand die hier vorliegende Roadmap.

Zweck der Roadmap ist es, die aktuellen Arbeitsgebiete der Chemischen Reaktionstechnik zu benennen, den Forschungsbedarf zu konkretisieren und über Fallstudien zu illustrieren. Sie ist dabei ein lebendes Dokument, das einer regelmäßigen Aktualisierung bedarf.

Die Roadmap der ProcessNet-Fachsektion Reaktionstechnik soll nicht der Abschottung zu anderen Disziplinen wie der Katalyse oder der Prozessintensivierung dienen, sondern vielmehr als Wegweiser für Kooperationen. In diesem Zusammenhang sei

auf andere existierende Roadmaps und Positionspapiere hingewiesen wie die „Roadmap der deutschen Katalysatorforschung“ der Deutschen Gesellschaft für Katalyse, die jüngst in ihrer dritten überarbeiteten Auflage erschienen ist, das Positionspaper „Prozessintensivierung – eine Standortbestimmung“ der ProcessNet-Fachsektion Prozessintensivierung sowie das Positionspaper „Energieversorgung der Zukunft“, das von den führenden nationalen Chemieorganisationen gemeinsam erarbeitet wurde. Auf europäischer Ebene sei insbesondere auf die „European Roadmap for Process Intensification“ des EUROPIC<sup>1a</sup> und die „Roadmap for 21st Century Chemical Engineering“ der IChemE<sup>1</sup> hingewiesen und auf internationaler Ebene auf die „Vision 2020 – Reaction Engineering Roadmap“ der AIChE<sup>2</sup>.

Wir wünschen allen Lesern eine anregende Lektüre, freuen uns über Anregungen und Kommentare und hoffen, dass die Roadmap viele neue Impulse für die Forschung auf dem Gebiet der Reaktionstechnik liefert.

Der Vorstand der Fachsektion Reaktionstechnik

<sup>1a</sup> European Process Intensification Centre

<sup>1</sup> Institution of Chemical Engineers

<sup>2</sup> American Institute of Chemical Engineers

# 1 Was ist Reaktionstechnik?

Die Endprodukte der Chemischen Industrie wie Polymere, Pharmazeutika oder Farbstoffe sind aus unserem Alltag nicht mehr wegzudenken, da sie wesentlich zu unserem hohen Lebensstandard beitragen. Die industrielle Chemie ist eine weitverzweigte Veredelungschemie, die bei wenigen Rohstoffen wie Erdöl, Erdgas und nachwachsenden Rohstoffen startet und über einige hundert Grund- und Zwischenprodukte zu vielen tausend Endprodukten führt. Dies kann durch das Bild eines Baumes veranschaulicht werden, bei dem die Rohstoffe den Boden, der Stamm die Grundchemikalien, die Äste die Zwischenprodukte und die Blätter die Endprodukte darstellen (siehe Abbildung 1). Wenn man im Bild des Baumes bleibt, dann pflegt die chemische Reaktionstechnik vorhandene Bäume (Verbesserung bestehender chemischer Verfahren), initiiert das Wachsen neuer Zweige und Blätter (Entwicklung neuer chemischer Verfahren zu neuen chemischen Produkten) oder ermöglicht gar das Wachsen neuer Bäume (Umstellung auf eine neue Rohstoffbasis und neue Grundchemikalien).

Die chemische Reaktionstechnik befindet sich dabei an der Schnittstelle zwischen der Chemie und der Verfah-

renstechnik, d.h. zwischen der Entwicklung chemischer Synthesen im Labor und deren Durchführung im Produktionsmaßstab in der chemischen Industrie.

Das Entstehen der Fachdisziplin der chemischen Reaktionstechnik ist eng mit der Entwicklung der Ammoniak-synthese nach dem Haber-Bosch-Verfahren zu Beginn des 20. Jahrhunderts verknüpft. Seit Mitte des 20. Jahrhunderts ist die chemische Reaktionstechnik als exakte Wissenschaft anerkannt und fest im Ausbildungskanon der Technischen Chemie verankert<sup>3</sup>. Unter den Institutionen, die sich um die Weiterentwicklung der chemischen Reaktionstechnik als eigenständiges Fachgebiet in der Nachkriegszeit besonders verdient gemacht haben, sind auf nationaler Ebene der 1956 gegründete DECHEMA-Fachausschuss Chemische Reaktionstechnik unter dessen Dach 1961 der DECHEMA-Arbeitsausschuss Technische Reaktionen gegründet wurde und der 1956 ins Leben gerufene Fachausschuss Technische Reaktionsführung der damaligen VDI-Fachgruppe Verfahrenstechnik zu nennen. In beiden Gremien, die heute unter dem Dach von ProcessNet im Arbeitsausschuss Technische Reaktionen zusammengefasst sind, engagierten sich viele namhafte

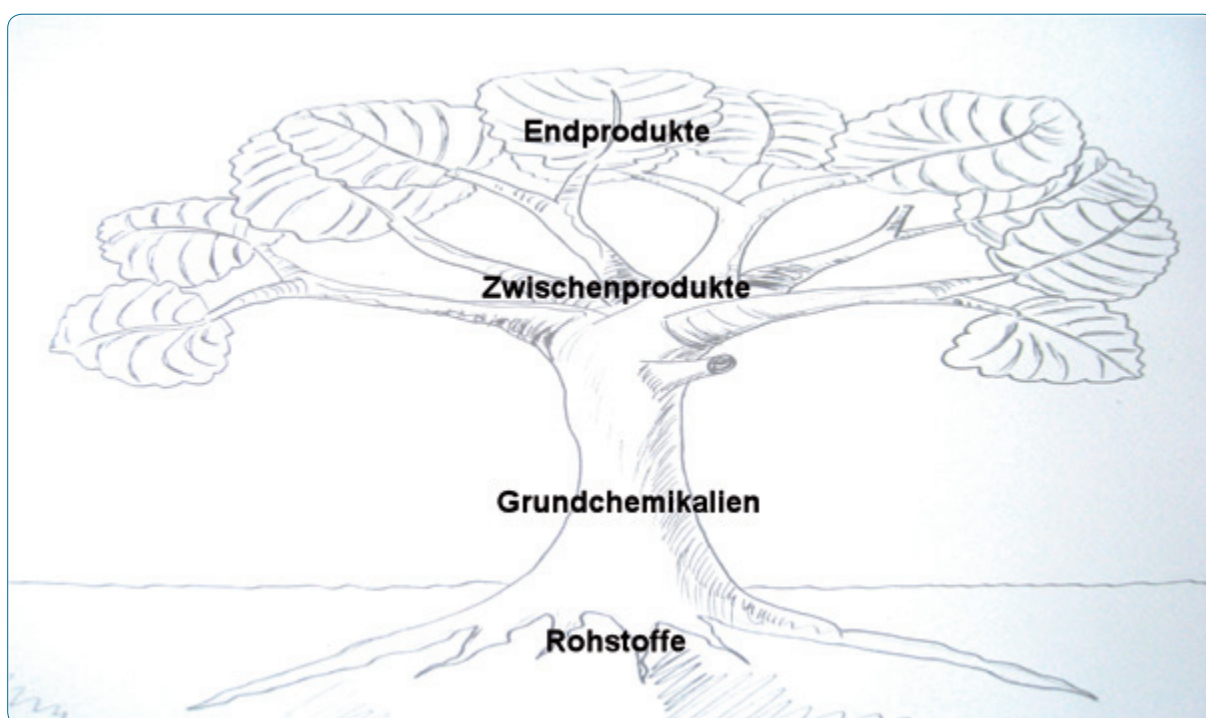


Abbildung 1: „Chemis-tree“ als Veranschaulichung der Wertschöpfungskette vom Rohstoff zum Endprodukt.

Vertreter aus Hochschule und Industrie, die das Gebiet der chemischen Reaktionstechnik in Deutschland und darüber hinaus entscheidend mitgeprägt haben.

Die chemische Reaktionstechnik ruht als wissenschaftliche Disziplin im wesentlichen auf den beiden Säulen „Reaktionsanalyse“ und „Reaktorauslegung“.

Bei der Reaktionsanalyse wird die chemische Reaktion zunächst hinsichtlich Stöchiometrie, Thermodynamik und Kinetik analysiert. Die Stöchiometrie gibt den äußeren Rahmen der prinzipiell vorstellbaren Reaktionen; die Thermodynamik schränkt auf diejenigen Reaktionen ein, die die Natur überhaupt zulässt und die Kinetik beschreibt, welche Reaktion mit welcher Geschwindigkeit abläuft. Für den Reaktionstechniker ist die Kinetik die unabdingbare Basis für die Modellierung und Auslegung chemischer Reaktoren. Eine mechanistisch begründete Kinetik, die auf der Kenntnis der molekularen Vorgänge (Elementarschritte) beruht, ist einer empirischen Formalkinetik, die sich rein auf die Anpassung gängiger Geschwindigkeitsansätze an kinetische Messungen stützt, stets vorzuziehen. Die Ermittlung mechanistisch begründeter Kinetiken besitzt Schnittstellen zu vielen Disziplinen der Chemie wie etwa zur Physikalischen Chemie, zur Festkörperchemie oder zur Theoretischen Chemie. Auch zur Physik besteht eine starke Schnittstelle auf dem Gebiet der Surface Science.

Die Reaktorauslegung kann empirisch erfolgen, indem der technische Reaktor auf einen repräsentativen Laborreaktor herunterskaliert („Scale-down“) und die Reaktorleistung durch eine geeignete Reaktionsführung (Temperatur, Druck, Konzentration, Katalysator) experimentell optimiert wird. Auch unterschiedliche Reaktortypen (Rohrreaktor, Wirbelschicht, Rührkessel etc.) können so beurteilt werden. Lokale Messtechnik spielt dabei eine immer wichtigere Rolle. Die Reaktorauslegung kann aber auf Basis zuverlässiger Kinetiken auch rational und prädiktiv erfolgen. Hier spielen die Reaktormodellierung und Programme zur Reaktorsimulation eine zentrale Rolle. Auf Basis dieses rationalen Ansatzes können neue Reaktorkonzepte und neue Varianten der Reaktionsführung vorhergesagt werden. Entsprechende Laborversuche bilden dann in vielen Fällen die

Basis für eine Maßstabsvergrößerung vom Laborreaktor auf einen technischen Reaktor („Scale-up“). Unabhängig davon, ob die Reaktorauslegung empirisch oder rational-prädiktiv erfolgt, stellt die Grundlage hierfür stets die Bilanzierung von Energie, Stoff und Impuls dar. Die Lösung der Bilanzgleichungen ergibt die jeweiligen Temperatur-, Konzentrations- und Geschwindigkeitsprofile im chemischen Reaktor. Wärme- und Stofftransport sowie die Fluidynamik können die Reaktorleistung ganz wesentlich beeinflussen.

Abbildung 2 fasst die Inhalte der Reaktionstechnik nochmals bildlich zusammen.

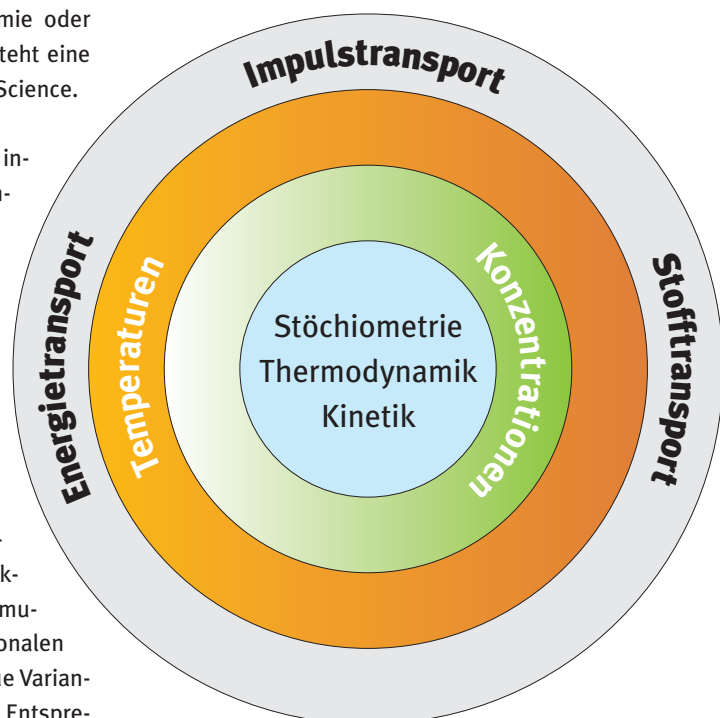


Abbildung 2: Inhalte der Reaktionstechnik



## 2 Bedeutung der Reaktionstechnik

**Am Beispiel der Ammoniak-Synthese nach dem Haber-Bosch-Verfahren lässt sich auf eindruckliche Weise zeigen, welche Bedeutung die Reaktionstechnik für die Umsetzung von Laborergebnissen in die Praxis besitzt.**

Fritz Haber, damals Leiter des Lehrstuhls für Physikalische Chemie und Elektrochemie an der Universität Karlsruhe, legte Anfang des 20. Jahrhunderts die thermodynamischen und kinetischen Grundlagen für die Ammoniak-Synthese. Er bestimmte die Gleichgewichtskonstante der Reaktion und schlug für eine technische Realisierung einen Teilumsatzgrad im Reaktor mit Kreislaufführung des nicht umgesetzten Edukts vor.

Alwin Mittasch, der zusammen mit Carl Bosch seitens der BASF AG und in Kooperation mit der Universität Karlsruhe

he in Person von Fritz Haber, maßgeblich zur technischen Realisierung der Ammoniak-Synthese nach dem Haber-Bosch-Verfahren beitrug, schreibt in seinem Buch „Geschichte der Ammoniak-Synthese“:

*Wird beim Arbeiten im Kreislauf jeweils nur ein geringer Umsatz der Reaktionsgase Stickstoff und Wasserstoff erreicht, so ist es von größter technischer und wirtschaftlicher Bedeutung, diese geringfügige Umsetzung noch bei schnellem Durchleiten, also kurzer Berührungszeit der Gase mit dem Katalysator zu erreichen. Solch reiche „Raum-Zeit-Ausbeute“ ist nun nur mit Katalysatoren erreichbar, die den um 1905 bekannten an Wirksamkeit um ein Vielfaches überlegen sind.*

So waren bis 1905 Osmium und Uran als Katalysatoren eingesetzt worden. Erst mit der Entdeckung und Weiterentwicklung des Eisenoxid-Katalysators konnten ausreichend hohe Raum-Zeit-Ausbeuten realisiert werden. Alwin Mittasch führte dazu mehr als 10.000 Versuche durch und setzte zur Katalysatorrestung mehr als 20 parallele Druckreaktoren ein, eine Technik, die als Vorläufer des heutigen Hochdurchsatzscreenings anzusehen ist.

Auch heute noch gilt, dass wirtschaftliche chemische Synthesen sich ohne profunde Kenntnisse der Reaktionstechnik weder entwickeln noch realisieren lassen. Die wirtschaftliche Realisierbarkeit eines chemischen Produktionsverfahrens wird maßgeblich bestimmt durch:

- » Investitionskosten
- » Betriebskosten
- » Prozesssicherheit
- » Auswirkungen auf die Umwelt

Die Investitionskosten können auf Basis des Verfahrensfließbild an Hand der Hauptpositionen wie Reaktoren, Trennapparate, Kompressoren und Pumpen, etc. ermittelt werden. Anzahl, Größe und Art dieser Hauptpositionen



werden maßgeblich beeinflusst durch das *Selektivitäts-Umsatzgrad-Diagramm* und die erreichbare *Raum-Zeit-Ausbeute* im Reaktor. Die Selektivitäten bestimmen den Trennaufwand, der Umsatzgrad den Aufwand für Rückführungen und die Raum-Zeit-Ausbeute die Größe des Reaktors. In der chemischen Reaktionstechnik sind daher das Selektivitäts-Umsatzgrad-Diagramm und die Raum-Zeit-Ausbeuten wichtige Zielgrößen der Prozessentwicklung und -optimierung.

Auch die Betriebskosten hängen maßgeblich vom Selektivitäts-Umsatzgrad-Verhalten ab, da die Selektivitäten die Rohstoffeffizienz bestimmen sowie beide zusammen den Energieaufwand für die Trennprozesse.

Eine Verbesserung der Prozesssicherheit, zumindest was den Reaktorbetrieb anbelangt, beruht ebenfalls auf reaktionstechnischen Grundlagen. Das Durchgehen von Reaktoren oder das Zünden von Feststoffkatalysatoren wird beispielsweise mittels der Wärmebilanz beschrieben (Semenov-Diagramm), wobei Stofftransportphänomene und Fluidodynamik einen entscheidenden Einfluss haben. Hier bietet z.B. die Mikroreaktionstechnik die Basis, um sicherere chemische Produktionsverfahren zu entwickeln.

Die chemische Reaktionstechnik kann darüber hinaus entscheidende Beiträge zur Lösung umweltrelevanter Fragestellungen wie die Einhaltung von Grenzwerten oder die Minimierung des CO<sub>2</sub>-Fußabdrucks liefern. Dies reicht von Energieeinsparung über Verfahren der Abgas-, Abluft- und Abwasserreinigung bis hin zur Umstellung der Rohstoffbasis auf nachwachsende Rohstoffe.

Die Reaktionstechnik ist schließlich eine wesentliche Kernkompetenz, um eine Intensivierung chemischer Prozesse zu erreichen. Sie kann zur Identifizierung neuer Prozessfenster beitragen, indem sie die Potentiale von Temperatur- und Druckerhöhung, des Verzichtes auf Lösungsmittel oder des Einsatzes alternativer Lösungsmittel wie CO<sub>2</sub> grundlegend theoretisch und/oder experimentell entwickelt.

Die chemische Reaktionstechnik ist daher eine Schlüsseldisziplin, um Zukunftskonzepte der chemischen Produktion zu erarbeiten und umzusetzen.

# 3 Experimentelle Reaktionstechnik

Ungeachtet großer Fortschritte in den Bereichen Theorie und mathematische Modellierung ist die Reaktionstechnik auch heute nach wie vor eine stark experimentell geprägte Wissenschaft. Allerdings ist es möglich, gerade durch eine Verknüpfung von präzisen experimentellen Untersuchungen und Methoden der Simulationstechnik ein gutes Verständnis über die im Reaktor ablaufenden Prozesse zu gewinnen und so die sichere Basis für eine Auslegung von Reaktoren und Produktionsanlagen zu schaffen.

## A. LABORREAKTOREN

Für die Durchführung reaktionstechnischer Experimente im Labormaßstab können die Reaktionstechniker auf eine große Anzahl an Standardreaktoren zurückgreifen. Die üblicherweise eingesetzten Reaktortypen sind in den Lehrbüchern der Technischen Chemie und Reaktionstechnik sowie in Übersichtsartikeln ausführlich beschrieben<sup>4,5,6</sup>. Mit diesen Standardreaktoren können die Basisgrößen der Reaktionstechnik (z.B. Umsatz, Ausbeute, Selektivität, Katalysator-Standzeit, spezifischer Katalysatorverbrauch) in vielen Fällen weitgehend problemlos vermessen werden. Darüber hinaus ist es in einer Reihe von Standardreaktoren auch möglich, die gewünschten Reaktionen unter definierten Temperatur- und Konzentrationsgradienten ablaufen zu lassen, um so kinetische Modelle eines Reaktionsnetzwerks präzise ermitteln zu können. Eine Reihe von Herstellern bietet inzwischen ein breites Spektrum solcher Standardreaktoren kommerziell an. Für bestimmte Anwendungen unterliegen Laborreaktoren aber speziellen Design-Anforderungen, die eine breite Anwendung verhindern.

Die Laborautomatisierung hat in den letzten Jahren erhebliche Fortschritte gemacht, sie leistet inzwischen einen wichtigen Beitrag zur Effizienzsteigerung im reaktionstechnischen Labor. Laboranlagen können heute über einfach konfigurierbare Prozessleitsysteme gesteuert werden (siehe Abbildung 3), so dass auch ein automatisierter Betrieb dieser Anlagen über längere Zeiträume möglich ist. Auf diese Weise lassen sich Untersuchungen des Einfahr- und Deaktivierungsverhaltens von Katalysatoren mit vertretbarem Personaleinsatz durchführen.

Automatisierte Rezeptursteuerungen erhöhen auch die Zuverlässigkeit und Effizienz von kinetischen Experimenten, die im absatzweisen Betrieb durchgeführt werden. Der Einsatz von Labordateninformationssystemen ermöglicht darüber hinaus die automatisierte Archivierung und Auswertung von Labordaten.

Die Verbesserung der Werkzeuge der Reaktionstechnik führt zu einer immer genaueren Analyse der Reaktionen auch unter extremen Reaktionsbedingungen und über einen weiten Parameterraum (z.B. Temperatur, Druck, beteiligte Phasen, geeignete Werkstoffe, Formen und Zusammensetzung von Katalysatoren). Dadurch werden wichtige Beiträge zur Effizienzsteigerung der chemischen Prozesse geleistet. Allerdings ist der Aufbau und Betrieb von reaktionstechnischen Laboren hierfür außerordentlich kostenintensiv.

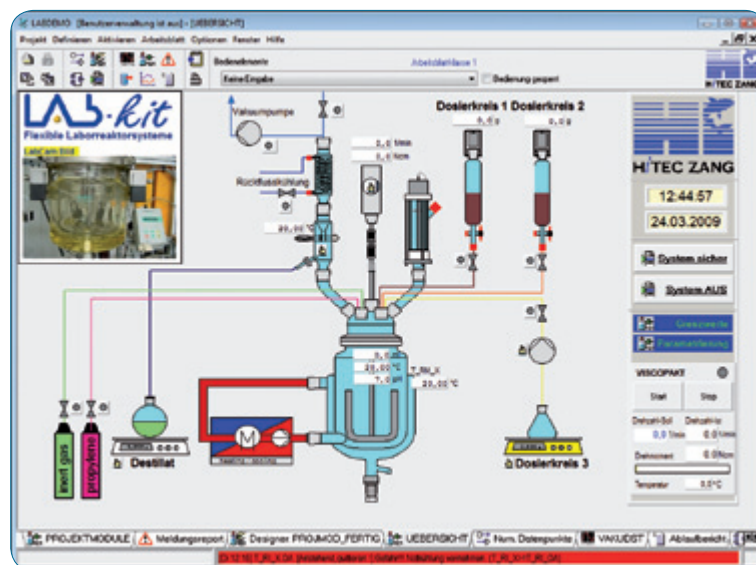


Abbildung 3: Prozessleitsystem für Laborreaktoren (Quelle: HiTec Zang GmbH)

4 Berger, R.J., Stitt, E.H., Marin, G.B., Kaptejin, F., Moulijn, J.A., CATTECH 5, 2001, 30-60.

5 Baerns, M., Behr, A., Brehm, A., Gmehling, J., Hofmann, H., Onken, U., Technische Chemie, Wiley-VCH, Weinheim, 2006.

6 Emig, G., Klemm, E., Technische Chemie: Einführung in die chemische Reaktionstechnik, Springer, Berlin, 2005.



#### B. HOCHDURCHSATZTECHNOLOGIE

Eine weitere Beschleunigung der Katalysator- und Verfahrensentwicklung wurde durch die Parallelisierung und das zielgerichtete Scale-Down der Versuchsdurchführung erreicht. Die Parallelisierung und Automatisierung von Experimenten wird in der Fachwelt unter dem Begriff „High-Throughput-Experimentation“ (HTE) zusammengefasst. In der Industrie sind in modernen reaktionstechnischen Laboren inzwischen Hochdurchsatzsysteme unerlässlich. Mit derzeit bis zu 64 Parallelreaktoren werden die Entwicklungszeiten deutlich verkürzt, basierend auf erheblich mehr Daten, als mit konventionellen Methoden zugänglich sind. Hauptsächlich werden die HTE-Methoden in der katalytischen Verfahrensentwicklung (siehe Abbildung 4) eingesetzt, sie hätten jedoch auch das Potential für die Parameteroptimierung bei unkatalysierten Reaktionen.

Der Trend bei Hochdurchsatz-Untersuchungen in Richtung Prozessoptimierung ist deutlich zu erkennen. Die gewonnenen Daten aus den neuesten Reaktorsystemen sind oft schon mit den Ergebnissen aus Pilotanlagen vergleichbar, womit F&E-Aktivitäten im Bereich der Prozessentwicklung und -optimierung deutlich effizienter gestaltet werden. Die Testung von technischen Katalysator-Formkörpern

in Hochdurchsatzanlagen stellt dabei eine interessante Herausforderung dar. Durch eine Übertragung des Hochdurchsatzprinzips auf Reaktoren im Maßstab von 100 ml ist es möglich, das polytrope Verhalten von Produktionsreaktoren im Labor nachzuvollziehen und die Lage von Hot-spots im technischen Maßstab korrekt vorherzusagen.

Für eine effiziente Anwendung von HTE ist der Einsatz von Software-Werkzeugen zur Versuchsplanung, Steuerung der Versuchsanlagen und zur Auswertung und Visualisierung der Versuchsergebnisse notwendig. Genetische Algorithmen, Design of Experiment (DoE), künstliche neuronale Netze (ANN) und andere mathematische Verfahren führen zu einer effizienten Datenanalyse in komplexen Multiparameterräumen. Zur Visualisierung solcher komplexer Datensätze mit häufig zig-tausenden von Einzeldaten stehen inzwischen unterschiedlichste kommerzielle und nichtkommerzielle Softwarepakete zur Verfügung<sup>7</sup>.

#### C. DYNAMISCHE METHODEN

Für die modellbasierte Beschreibung des Reaktionsfortschritts über einen breiten Parameterbereich sind genaue Kenntnisse über den Reaktionsablauf im Allgemeinen unverzichtbar. Auch die in der industriellen Verfahrensentwicklung und besonders -optimierung eingesetzten

Modelle beinhalten vermehrt solche mikrokinetischen Ansätze, die auf der Basis aller wichtigen einzelnen Schritte des Reaktionsmechanismus (Elementar-Reaktionen) abgeleitet werden können. Die Ermittlung der Elementar-Kinetik ist in der Regel nur mit Unterstützung dynamischer Methoden möglich. Eine Anzahl dieser Methoden ist in der Reaktionstechnik inzwischen fest etabliert (TPD, TPO, TPR, TPSR, SSITKA oder TAP)<sup>8</sup>, oft werden diese mit spektroskopischen Methoden und quantenchemischen Rechnungen gekoppelt, um Intermediate der Reaktion in-operando oder in-situ identifizieren zu können (z.B. Oberflächen-Intermediate oder Ligand-Metall-Substrat-Komplexe).



**Abbildung 4: Hochdurchsatzreaktor für die Kraftstoffaufbereitung im Pilotmaßstab (Quelle: hte Aktiengesellschaft)**

<sup>7</sup> Maier, W.F., Stöwe, K., Sieg, S., *Angew. Chemie* 119, 2007, 6122-6179.

<sup>8</sup> TPD: temperature programmed desorption, TPO: temperature programmed oxidation, TPR: temperature programmed reduction, TPSR: temperature programmed surface reaction, SSITKA: steady state isotopic transient kinetic analysis, TAP: temporal analysis of products

<sup>9</sup> Berger, R.J., Kapteijn, F., Moulijn, J.A., Marin, G.B., De Wilde, J., Olea, M., Chen, D., Holmen, A., Lietti, L., Tronconi, E., Schuurman, Y., *Appl. Catal. A: General* 342, 2008, 3-28.

Die dynamischen Methoden sind sehr effizient. Mit verhältnismäßig geringer Zahl von Experimenten kann die Kinetik einzelner Teilreaktionen von komplexen Reaktionsnetzwerken ermittelt werden<sup>9</sup>.

Bezüglich der Aufprägung definierter Störungen auf Reaktionsysteme erlangen neben den klassischen Sprüngen, Pulsen oder Rampen der Betriebsparameter (Eingangskonzentrationen, Volumenströme, Temperaturen) in jüngster Zeit zunehmend harmonische Eingangstörungen Bedeutung. Der Grund dafür liegt in den verbesserten Möglichkeiten der Interpretation und quantitativen Analyse der resultierenden Frequenzantworten. Mit den in Entwicklung befindlichen Techniken können Modellparameter aus experimentellen Befunden auch für nichtlineare Systeme ermittelt werden<sup>10</sup>.

#### D. IN-SITU MESSMETHODEN, VISUALISIERUNG VON PHASENGRENZFLÄCHEN

Bildgebende Verfahren in der Reaktionstechnik dienen hauptsächlich der Charakterisierung und Optimierung von Reaktoren, dem Monitoring und Controlling von Prozessen sowie zur Bereitstellung von Daten für die Prozessmodellierung und -simulation. Vielfältige bildgebende

Verfahren wurden in den letzten Jahren aus technischen und medizinischen Disziplinen in die Reaktor- und Reaktionstechnik überführt und weiterentwickelt (Gamma-Strahlen-Computertomographie, Hochgeschwindigkeitsvideometrie, Magnetic Resonance Imaging, In-situ- und Online-NMR, Laser-Spektroskopie, Summenfrequenz-Infrarot-Spektroskopie). Mit Hilfe der Mikroverfahrenstechnik können lokale, dreidimensionale Strömungs- und Konzentrationsfelder berührungslos vermessen werden, um ein tiefgreifendes Verständnis über die Mikrokinetik und Mischungsmaskierung zu erlangen. Gerade bei Mehrphasenreaktoren haben die bildgebenden Werkzeuge eine immense Bedeutung im Bereich der Grundlagenforschung erlangt, um komplexe Reaktions- und Strömungsvorgänge erfassen zu können. So können z.B. mit Hilfe der laserinduzierten Fluoreszenz und Particle Image Velocimetry an bewegten Phasengrenzflächen lokale Massenströme durch Messung lokaler Konzentrations- und Strömungsfelder mit wenigen  $\mu\text{m}$  und ms Auflösung vermessen werden, um hieraus Hinweise zu skalenübergreifenden Transportprozessen in Mehrphasenströmungen zu gewinnen. Große Fortschritte in der experimentellen Reaktionstechnik sind in Zukunft durch die enge Verzahnung hoch aufgelöster experimenteller Daten mit numerischen Simulationen zu erwarten. Die Weiterentwicklung vorhandener Tools so-

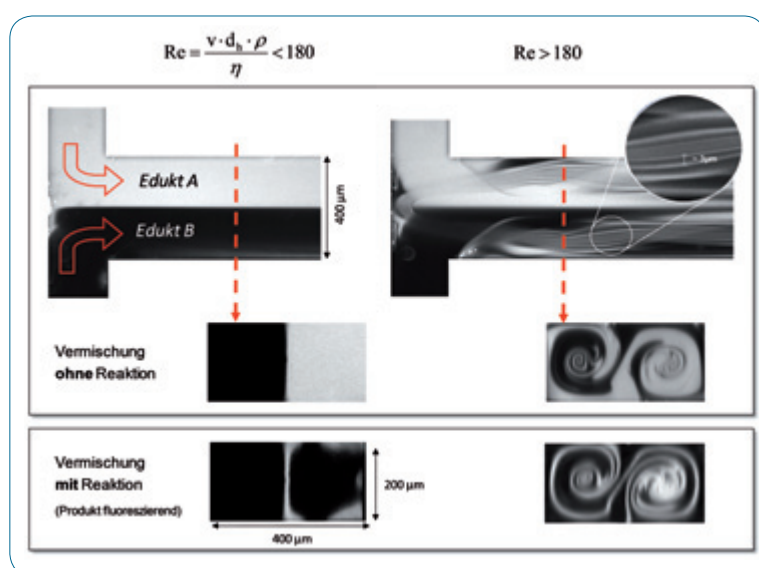


Abbildung 5: Experimentell ermittelte Konzentrationsfelder bei der Vermischung zweier inerter bzw. reagierender Flüssigkeiten in Abhängigkeit des Strömungszustandes<sup>11</sup>.

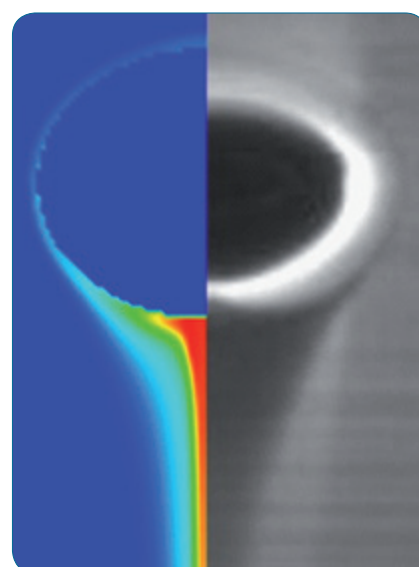


Abbildung 6: Simuliertes (links) und vermessenes (rechts) Sauerstoffkonzentrationsfeld um eine frei aufsteigende Gasblase<sup>12</sup>.

<sup>10</sup> Garayhi, A., Keil, F.J., Chem. Eng. Sci. 56, 2001, 1317-1325.

<sup>11</sup> Bockhorn, H., Mewes, D., Peukert, W., Warnecke, H.-J. (Hrsg.), Micro- and Macro-Mixing - Analysis, Simulation and Numerical Calculation, Series: Heat and Mass Transfer, Springer, Berlin, 2010.

wie Neuentwicklungen von bildgebenden Sensoren und Messverfahren werden die mehrdimensionale Messung von Prozess- und Strömungsparametern ermöglichen (lokale Phasengeschwindigkeiten, Phasenanteile und Konzentrationen, lokale Temperaturen). Bei den heute zur Auswahl stehenden Messprinzipien und Systemen muss dabei ein Kompromiss zwischen Kosten, Intrusivität sowie erreichbarer zeitlicher und örtlicher Auflösung eingegangen werden.

#### Forschungsbedarf

- » Entwicklung neuer, effizienter Reaktorkonzepte z.B. multifunktionale Reaktoren, mikrostrukturierte Reaktoren, etc.
- » Reaktoren zur Ermittlung des Einflusses von Mischprozessen auf die Reaktionskinetik bei sehr schnellen Reaktionen in der Flüssigphase
- » Intensivierung der Zusammenarbeit zwischen Hochschule und Industrie im Bereich High-Throughput-Experimentation durch eine breite Zugänglichkeit der Methoden, z.B. in einem Forschungszentrum für HTE
- » Aufsetzen einer offenen Entwicklungsplattform für Software zur Versuchsplanung und Auswertung reaktionstechnischer Experimente
- » Breiterer Einsatz dynamischer Methoden in der Reaktionstechnik auch für extremere Reaktionstemperaturen und -drücke und für schwierig handhabbare Reaktanden (z.B. schwefelhaltige Komponenten)
- » Entwicklung von Methoden zur operando- oder in-situ-Verfolgung des Aktivitätszustandes und der Deaktivierungskinetik von Produktionskatalysatoren sowie von Änderungen des Stoff- und Wärmetransports bzw. der Vermischung in Reaktoren durch Belagbildung und ähnliche Phänomene
- » Verbesserung der Auflösung bei der Untersuchung von Strömungsstrukturen sowie Temperatur- und Konzentrationsfeldern sowohl örtlich als auch zeitlich (z.B. Auflösung räumlich  $<0,1 \mu\text{m}$ , zeitlich  $<0,1 \text{ms}$ ) bei ein- und mehrphasigen Systemen
- » Einfache, robuste und preisgünstige bildgebende Verfahren für Reaktoren im Produktionsmaßstab

# 4 Mathematische Modellierung und Simulationstechniken

Die detailgenaue Modellierung der relevanten Prozesse stellt oftmals den entscheidenden Schritt zum wissenschaftlichen Verständnis eines Systems dar. Beispiele hierfür finden sich in verschiedensten Disziplinen<sup>13</sup>. Neben dem Verständnis der Systeme wird durch die Modellierung auch eine Prognose und Optimierung möglich.

Die Modellierung eines Systems kann prinzipiell experimentell, d.h. mit Hilfe eines physikalischen Modells im Rahmen eines experimentellen Aufbaus (auch „Scale-down“ genannt) oder rein mathematisch erfolgen. Sehr oft sind diese beiden Strategien allerdings eng miteinander verwoben, da erst durch experimentelle Daten mathematische Modelle kalibriert bzw. validiert werden können.

Obwohl die Modellierung reaktionstechnischer Systeme schon seit vielen Jahrzehnten betrieben wird, gibt es noch immer großen Bedarf für die Weiterentwicklung der Methodik in diesem Bereich. Ursache hierfür ist die hohe Komplexität dieser Systeme, die bedingt ist durch:

- » Multiphysik (d.h. Kopplung vieler Einzelvorgänge wie Impuls-, Energie- und Stofftransport)
- » Multiskaligkeit (d.h. Auftreten eines breiten Spektrums verschiedener Längen- und Zeitskalen)
- » Mehrphasigkeit bzw. Mehrphasenströmungen (d.h. Interaktion zwischen mehreren Phasen und Effekte an Phasengrenzflächen)
- » hohe Komplexität chemischer Reaktionsnetzwerke auf molekularer Ebene
- » Einfluss der Turbulenz auf chemische Reaktionen
- » Polydispersität (d.h. Verteilung physikalischer Größen wie Partikelgröße oder -form)

Während in der Kopplung von vielen Einzelvorgängen (z.B. ANSYS, COMSOL und OpenFOAM), in der Berechnung chemischer Reaktionsnetze<sup>14</sup> und in der Beschreibung der Polydispersität von Systemen<sup>15</sup> bereits entscheidende Fortschritte erzielt worden sind, besteht besonderer Entwicklungsbedarf in der Beschreibung von Multiskaleneffekten sowie auf dem Gebiet der Mehrphasenströmungen.

## A. MULTIPHYSIK

Für die Reaktionstechnik ist die korrekte Abbildung von „Multiphysik“ ein wesentlicher Punkt, wenn es um die erfolgreiche simulative Erfassung ganzer chemischer Reaktorsysteme vor dem Hintergrund reaktionstechnischer Fragestellungen geht, da zumeist eine ausgeprägte Kopplung einer Vielzahl von relevanten physikalischen und chemischen Einzelvorgängen (und damit die Kopplung der sie beschreibenden Teil-Modelle) im Reaktorinneren die konkrete Problemstellung charakterisiert. Zur Wissens- und Verständnismehrung sowie zur Beantwortung zentraler reaktionstechnischer Fragestellungen um das komplexe Wechselspiel dieser Multiphysik-Netzwerke in chemischen Reaktoren müssen eine geeignete (flexible und funktionsreiche) Programmiersprache und -plattform, und die Kombination konventioneller und neuer Modellierungsansätze zu hybriden Reaktormodellen diskutiert werden. Dabei ist festzuhalten, dass moderne Ansätze zur Mehrphasen-CFD und Multiphysik bereits in Multiphysik-Softwarelösungen wie COMSOL oder ANSYS Multiphysics (proprietär) oder OpenFOAM (Open Source) verfügbar sind. Diese müssen jedoch insbesondere noch bezüglich der konkreten Erfordernisse reaktionstechnischer Problemstellungen erweitert oder ergänzt werden.

Im Weiteren gilt es, eine Plattform zu wählen, um die Implementierung konventioneller Modellierungsansätze aus der Reaktionstechnik anzugehen und damit den Weg zu hybriden Reaktormodellen (reaktionstechnische Modellierung in Verbindung mit Mehrphasen-CFD) zu bereiten. Weiterhin sollte die Integration bereits etablierter Methoden aus anderen Fachbereichen, wie z.B. der Verbrennungsforschung oder der Atmosphärenchemie, forciert werden.

## B. MULTISKALIGE SYSTEME

Während die Modellierung von mikroskaligen Vorgängen (z.B. in der Konzentrationsgrenzschicht) und makroskaligen Prozessen (z.B. auf der Apparateskala) schon

<sup>13</sup> Strogatz, S. H., Nonlinear Dynamics and Chaos with Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering, Perseus Books Publishing, Cambridge MA, 2000.

<sup>14</sup> Fox, R. O., Computational Models for Turbulent Reacting Flows, Cambridge University Press, Cambridge, 2003.



seit vielen Jahren erfolgreich praktiziert wird (z.B. für die Reaktivabsorption), sind dazwischen liegende Effekte nicht oder nur sehr wenig erforscht. Diese so genannten „mesoskaligen“ Effekte, z.B. die Clusterbildung in Wirbelschichten oder Blasenschwärmen, sind der Schlüssel zur Überbrückung des breiten Längenspektrums in der Reaktionstechnik. Viele aktuelle Arbeiten dazu unterstreichen das enorme Potential derartiger Untersuchungen. Diesen Untersuchungen ist gemein, dass mikroskalige Effekte (z.B. Stofftransport durch Diffusion und turbulente Schwankungsbewegungen) direkt modelliert werden. Eine neue Modellierungsstrategie wird nicht benötigt, jedoch entsteht ein Bedarf an Hochleistungs-Simulationstechniken und spezialisierten numerischen Methoden, um die enormen Anforderungen an die örtliche und zeitliche Auflösung zur Berücksichtigung der „mesoskaligen“ Effekte abzudecken.

Eine weitere Herausforderung besteht in der Nutzbarmachung des detaillierten chemischen Wissens auf der molekularen Skala, wie es z.B. mit quantenmechanischen Methoden zugänglich ist, für praktische reaktionstechnische Fragestellungen wie z.B. die Katalysatorentwicklung oder die Vorhersage der Reaktionskinetik.

Zusätzliche Aspekte bei der Beschreibung von Mehrskaleneffekten sind die stufenweise Abstrahierung von Einzelsystemen (d.h. die Entwicklung von Reduktionsstrategien zur Entkopplung von Längen- und Zeitskalen), ein möglichst umfassendes Verständnis einzelner Phänomene (z.B. der Marangoni-Konvektion), eine detaillierte Modellierung der Mikro-Vermischung, die Entwicklung elementarkinetischer Modelle, sowie eine einheitliche (Programmier-)sprache. Letzteres gewinnt immer mehr an Bedeutung hinsichtlich der enormen Flut an akkumuliertem Wissen auf diesem Gebiet.

Generell besteht also ein großer Bedarf an hierarchischen Konzepten, um die einzelnen Skalen miteinander zu verbinden. Die Konzepte sollten dabei auf mechanistischen Überlegungen basieren und die derzeit vorherrschenden empirischen Ansätze verdrängen. Letztlich muss mit neuen, erst noch zu entwickelnden skalenübergreifenden Ansätzen eine Brücke zwischen der molekularen Ebene und dem Reaktor- und Prozessdesign geschaffen werden.

### C. MEHRPHASENSTRÖMUNGEN

Modelle für Mehrphasenströmungen beinhalten die direkte numerische Simulation (DNS), die Diskrete-Element Methode (DEM) für die Simulation von Partikelströmungen, detaillierte Euler-Lagrange Simulationen und grob-skaligere Euler-Euler Simulationen. Alle drei Ansätze werden ständig weiterentwickelt, was sich auch positiv auf die Zuverlässigkeit der Vorhersage von z.B. der Selektivität von chemischen Reaktionen auswirkt. Weitere Trends sind die gegenseitige Verschränkung dieser Simulationsansätze (z.B. von DNS und Euler-Lagrange Simulationen, hybride DNS-Euler-Euler Modelle) sowie der Einsatz etablierter Simulationsansätze in neuen Skalenbereichen durch z.B. Hochleistungs-Simulationen. Hier gilt es in der akademischen Forschung das mathematische Modell möglichst elementar zu erstellen und durch den Einsatz von Hochleistungsrechnern allgemein gültige Aussagen zu erlangen. Diese Entwicklung ist absolut notwendig, um ein genaueres Prozessverständnis und damit eine solide Basis für die Optimierung der Systeme zu erlangen. Hierarchische Konzepte, die sich beispielsweise aus DNS-Subgridmodellen für Large Eddy Simulation (LES) oder aus Reynoldszahl-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (RANS) ableiten, sind noch empirisch. Hier besteht ebenfalls großer Forschungsbedarf, insbesondere an mathematischen Konzepten, die helfen sollen, den Grad der Empirie zu verringern.

### D. SIMULATIONSMETHODEN UND MATHEMATISCHE ALGORITHMEN

Moderne numerische Simulationenmethoden umfassen derzeit (Mehrphasen-)Lattice-Boltzmann-Verfahren, konventionelle CFD auf großen Computerclustern, sowie die Diskrete-Element Simulation auf Multicore-CPU's. In all diesen Bereichen besteht noch Entwicklungsbedarf in der akademischen Forschung. Diese Entwicklung ist notwendig für eine weitere Steigerung der Zuverlässigkeit und Flexibilität derzeitiger Simulationsprogramme bzw. Modellierungsansätze.

Zukünftige Hochleistungs-Simulationstechniken erfordern weitere, extreme Leistungssteigerungen. Diese können nicht mehr durch konventionelle CPUs abgedeckt

<sup>15</sup> Ramkrishna, D., Fredrickson, A. G., Population Balances; Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering, Academic Press, San Diego, 2000.

werden, auch wenn diese ständig weiterentwickelt werden. Hier werden in naher Zukunft Grafikprozessoren die notwendige Reife erlangt haben, um derartige Simulationen viel effizienter durchführen zu können. Im Bereich der Partikelsimulation ist dies bereits möglich, wobei Simulationszeiten um einen Faktor 100 (!!) reduziert werden können. Eine Herausforderung stellt noch immer die Adaptierung der Software für Grafikprozessoren dar, die derzeit noch einen gravierenden Programmieraufwand darstellt. Jedoch wurde eine Portierung der Open-Source-Software „OpenFOAM“ bereits erfolgreich getestet. Gleiches darf für Mehrphasensimulationen im Bereich der Reaktionstechnik erwartet werden. Weiterhin wird die Entwicklung spezieller Hardware diskutiert, die für Mehrskalensimulationen maßgeschneidert ist. Entwicklungen in diese Richtung sind absolut notwendig, um die langfristige Effizienzsteigerung im Simulationsbereich zu sichern.

Neben diesen generellen Aspekten bedarf es einer ständigen Verbesserung der numerischen Methoden zur Lösung der Modellgleichungen. Die Entwicklung dieser Methoden ist nicht Kernaufgabe des Reaktionstechnikers, sondern vielmehr deren effiziente Implementierung in komplexe Simulationsprogramme. Ein wichtiger Aspekt dabei ist, dass die neuesten, von führenden Numerikern entwickelten mathematischen Algorithmen einfach zugänglich bzw. idealer Weise als Quellcode verfügbar sein sollten.

Im Bereich der Software sind Softwaretools für quantenchemische und molekulardynamische Simulationen, Strömungssimulations-Software (CFD, z.B. Fluent) bis hin zur Software für die Simulation von ganzen Industrieanlagen (z.B. Aspen Plus) verfügbar.

Für den industriellen Anwender sind traditionell Anlagensimulationstools und in zunehmenden Maße Werkzeuge für die Strömungssimulation relevant. Kriterien für den erfolgreichen Einsatz in diesem Bereich sind validierte (oder einfach validierbare) Software, die Kundenbetreuung, vollständige Dokumentation aller Softwaremodule sowie eine einfache Bedienbarkeit der Software. Sollen innovative Modelle im Bereich der Reaktionstechnik den Weg zum Praktiker finden, so müssen diese Kriterien unbedingt erfüllt werden. Daraus lässt sich ein Entwicklungsbedarf vor allem in Bezug auf eine konsequente Dokumentation und Verbesserung der Bedienbarkeit ab-

leiten. Dies ist besonders für den verstärkten Einsatz von Hochleistungssimulations-Tools auf Computerclustern relevant. Dadurch wird auch kostengünstige bzw. Open-Source-Software immer wichtiger für die Industrie, da die Lizenzkosten für Hochleistungssimulationen auf Computerclustern im Falle kommerzieller Software im Regelfall nicht tragbar sind.

Für die akademische Forschung ist der Zugriff auf den Quellcode das Kriterium für den Erfolg eines Projektes. Dies liegt vor allem daran, dass nur im Quellcode tief greifende Neuerungen oder komplexere Auswertalgorithmen umgesetzt werden können. Zudem kann mit dem Algorithmus „experimentiert“ und dieser auf die konkrete Anwendung hin optimiert werden. Dies erfordert die Schaffung einer einheitlichen Sprache bzw. einer Koordinierung der bereits implementierten und validierten Simulationsmodule. Projekte wie z.B. „OpenFOAM“ stellen bereits eine Plattform zur Verfügung, auf der Algorithmen und Wissen rasch und unkompliziert ausgetauscht werden kann. Verbesserungsbedarf besteht hier in der Koordination der Aktivitäten verschiedener Forschungseinrichtungen.

## Forschungsbedarf

- » Schaffung einer „reaktionstechnischen Toolbox“ auf Basis einer flexiblen Programmiersprache bzw. -plattform, welche den unkomplizierten Austausch ermöglicht und die flexible (Weiter-)Entwicklung im Rahmen von Forschungs- oder Kooperationsprojekten bietet
- » Kombination konventioneller und moderner Modellierungsansätze zu neuen hybriden Reaktormodellen, z.B. über Kopplung reaktionstechnisch-etablierter Modellansätze mit modernen Mehrphasen-CFD-Verfahren
- » Entwicklung mathematischer Algorithmen zur Lösung partieller Differentialgleichungen (insbesondere parabolische und elliptische mit Fehlerkontrolle) auf großen Computerclustern für die effiziente Berechnung mehrphasiger Strömungen
- » Etablierung eines Mehrphasen-Lattice-Boltzmann Codes für die hocheffiziente Simulation von dichten Blasenschwärmen in komplexen Geometrien

- » Partikelverfolgung und effiziente Berechnung von Partikelkollisionen auf großen Computerclustern
- » Automatische Gitteradaptierung, auch auf deformierbaren Gittern, zur Abbildung von extremen Unterschieden in Gradientenfeldern (z.B. in Konzentrationsgrenzschichten von reaktiven Blasen)
- » Entwicklung mathematischer Algorithmen zur schnellen Berechnung von deformierbaren Grenzflächen sowie der Interaktion zwischen mehreren deformierbaren Berechnungsbereichen

# 5 Reaktordesign und Prozessentwicklung

Basis der Prozessentwicklung und des damit verbundenen Reaktordesigns ist die genaue Kenntnis der Stöchiometrie, der Thermodynamik, der Kinetik und der sicherheitsrelevanten Daten. Damit können Reaktionszeiten und die freiwerdende oder zuzuführende Wärme bestimmt werden.

Diese Größen müssen auf die Transportbedingungen im Reaktor abgestimmt werden, damit die Reaktion sicher und mit hoher Ausbeute durchgeführt werden kann. Miniplantanlagen sind häufig erforderlich, weil der Prozess nur auf diese Weise möglichst detailgetreu mit Rückführungen, Teillast-, Anfahr- und Abfahrbetrieb abgebildet und untersucht werden kann. Mit Hilfe eines guten Modells kann der Prozess dann direkt in eine Produktionsanlage übertragen werden, häufig wird aber noch eine Pilotanlage zur weiteren Absicherung errichtet. Der aktuelle Stand der Entwicklung chemischer Reaktionsapparate verdeutlicht, dass moderne Entwicklungen zur Prozessintensivierung in einigen Fällen bereits Einzug in die industrielle Praxis gehalten haben.

## A. OPTIMIERUNG VON TRANSPORT VORGÄNGEN IM REAKTOR

Transportvorgänge können in Impuls-, Wärme- und Stofftransportvorgänge unterteilt werden<sup>16</sup>. Weiterhin kann man die beteiligten Phasen (fest, flüssig, gasförmig, überkritisch) und Phasengrenzen sowie Oberflächen unterscheiden, auf oder an denen ein Transport mit und ohne chemische Reaktion stattfindet. Beim Transport muss zwischen Diffusion, laminarer Dispersion und turbulentem, chaotischen Austausch differenziert werden. Mit dieser Übersicht wird die Komplexität der Transportprozesse von der molekularen bis hin zur Apparateskala verdeutlicht. Neben der Längenskala, auf der die Transportvor-

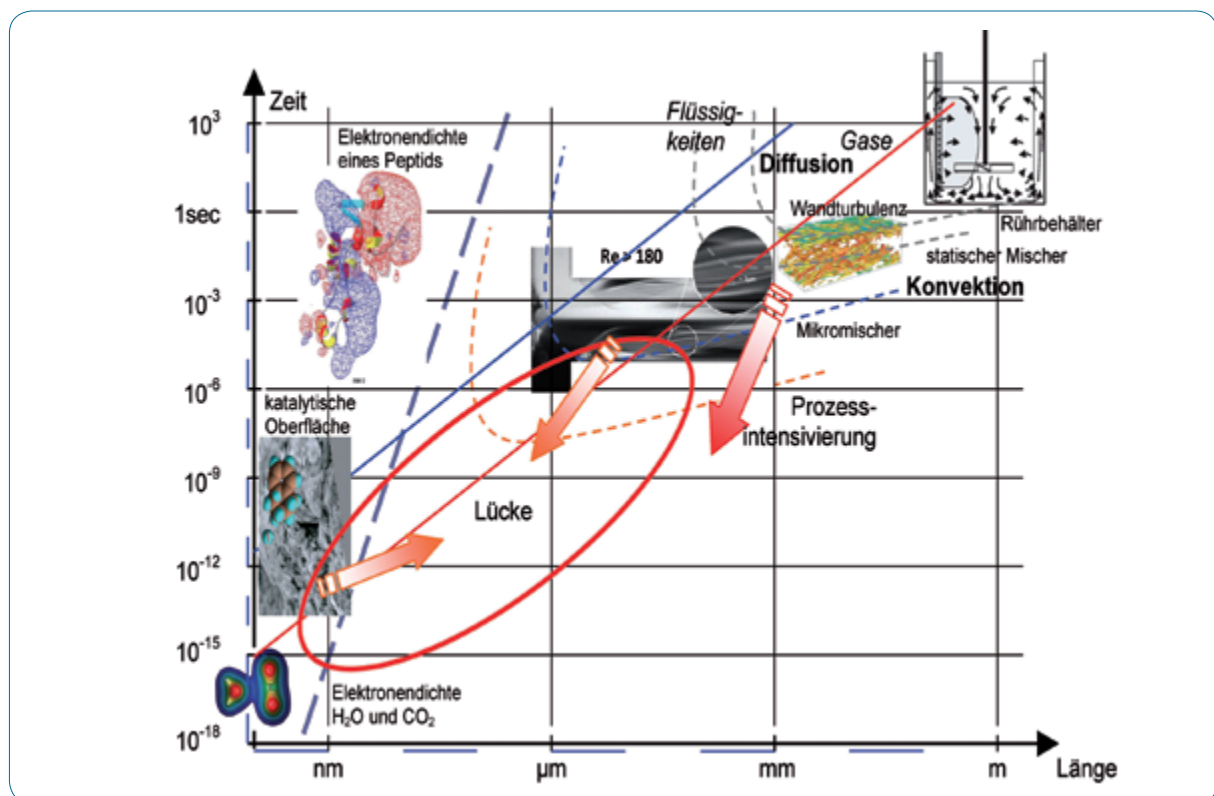


Abbildung 7: Typische Längen- und Zeitskalen von Transportvorgängen und chemischen Umwandlungen relevant für die Reaktionstechnik

<sup>16</sup> Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N., Transport Phenomena, 2. Auflage, Wiley, New York, 2007.



gänge stattfinden, ist bedingt durch die Geschwindigkeit von Transport und chemischer Reaktion auch die Zeitskala zu betrachten. Damit bilden Transportvorgänge von Komponenten und Energie die Brücke von molekularen Prozessen hin zur apparativen Umsetzung. Ihr Verständnis ist unerlässlich für die erfolgreiche Weiterentwicklung der Reaktionstechnik.

Abbildung 7 zeigt die typische Zeitskala von Transportvorgängen in Abhängigkeit von der Längenskala des Prozesses oder Apparats. Die schnellsten molekularen Prozesse bei kleinen Molekülen laufen innerhalb von  $10^{-18}$  s ab, katalytische Umsetzungen sind nur unwesentlich langsamer. Die Geschwindigkeit des Transports von Makromolekülen oder der Diffusion über Oberflächen ist deutlich geringer und kann den Gesamtvorgang bereits dominieren. Oben rechts sind die typischen Längen- und Zeitskalen in einem Rührkessel als Standard-Apparat der Reaktionstechnik angegeben. Daneben ist die numerische Simulation einer Wandturbulenz verdeutlicht. Die beiden schräg verlaufenden Linien geben die mittlere Verschiebung von Molekülen in Gasen oder Flüssigkeiten in einer bestimmten Zeit an. In Mikrokanälen werden beispielsweise Fluidstrukturen von wenigen Mikrometern mit Mischzeiten von unter einer Millisekunde erreicht. In der Abbildung wird der große Abstand zwischen den apparativ erreichten Längen- und Zeitskalen und denen von chemischen Umwandlungen verdeutlicht. Ein wesentliches Ziel weiterer Verbesserungen muss es sein, diese Lücke zu schließen.

Transportvorgänge lassen sich in einigen Fällen auf analytischem Wege beschreiben. Dazu gehören die laminare Strömung, Grenzschichtgleichungen, Wärmeleitung und Diffusion. Weitere Modelle basieren auf dimensionslosen Kennzahlen und ihren Beziehungen. Die Beschreibung der Turbulenz beruht auf Konzepten, die mehr als 50 Jahre alt sind. Mittlerweile sind jedoch auch numerische Methoden soweit etabliert, dass sie einen wesentlichen Beitrag zur Bestimmung von turbulenten Austauschgrößen liefern können. Die Modellbildung der Turbulenz und die experimentelle Absicherung auf der Feinskala ist dennoch eine große Herausforderung. Dazu sind auch Messmethoden weiterentwickelt worden, die auf der Mikrometer-Skala in einfachen Geometrien Geschwindigkeiten, Temperatur- und Konzentrationsverteilungen messen können. Die

Modellierung der Verweilzeitverteilung geht von Standardmodellen aus, die aber für reale Apparate häufig nur eingeschränkt anwendbar sind. Daher sind lokale und integrale Messungen immer noch unerlässlich.

In chemischen Reaktoren sind die beteiligten Phasen selten homogen verteilt, die Mehrzahl der Systeme ist heterogen und muss durch Konzepte der Mehrphasenströmung beschrieben werden. Die Transportvorgänge an Phasengrenzen sind bisher durch analytische Korrelationen und molekulardynamische Simulationen beschrieben, allerdings mit einer großen Lücke zwischen Kontinuum und Molekularensemble. Ähnliches gilt für die Katalyse an Feststoffoberflächen und in porösen Materialien.

Ein viel versprechender Weg sowohl im Hinblick auf eine Intensivierung von Transportprozessen in Reaktoren als auch für ein verbessertes Verständnis der Grundlagen ist der Übergang von regellosen Strukturen zu definierten Abmessungen im Mikro- und Millimeterbereich. Bei der Beschreibung der Transportvorgänge mit chemischen Reaktionen in kleinen Kanälen sind schon wesentliche Fortschritte erzielt worden, insbesondere bei laminaren, einphasigen Strömungen und definierten zweiphasigen Systemen wie der Taylor-Strömung. Weitere aktuelle Richtungen sind die Nutzung von Mini- und Mikroemulsionen als Kleinst-Reaktoren, Prozesse in Mizellen und Vesikeln in der Kolloidchemie sowie die Verwendung von Schwämmen und anderen neuartigen porösen Medien für verschiedene reaktionstechnische Anwendungen.

Ein weiteres aktuelles Forschungsfeld ist die alternative Aktivierung und Energiezufuhr bei chemischen Reaktionen. Dazu gehören der Energieeintrag durch Kavitation, Ultraschall, Mikro- oder Radiowellen und Licht. Neuartige Fluide wie ionische Flüssigkeiten und überkritische Medien haben ebenfalls ein großes Anwendungspotenzial für die Reaktionstechnik und sind hinsichtlich ihres Einflusses auf die Transporteigenschaften noch weitgehend unbekannt.

Ziel ist es, Stoff- und Wärmetransportvorgänge auf die ablaufenden chemischen Reaktionen so anzupassen, dass ein maximaler Umsatzgrad bei möglichst hoher Selektivität erreicht wird. Der Wärmetransport muss dabei stets

möglichst effizient durchgeführt werden, damit an jeder Position im Reaktor die für die chemischen Umsetzungen optimale Temperatur sichergestellt ist. In der Mehrzahl der Fälle wird auch eine möglichst intensive Stoffübertragung angestrebt. Allerdings gibt es interessante Sonderfälle, in denen es von Vorteil ist, Stofftransportprozesse gezielt zu behindern. Dazu gehört beispielsweise die formselektive Katalyse, bei der der Zugang von Edukten zu bzw. das Entweichen von Produkten aus mikroporösen Systemen bewusst eingeschränkt wird. Auch in anderen mehrphasigen Systemen sind solche gezielten Behinderungen von Stofftransportprozessen mit Vorteilen bezüglich der Produktverteilung denkbar und längst noch nicht vollständig erschlossen.

Das Zusammenwirken von Reaktionskinetik und Thermodynamik mit den ablaufenden Transportvorgängen im Reaktor stellt ein hochgradig rückgekoppeltes System dar, das insbesondere bei mehrphasigen Reaktoren noch nicht vollständig verstanden ist. Hierzu sind weitere experimentelle und theoretische Fortschritte erforderlich.

### Forschungsbedarf

- » Nutzung von mikro- und millistrukturierten Reaktoren mit definierten Kanalabmessungen als Modellsysteme insbesondere für mehrphasige Reaktionen
- » Experimentelle und theoretische Erfassung turbulenter Strömungen in ausgedehnten mehrphasigen Systemen
- » Optimierung von Stofftransportvorgängen beispielsweise durch maßgeschneiderte Porensysteme in Katalysatoren, in mizellaren Systemen und Mikroemulsionen

### B. MINIPLANT-TECHNIK UND EXPERIMENTELLES SCALE-UP

Nach dem Auffinden eines neuen Erfolg versprechenden Syntheseweges und der zugehörigen Katalysatoren beginnt der Prozess der Verfahrensentwicklung. Ausgehend von der Laborsynthese werden Verfahrenskonzepte ausgearbeitet und die Einzelschritte des Verfahrens im Labor und durch Simulation überprüft. Auch die Zusammenschaltung der Einzelschritte kann in gängigen Simu-

lations- und Entwicklungsumgebungen (z.B. Aspen Engineering Suite) sehr effizient durchgeführt werden. Der Einfluss von zunächst unbekanntem Nebenprodukten, die sich in Rückführströmen anreichern und ggf. zu Fouling, d.h. zu Verbackungen in Rohrleitungen, Maschinen und Apparaten führen können, ist jedoch nicht durch Simulationen zu erfassen. Um solche Effekte zu untersuchen und zu verstehen, werden heute Laborapparaturen (Trennkolonnen, Reaktoren, etc.) zu einer Miniplant zusammengesetzt. Eine Miniplant ist eine kleine, vollständige Anlage mit Produktionsmengen um  $100 \text{ g h}^{-1}$  bestehend aus Eduktvorbereitung, Syntheseteil, Aufarbeitung und allen Rückführungen und ist damit eines der wichtigsten experimentellen Werkzeuge der modernen Verfahrensentwicklung (Abbildung 8).

Nach Bestätigung bzw. iterativer Verbesserung des Verfahrenskonzeptes in der Miniplant ist aus klassischer Sicht der nächste Schritt die Planung und der Aufbau einer Versuchsanlage (Pilotanlage) mit deutlich höherer Kapazität. Der Maßstab der Pilotanlage liegt zwischen dem der Miniplant und dem der späteren technischen Anlage. Die Produktionsmengen von einigen  $\text{kg/h}$  bis  $\text{t/h}$  erlauben hier z.B. die Durchführung anwendungstechnischer Tests bzw. Kundenbelieferung im größeren Maßstab sowie das Studium des Anlagenverhaltens unter halbttechnischen Bedingungen. Der Betrieb der Anlage dient zur Vervollständigung und Absicherung bereits ermittelter Daten und Unterlagen. Er ist einer der Hauptkostentreiber bei der Kommerzialisierung technischer Verfahren und sorgt für eine erhebliche Verlängerung der Entwicklungszeiten. Der Bau einer Pilotanlage sollte daher heute die Ausnahme sein.

Mit der Verbesserung der Simulationsprogramme zur Modellierung von Prozessen hat die so genannte ganzheitliche „Integrierte Miniplant-Technologie“ als Kombination von experimenteller Miniplant-Technik und Prozesssimulation in den letzten Jahren immer mehr an Bedeutung gewonnen, da die Synergie zwischen Miniplant-Technik und mathematischer Simulation zu einer ähnlich guten Scale-Up-Sicherheit führt wie der Einsatz einer Pilotanlage.

Die Basis für das Scale-up von Reaktoren ist das Aufstellen und Lösen der Massen-, Energie- und Impulsbilanzen, die ein System von gekoppelten partiellen Differential-

gleichungen darstellen, das numerisch gelöst werden muss. In frühen Phasen der Prozessentwicklung scheitert diese rigorose Methode jedoch oft an der Nichtverfügbarkeit von Stoffdaten, kinetischen Daten und unscharfen Randbedingungen. Daher ist man auch heute noch auf die Dimensionsanalyse bzw. dimensionslose Kennzahlen angewiesen. Diese sind nichts anderes als das Verhältnis systemrelevanter Terme in den schon erwähnten Bilanzgleichungen.

Besonders einfach kann das experimentelle Scale-up bei Rohrbündel- oder Plattenreaktoren durchgeführt werden, da hier das Scale-up ausgehend vom Pilotversuch im Einrohr- bzw. Ein-Kanal-Reaktor über ein „Numbering-Up“ erfolgen kann. Diese Strategie wird auch bei mikrostrukturierten Reaktoren mit vielen parallelen Strömungskanälen verfolgt, wobei durch ein geeignetes Design der Verteilungsstrukturen unbedingt für eine gleichmäßige Aufteilung der Strömung auf die einzelnen Kanäle zu sorgen ist.

Bei chemischen Prozessen, bei denen große Reaktorvolumina mit komplexen fluiddynamischen Verhältnissen eingesetzt werden, ist heute immer noch ein Scale-up nur über kleine Scale-up-Faktoren möglich, um das Risiko der Maßstabsübertragung beherrschen zu können.

### Forschungsbedarf

- » Steigerung der Effizienz des Miniplant-Betriebs durch:
  - kostengünstige Automatisierung
  - Einsatz wiederverwendbarer Module in Labor-Anlagen, deren Modelle bereits fertig in der Modellbibliothek der Simulationsumgebung hinterlegt sind
  - Verbesserung der Skalierbarkeit von Apparaten (z.B. zur Verarbeitung von Feststoffen) aus dem Labormaßstab in den technischen Maßstab
- » Vermeidung oder Verringerung von Pilotversuchen durch validierte Modelle für die Maßstabsübertragung von Reaktoren und Entwicklung von Tools zur Bewertung und Begrenzung von Risiken der Maßstabsübertragung in den Produktionsmaßstab
- » Entwicklung von Verfahrens- und Anlagenkonzepten und Konzepten für die Reaktortechnik, die ein beschleunigtes und vereinfachtes Scale-up z.B. durch Numbering-up ermöglichen (siehe EU-Projekte Copiride und F3 Factory)

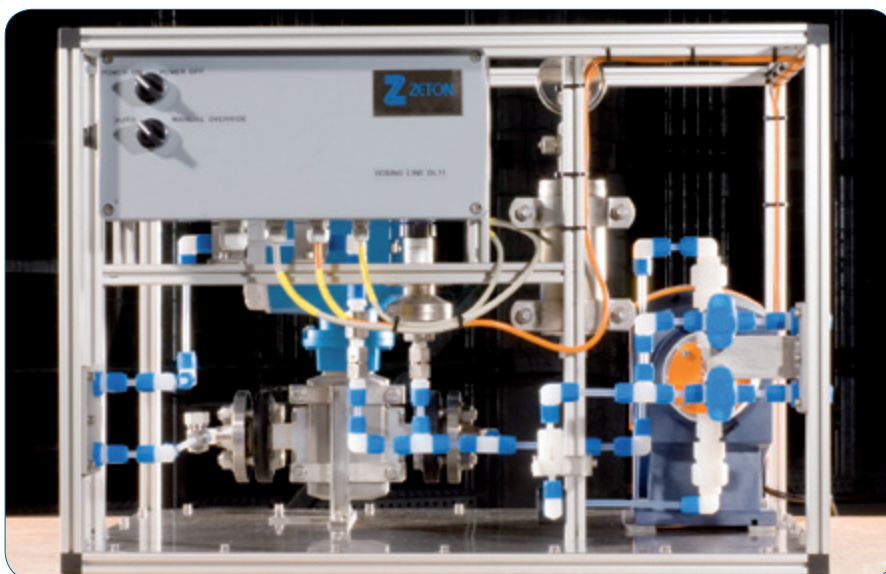


Abbildung 8: Modulare Dosiereinheit für Miniplants für korrosive Flüssigkeiten (Quelle: Zetron BV)

## C. APPARATEENTWICKLUNG

### Ausgangssituation/Stand der Technik

Die Entwicklung der Apparatechnik für den Bau von chemischen Reaktoren ging Hand in Hand mit der Entwicklung von neuen Verfahren. Ein historisches Beispiel dafür ist die Entwicklung der Hochdruckreaktoren für die Ammoniaksynthese vor hundert Jahren.

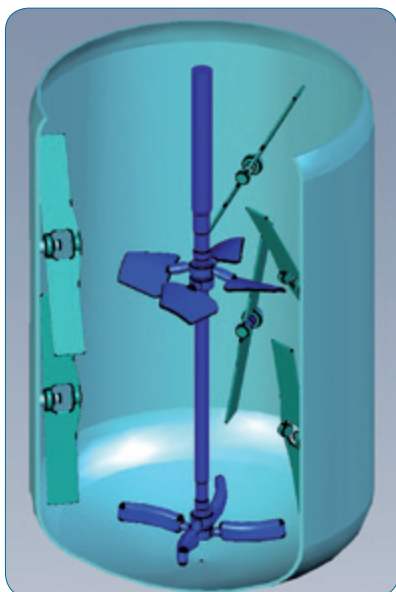
Dabei ist die Palette der Apparatechnik und der ReaktorbaufORMen mittlerweile so breit wie die Produktpalette, die in chemischen Reaktoren hergestellt wird. Der Rührkessel ist aufgrund seiner Flexibilität die meistgenutzte Bauform. Jedoch reicht das Apparatespektrum von klassischen Festbettreaktoren mit Salzsäure- oder Verdampfungskühlung, Wärmetauscherreaktoren, Blasensäulen, Strahlschlaufenreaktoren, Düsenreaktoren, Wirbelschichtreaktoren, Hochtemperaturreaktoren über komplexere Reaktoren wie Mikrostruktur-Reaktoren, photochemische Reaktoren, elektrochemische Reaktoren, Knetreaktoren bis hin zu hybriden Systemen wie Reaktivdestillationen, Reaktivextraktionen oder Gaswäschen.

Obwohl der Rührkessel einer der ältesten Bauformen eines chemischen Reaktors darstellt, befindet er sich in stetiger Entwicklung. Im Bereich emaillierter Rührkessel (Abbildung 9) wurden z.B. neue Lösungen (hier flexible Stromstöreranordnungen) gefunden, die die Flexibilität und Energieeffizienz in Gas-Flüssig-Systemen trotz der eingeschränkten Fertigungsmöglichkeiten mit Email deutlich gesteigert haben.

Um die Wärmeabfuhr zu verbessern, werden in Rührkesseln sogenannte Wärmetauscherplatten verwendet (Abbildung 10), die im Vergleich zu eingebauten Wärmetauscherschlangen ein Vielfaches an Wärmetauscherfläche anbieten. Damit lassen sich exotherme Reaktionen in Mehrphasensystemen, wie z.B. Suspensionshydrierungen besser kontrollieren.

Salzbadreaktoren sind klassische Festbettreaktoren für exotherme, heterogen katalysierte Gasphasenreaktionen (siehe Abbildung 11). Sie werden z.B. für partielle Oxidationsreaktionen wie die Synthese von Acrylsäure verwendet.

Multibaffling® Pfaudler



OptiMix® DeDietrich

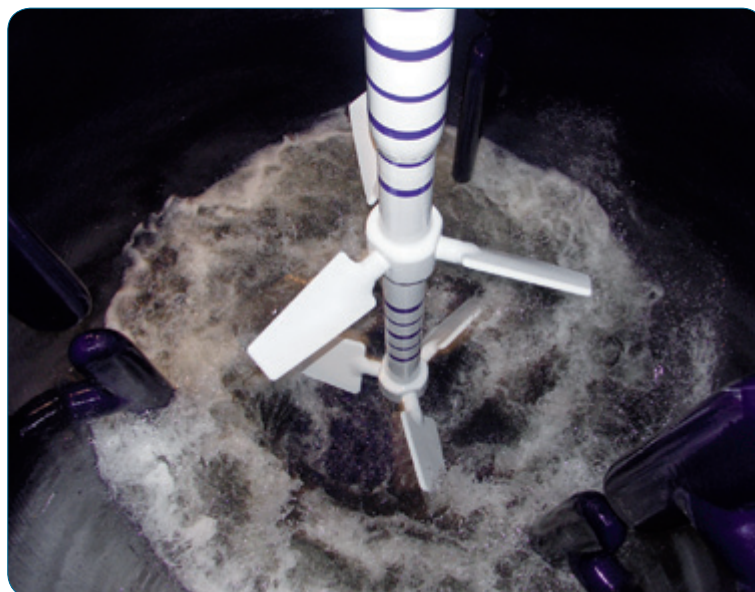


Abbildung 9: Rührapparate der Firmen Pfaudler und deDietrich



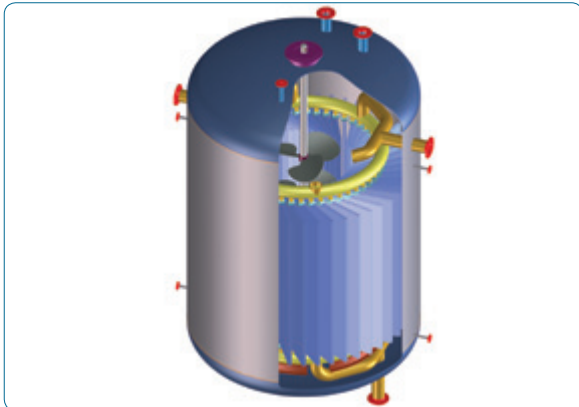


Abbildung 10: Rührkessel für Veresterungen ausgestattet mit Wärmetauscherplatten zur Beheizung und Kühlung (Quelle: DEG-Engineering GmbH)

Wenn die Anforderungen an die Wärmeabfuhr oder Temperaturkontrolle steigen, werden sog. Wärmetauscherreaktoren verwendet. Basierend auf Plattenwärmetauschern (Abbildung 12) werden für einphasige Systeme bereits sehr hohe Wärmeübertragungsleistungen erreicht.

Die Entwicklung der Mikrostruktur-Reaktoren in den letzten Jahren hat gezeigt, dass durch sie in besonderer Weise vor allem für einphasige Systeme die Intensivierung des Wärmetransportes bis zur fertigungstechnischen Grenze getrieben wurde. Mikrostruktur-Reaktoren (Abbildung 13) zeichnen sich dabei durch interne Strukturen von 10-1000



Abbildung 11: Salzbadreaktor DWE® Reactors (Quelle: MAN DWE GmbH)



Abbildung 12: Alfa Laval ART® Plate Reactor

Mikrometer aus. Mit diesen Strukturen sind Aufheizraten von Flüssigkeiten im Bereich von Millisekunden möglich.

Mikrostrukturreaktoren können im Prinzip auch für mehrphasige Systeme eingesetzt werden, allerdings führen hier Effekte wie Oberflächenspannung zu anderen apparativen Lösungen als bei großen Reaktoren. Bisherige Lösungen beschränken sich daher auf den Labormaßstab.

Bemühungen zur Prozessintensivierung, hier am Beispiel der heterogen katalysierten Reaktivdestillation, führten ebenfalls zu neuen Apparateentwicklungen, um das Zu-



Abbildung 13: Mikrostrukturierter Produktionsreaktor des IMVT zur Synthese von Diacetonacrylamid aus Diacetonalkohol und Acrylnitril. Der Reaktor ist aus Hastelloy C-22 gefertigt, diffusionsgeschweißt und besteht aus einem Mischmodul und vier Reaktionsmodulen. Er erreicht reaktionsseitig einen Durchsatz von ca. 1.5 t/h und war bei DSM Fine Chemicals Austria in Linz für mehrere Kampagnen über viele Wochen im Einsatz. (Quelle: Institut für Mikroverfahrenstechnik (IMVT), Karlsruher Institut für Technologie (KIT))

sammenwirken von Katalyse, Reaktion und Stofftrennung zu optimieren. So wurde z.B. die Fixierung des festen Katalysators in der Reaktivdestillationskolonne durch Integration des Katalysators in die trennwirksamen Kolonneneinbauten (Abbildung 14) realisiert.

Für die Entwicklung und Auslegung von Apparaten nutzen die Hersteller neben Festigkeitsberechnungen vor allem aufwändige CFD-Rechnungen, um die Anforderungen an Strömungsmechanik und Wärme- und Stofftransport quantitativ zu beschreiben. Insbesondere für einphasige Reaktionssysteme erreichen diese CFD-Rechnungen mittlerweile Auslegungsqualität.

Die Anforderungen aus der Sicherheitstechnik führen normalerweise entweder zu einer druckfesten Auslegung oder der Verwendung von Druckentlastungseinrichtungen. Moderne Reaktoren können aber auch durch das Zusammenwirken von Mess- und Steuerungstechnik mit reaktionstechnischen Modellrechnungen stets in einem sicheren Zustand gefahren werden, wodurch o.g. Sicherheitsmaßnahmen entfallen und damit wirtschaftlich attraktive Konzepte entstehen.

#### Technisch-wissenschaftliche Herausforderungen

Eine bessere Prozesskontrolle durch in-situ-Analysenmethoden und verbesserte Messtechnik wie z.B. Wär-

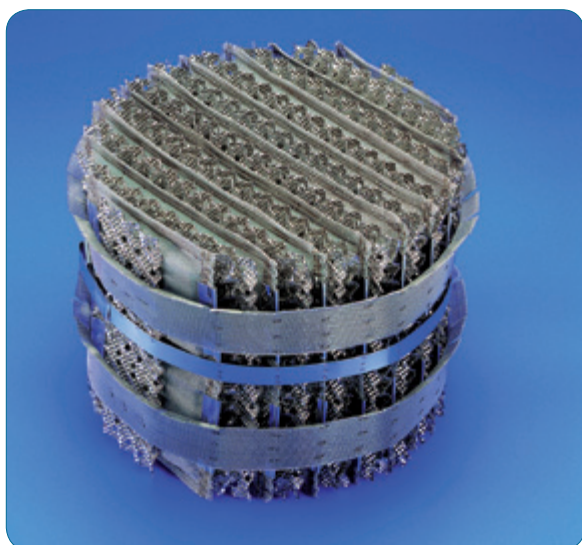


Abbildung 14: Katapak™ von Sulzer ChemTech

mestromsensoren oder in-line-Viskositätsmessungen ist erstrebenswert, da damit gerade im Bereich der Batch-Synthesen die Qualitätskontrolle deutlich verbessert wird. Darüber hinaus kann die Entwicklungszeit für Batch-Verfahren verkürzt werden, wenn ein Teil der Prozessoptimierung durch verbesserte Prozesskontrolle in die Produktionsphase verlagert wird. Dies ist vor allem bei Agrochemikalien und Pharmaprodukten interessant, da hier die Anforderungen an die Entwicklungszeiten besonders hoch sind. Analysetechniken wie z.B. Online-NMR oder spektroskopische Methoden wie UV-VIS, IR- und Raman-Spektroskopie zeigen bereits ein großes Potential für die prozesstechnische Optimierung.

Einige biotechnologische Prozesse erfordern sowohl große Reaktionsvolumina in der Größenordnung von mehr als 1000 m<sup>3</sup> als auch hohe spezifische Stofftransportleistungen, was im Zusammenhang mit konventionellen Begasungssystemen zu hohen Antriebsleistungen von mehr als 10 MW führt, die maschinentechnisch nur schwer zu realisieren sind. Wünschenswert wäre es, z.B. durch eine Hybridisierung der Begasungseinrichtungen die hohen Antriebsleistungen zu vermeiden und insgesamt die Energieeffizienz bei diesen hohen Stofftransportleistungen zu erhöhen.

Die direkte Beschichtung von Wärmetauscherelementen in Mikrostrukturreaktoren mit festen Katalysatoren (Abbildung 15) könnte ein neues Feld für die Beherrschung stark exothermer Reaktionen eröffnen. Dazu müssen Beschichtungsverfahren entwickelt werden, die auch in den Abmessungen eines Mikroreaktors zuverlässige und reproduzierbare Beschichtungen liefern. Damit einhergehend müssen auch Charakterisierungsverfahren zur Qualitätskontrolle für solche Beschichtungen entwickelt werden.

Die Entwicklung von neuen apparativen Konzepten ist ein komplexer Prozess. Im Idealfall realisiert der Reaktor für die optimale Reaktionsführung die optimalen Transportprozesse für Wärme, Stoff und Impuls. Dies setzt zunächst die Kenntnis der optimalen Reaktionsführung, die als idealer Referenzfall ohne jegliche apparative Beschränkungen ermittelt werden sollte, voraus. Anschließend müssen die auf diese Weise ermittelten optimalen Temperatur- und Konzentrationsverläufe apparativ durch

einen technischen Reaktor bestmöglich angenähert werden. Um hierbei von einer beispielgetriebenen – und somit nicht verallgemeinerbaren – Vorgehensweise zu einer allgemein anwendbaren Systematik zu gelangen, sind neue Optimierungsmethoden erforderlich. Zudem bedarf es auch einer Weiterentwicklung von Simulationswerkzeugen für Wärme-, Stoff- und Impulstransport, speziell in komplexen Geometrien und/oder mehrphasigen Systemen (siehe Kapitel 4).

### Forschungsbedarf

- » Neue in-situ-Analytikmethoden und neue Prozessmesstechnik im Produktionsprozess verbessern die Prozesskontrolle und helfen Entwicklungszeiten für Batch-Prozesse zu verkürzen
- » Neue Beschichtungsmethoden von Wärmetauscherreaktoren mit Katalysatoren schaffen eine neue Klasse von Reaktoren
- » Neue Designmethoden ermöglichen die modellgestützte Entwicklung neuer Reaktorkonzepte zur Realisierung der optimalen Reaktionsführung

### D. PROZESSINTENSIVIERUNG

Die Prozessintensivierung zielt auf eine deutliche ökonomische und ökologische Steigerung der Effizienz chemischer und biotechnologischer Prozesse und die Gene-

rierung neuer Produkte oder Produktqualitäten ab. Sie bedient sich einer interdisziplinären, ganzheitlichen Betrachtungsweise sowie einer mehrskaligen Prozessanalyse von der Molekularebene bis hin zum globalen Standortverbund. Sie setzt sich mit gezielten Maßnahmen zur Prozessstrukturierung und -integration auseinander und fördert die effektive Erschließung innovativer Apparate und Technologien.<sup>18, 19</sup>

Im Zusammenhang mit der Reaktionstechnik kommen in erster Linie die folgenden prinzipiellen Prozessintensivierungsmaßnahmen zum Einsatz, die die räumliche, zeitliche, thermodynamische und funktionelle Gestaltung der Reaktionsführung begünstigen:

- » Miniaturisierung
- » Hybridisierung
- » Strukturierung
- » Dynamisierung
- » Neuartige Reaktionsmedien und Energiezufuhr
- » Integration und Rationalisierung

Die Miniaturisierung, d.h. der Betrieb von ‚Mikroreaktoren‘ mit charakteristischen Abmessungen im Millimeter- oder Mikrometerbereich, verfolgt das Ziel der Aufhebung

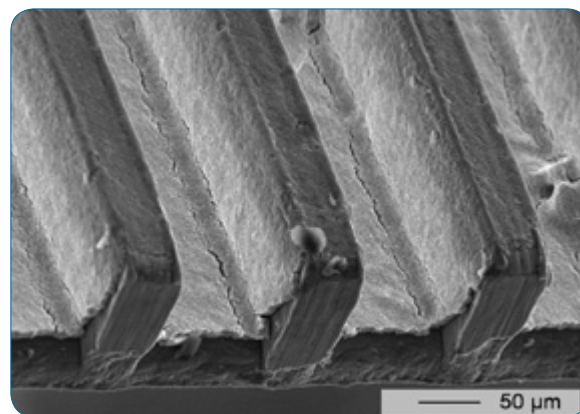
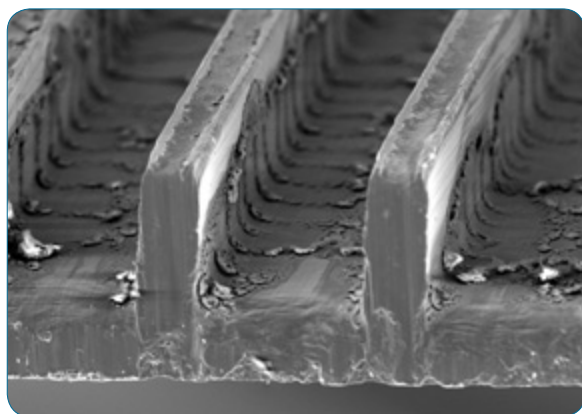


Abbildung 15: Links: Sol-Gel-Beschichtung einer mikrostrukturierten Edelstahlfolie mit 5% Pt/CeO<sub>2</sub> für die Wassergas-Shift-Reaktion. Rechts: Washcoat-Beschichtung einer mikrostrukturierten Edelstahlfolie mit Cu/ZnO-Nanopartikeln für die Methanol-Reformierung. (Quelle: Institut für Mikroverfahrenstechnik (IMVT), Karlsruher Institut für Technologie (KIT))

<sup>18</sup> A. Stankiewicz, J.A. Moulijn (eds.), Re-engineering the chemical process plant – process intensification, Marcel Dekker Inc. NY, 2004.

<sup>19</sup> F.J. Keil (ed.), Modeling of process intensification, Wiley-VCH, Weinheim, 2007.

von Stoff- und Wärmetransportlimitierungen, die die reine ‚chemische‘ Reaktionsleistung häufig beeinträchtigen. Hohe spezifische Wärmeaustauschflächen sowie verstärkter Stoffübergang infolge intensiver Vermischung gewährleisten ausgezeichnet definierte Betriebsbedingungen. Die stochastischen Vorgänge in herkömmlichen Reaktoren werden weitgehend eliminiert und durch das einheitliche Bearbeitungsprofil der mikroskaligen Fahrweise abgelöst. Die geringen Inventare von Mikroapparaten sind sowohl sicherheitstechnisch als auch für die Anwendung kostspieliger Hilfsstoffe von großem Vorteil.

Die erfolgreiche Erschließung der potenziellen Leistungssteigerung durch Mikroreaktoren bei technischen Produktionsmengen setzt voraus, dass man über zuverlässige Parallelisierungsstrategien verfügt, die eine gleichmäßige Verteilung der Strömung über zahlreiche Mikrokanäle sicherstellen. Die Anfertigung mikrostrukturierter Reaktoren bedingt auch hohe Kosten, die durch die verbesserten reaktionstechnischen Kennzahlen gerechtfertigt werden müssen. Um den Fabrikationsaufwand zu minimieren,

sollten die angewandten Strukturen ‚so fein wie notwendig, aber so grob wie möglich‘ ausgelegt werden.

Die Hybridisierung der Reaktionsführung mit Trennoperationen, wie beispielsweise bei der reaktiven Destillation, kann Synergien für beide Verfahren eröffnen – die Entfernung eines (Neben-)Produktes aus dem Reaktionsgemisch ermöglicht die Überwindung einer Umsatzbeschränkung durch das chemische Gleichgewicht, während eine Reaktion die Bildung von azeotropen Gemischen verhindern kann. Prinzipiell lässt sich jede Trennoperation mit einer Reaktion in einen multifunktionalen Apparat integrieren. Die reaktive Absorption stellt beispielsweise eine ausgereifte Technologie für zahlreiche Gasreinigungsverfahren und Synthesereaktionen dar. Die reaktive Destillation ist für bestimmte Anwendungen ebenfalls kommerziell etabliert. Chromatographische und Membranreaktoren werden seit Jahrzehnten intensiv erforscht und kommen bei Nischenanwendungen auch bereits zum technischen Einsatz. Aus Sicht des Reaktionstechnikers bietet die Integration zusätzlicher Unit-Operations ein sehr nützliches

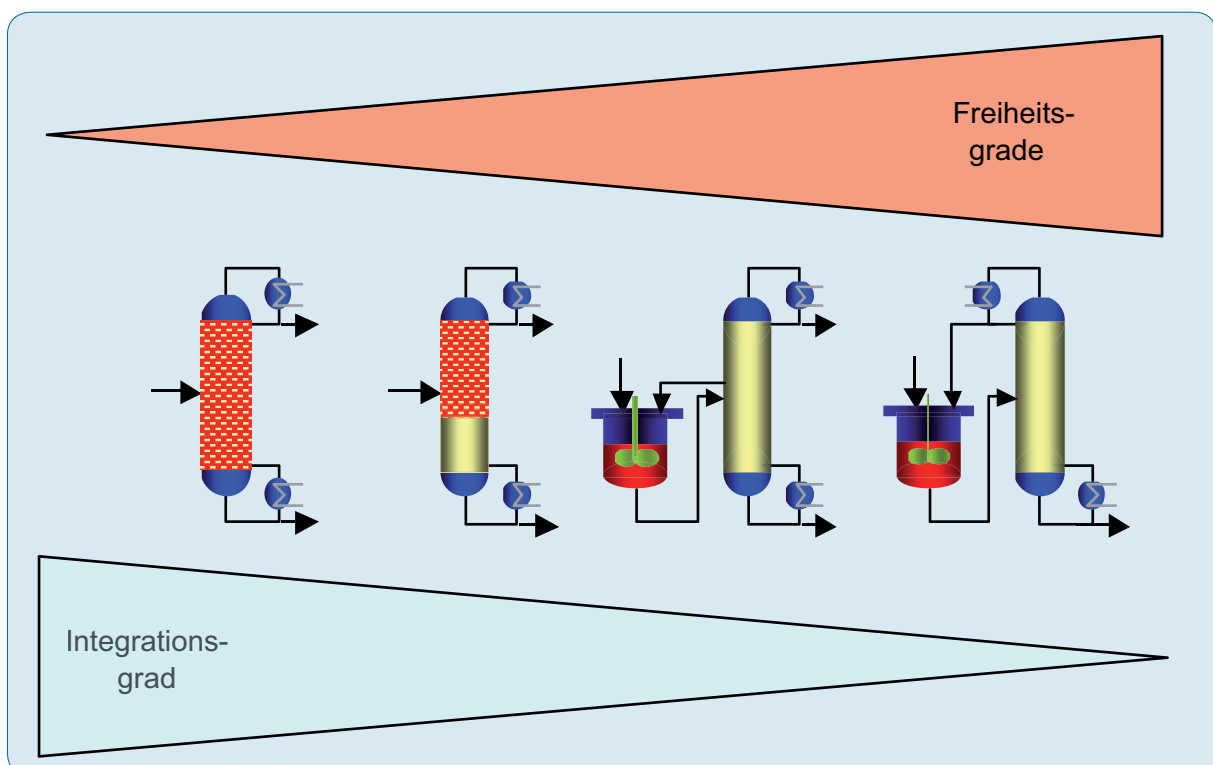


Abbildung 16: Freiheitsgrade vs. Integrationsgrad multifunktionaler Reaktoren



Instrumentarium zur Manipulation der Konzentrations- und Temperaturprofile im Reaktor. Die Abstimmung zwischen Reaktion und Trennverfahren erfordert allerdings meist Kompromisse, die zum suboptimalen Betrieb der einzelnen Prozesse und auch zum Verlust an Freiheitsgraden führen können bzw. eine sinnvolle Integration gänzlich verhindern (Abbildung 16).

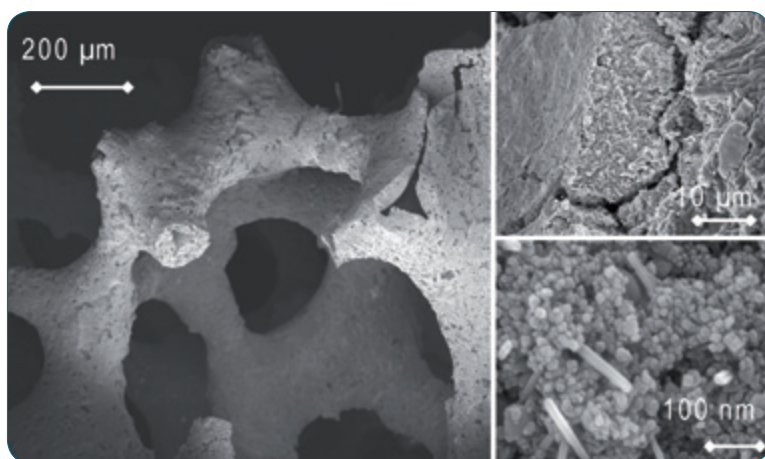
Bei der reaktiven Destillation benötigt man besondere Packungen, um die Anforderungen beider Verfahren hinsichtlich Verweilzeit und Phasengrenzfläche zu erfüllen. Zur Auflösung eventueller Widersprüche hat sich vor allem die räumliche Makro- und Mikrostrukturierung der verschiedenen Funktionalitäten im Reaktor anstelle einer einfachen Zusammenführung bewährt. Katalytische Packungen können meist zweckmäßig in bestimmten Abschnitten von reaktiven Destillationskolonnen eingesetzt werden, während in den anderen Abschnitten lediglich Destillation ohne Reaktion stattfindet. Die Identifizierung des optimalen Integrationsgrades und der apparativen Möglichkeiten zu dessen Realisierung stellen die wesentlichen Herausforderungen bei der Auslegung multifunktionaler Reaktoren dar.

Eine räumliche Strukturierung des Reaktionsraums oder eines Feststoff-Katalysators bietet oft umfangreiches Potenzial zur Verbesserung des Reaktorbetriebs. So kann man durch Verdünnung des Katalysators im Bereich des

Hot-spots eine bessere Harmonisierung zwischen der reaktiven Wärmezeugung und der Wärmeabfuhr durch die Reaktorkühlung bewerkstelligen. Durch eine ungleichmäßige Verteilung der katalytischen Aktivität im Katalysatorkorn können Desaktivierungserscheinungen hinausgezögert werden. Neuartige Katalysatorstrukturen, wie katalytische Schwämme (Abbildung 17), gestatten eine gezielte Einstellung des Stoff- und Wärmetransportverhaltens bei geringem Druckverlust. Auch wenn die Optimierungsaufgabe bei Strukturierungsmaßnahmen zunächst sehr komplex erscheint, führt sie häufig zu einfachen asymptotischen Lösungsansätzen.

Die Dynamisierung des Reaktorbetriebs kann als zeitliche Strukturierung der Reaktionsführung interpretiert werden und ist in der herkömmlichen Reaktortechnik, beispielsweise bei der halbkontinuierlichen Reaktorfahrweise, keine unbekannte Herangehensweise. Eine dynamische Reaktorfahrweise darf allerdings nicht den stationären Betrieb der restlichen Anlage beeinträchtigen. Durch periodische Modulation der Flüssigkeitszufuhr in einen Rieselbettreaktor kann man die Zugänglichkeit der Katalysatoroberfläche für die Gasphase deutlich steigern und damit die Umsetzungsgeschwindigkeit erhöhen. Ähnliche Vorteile können durch Anwendung eines rotierenden Flüssigkeitsverteilers erschlossen werden. Durch Druckpulsation können diffusive Transportvorgänge durch konvektive Beiträge erheblich beschleunigt werden. Eine zyklische Reaktorfahrweise gestattet weiterhin die Ausnutzung von Speichereffekten und somit die Einstellung von Temperatur- und Konzentrationsbedingungen, die im stationären Betrieb nicht erreicht werden könnten, wie bei Strömungsumkehrreaktoren zur oxidativen Abgasbehandlung. Die genaue Einstellung der Konzentrations- und Temperaturverhältnisse in Mikroreaktoren dürfte die technische Implementierung dynamischer Fahrweisen erleichtern.

Neuartige Reaktionsmedien, wie überkritische Fluide, perfluorierte Lösungsmittel und ionische Flüssigkeiten, ermöglichen eine maßgeschneiderte Gestaltung der Reaktionsumgebung, eine



**Abbildung 17:** Keramischer Schwamm imprägniert mit SCR-Katalysator (links: Schwammstruktur, oben rechts: Katalysatorschicht, unten rechts:  $\text{TiO}_2$  (kugelförmige Partikel) und  $\text{V}_2\text{O}_5$  (Nadeln)) (Quelle: Engler-Bunte-Institut, Bereich Gas, Erdöl und Kohle, Karlsruher Institut für Technologie (KIT))<sup>20</sup>

gezielte Beeinflussung der Aktivitäten der einzelnen Reaktionspartner sowie verbesserte Transporteigenschaften gegenüber konventionellen Reaktionssystemen. Darüber hinaus bieten sie oft umwelttechnische Vorteile im Vergleich zu herkömmlichen organischen Lösungsmitteln. Andererseits sind sie meist teurer und können aufwendige apparative Maßnahme, z.B. wegen einer Hochdruckfahrweise, fordern. Sogenannte ‚fette‘ Fahrweisen ohne inerte Verdünnungsmittel oder Lösungsmittel gelten als aussichtsreiche, wenn auch ehrgeizige, reaktionstechnische Ziele, die den Umfang der nachgeschalteten Aufarbeitung deutlich reduzieren könnten. Hierfür müssen allerdings meist schwerwiegende Fragen der Sicherheitstechnik oder der Produktqualität geklärt werden.

Bei alternativen Möglichkeiten der Energiezufuhr sind Plasma-Reaktoren, z.B. zur Herstellung von Acetylen, schon Stand der Technik. Der volumetrische Energieeintrag durch Mikrowellen oder Scherkräfte benötigt keine Temperaturgradienten und eignet sich daher besonders bei temperaturempfindlichen Flüssigkeiten und Feststoffen. Die Verwendung von Ultraschall bietet sich vor allem bei Reaktionen an festen Oberflächen an, weil die reaktive Oberfläche durch Kavitation frei gehalten werden kann. Solche unkonventionellen Energieformen sind natürlich aufwendig, und der gleichmäßige Eintrag im größeren Maßstab ist als problematisch einzustufen. Durch Zentrifugalfelder kann man eine Gegenstromfahrweise zwischen zwei Fluiden selbst in fein strukturierten Packungen erzeugen, und damit einen wesentlichen Nachteil der Mikroreaktionstechnik überwinden.

Man erkennt, dass Prozessintensivierungsmaßnahmen sich häufig ergänzen, wodurch sich allerdings die Komplexität der Reaktionsführung bzw. der Reaktorauslegung deutlich erhöht. Durch die Verwendung einer kontinuierlichen statt einer Satzreaktorfahrweise bei relativ geringen Produktionsmengen sowie durch eine schnelle und flexible Reaktionsführung entsprechend der Marktnachfrage infolge Prozessintensivierungsmaßnahmen kann eine effektive Rationalisierung des gesamten Herstellverfahrens erzielt werden. Weiterhin eröffnet die Prozessintensivierung neue Horizonte bezüglich Direktsynthesen und der lokalen Prozessüberwachung und Kontrolle.

Während viele der vorgenannten Prozessintensivierungsmaßnahmen in der Forschung beispielhaft erfolgreich demonstriert wurden, ist es nun die Aufgabe, diese Erkenntnisse auch auf breiter Basis in industrielle Verfahren einfließen zu lassen. Hierzu ist es erforderlich, die verschiedensten Optionen zur Prozessintensivierung bereits in der frühen Phase der Prozessentwicklung einzu beziehen und vergleichend bewerten zu können. Um von der derzeitigen beispielgetriebenen Herangehensweise zu einer derartigen verallgemeinerbaren modellgestützten Methodik zu gelangen, sind allerdings noch weitere methodische Grundlagenarbeiten erforderlich. Das Ziel dabei ist, die Prozessintensivierung auf eine theoretisch fundierte Grundlage zu stellen und die Zweckmäßigkeit der Prozessintensivierungsmaßnahmen mithilfe systemanalytischer Methoden im integrierten Anlagenumfeld zu bewerten.

### Forschungsbedarf:

- » Universelle Methodik zur Einbeziehung von Prozessintensivierungsmaßnahmen in Prozesssynthese und Prozessentwicklung
- » Entwicklung von zuverlässigen Parallelisierungsstrategien für die Mikroreaktionstechnik
- » Entwicklung einer geeigneten Mikroverfahrenstechnik zur Ergänzung der Mikroreaktionstechnik
- » Ausarbeitung systematischer Ansätze zur räumlichen und zeitlichen Strukturierung verschiedener Funktionalitäten im Reaktionsraum
- » Ausarbeitung von störungsarmen dynamischen Reaktorfahrweisen
- » Verbesserte Scale-up-Fähigkeit für neuartige Energiequellen

# 6 Beispiele aus der Praxis

Die nachfolgenden Beispiele sollen die vielfältigen Beiträge der chemischen Reaktionstechnik zu aktuellen Problemen des Rohstoffwandels, des Umweltschutzes, der Energie- und Ressourceneffizienz chemischer Prozesse sowie der Herstellung innovativer Materialien aufzeigen. Aus der persönlichen Sicht unterschiedlicher Autoren wird geschildert, wie Fortschritte bei der Entwicklung von Katalysatoren zu neuen Lösungen in der Reaktortechnik führen und es wird aus den Verknüpfungen zu anderen Disziplinen wie der Trenntechnik und Regelungstechnik ersichtlich, wie interdisziplinär die Reaktionstechnik heute bereits aufgestellt ist. Diese Fallstudien, die zukünftig durch weitere Beispiele ergänzt werden sollen, illustrieren den wichtigen Beitrag der Reaktionstechnik zur kontinuierlichen Verbesserung chemischer Prozesse.

## A. DAS UHDE ENVINOX®-VERFAHREN

Das Uhde EnviNOx®-Verfahren beseitigt die umweltschädlichen Stickoxide  $\text{NO}_x$  und  $\text{N}_2\text{O}$  aus Abgasen von Chemieanlagen, insbesondere aus Anlagen zur Produktion von Salpetersäure. Bei der Salpetersäure-Produktion nach dem Ostwald-Verfahren entstehen durch die katalytische Oxidation von Ammoniak typischerweise zwischen 5 und 10 kg Lachgas pro Tonne Salpetersäure, die ohne entsprechende Abgasreinigung in die Atmosphäre emittiert

würden. Angesichts einer Weltjahresproduktion von mehr als 50 Millionen Tonnen Salpetersäure und der Tatsache, dass Lachgas spezifisch rund 300 mal stärker zur Erderwärmung beiträgt als Kohlendioxid, besteht die Notwendigkeit, diese Emissionen möglichst weitgehend zu beseitigen. Im Uhde EnviNOx®-Verfahren werden  $\text{N}_2\text{O}$  und  $\text{NO}_x$  in einem zweistufigen Reaktor unter Verwendung von speziellen Eisen-Zeolith-Katalysatoren, die unter dem Produktnamen EnviCat®- $\text{N}_2\text{O}$  und EnviCat®- $\text{NO}_x$  von der Süd-Chemie AG vertrieben werden, nahezu vollständig

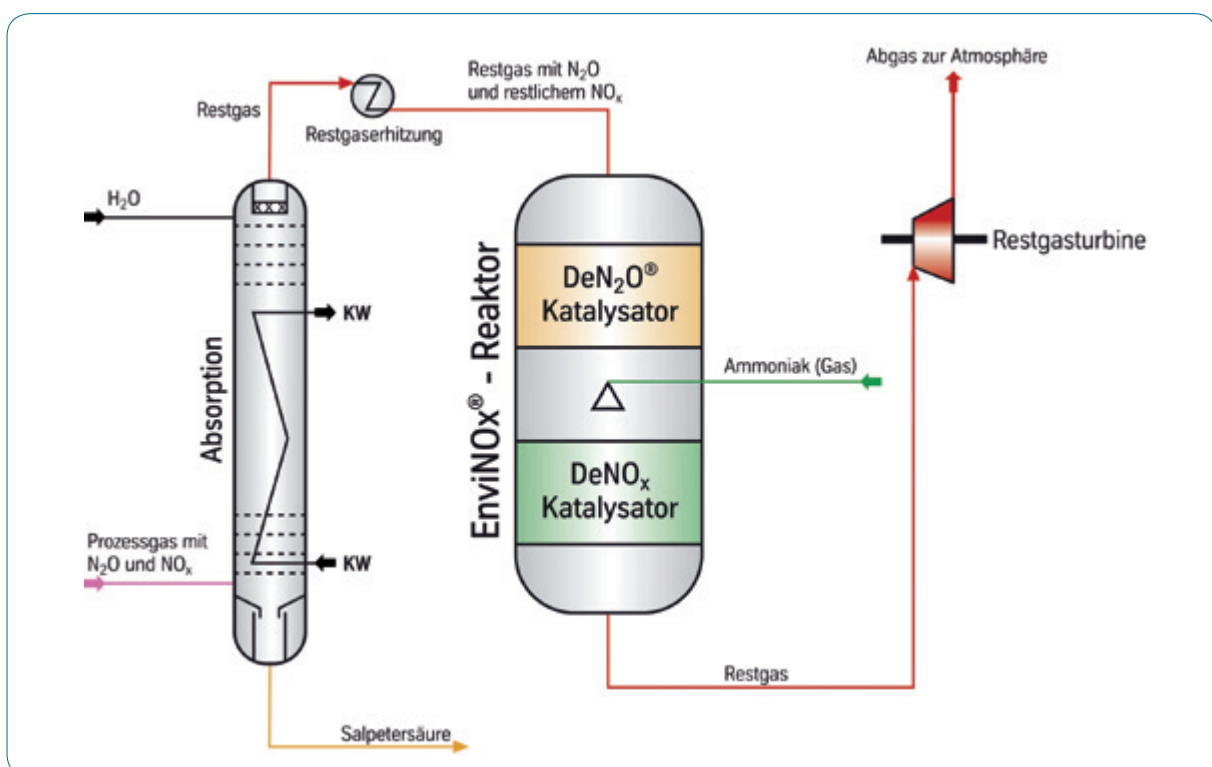


Abbildung 18: EnviNO<sub>x</sub>®-Prozessvariante 1

entfernt. Der Abbau des  $N_2O$  kann dabei je nach Temperatur und Abgaszusammensetzung entweder durch katalytische Zersetzung in  $N_2$  und  $O_2$  (Verfahrensvariante 1, siehe Abbildung 18) oder durch katalytische Reduktion mittels Kohlenwasserstoffen (Verfahrensvariante 2) bewirkt werden. Die Minderung des  $NO_x$ -Gehaltes erfolgt durch selektive katalytische Reduktion mit  $NH_3$ . Die Herausforderung in der Prozessentwicklung besteht neben dem Auffinden geeigneter Katalysatoren vor allem auch in der Auslegung des Reaktors, das heißt der jeweiligen Anpassung des Verfahrens an die variierenden Prozessbedingungen. Die Entwicklung des EnviNOx<sup>®</sup>-Verfahrens wurde deshalb von intensiven reaktionstechnischen Untersuchungen begleitet, um das Wechselspiel von Kinetik, Thermodynamik und Stofftransport über den gesamten Einsatzbereich des Prozesses beschreiben zu können. Bis heute wurden weltweit bereits 10 EnviNOx<sup>®</sup>-Anlagen erfolgreich in Betrieb genommen, wodurch in Summe eine jährliche Emissionsreduktion von ca. 25.000 Tonnen  $N_2O$ , oder umgerechnet rund 7,5 Millionen Tonnen Kohlendioxid pro Jahr, erzielt wird.

## B. HPPO-TECHNOLOGIE VON EVONIK UND UHDE

Die technische Epoxidation von Propen mit Wasserstoffperoxid nach dem Evonik-Uhde Verfahren wurde unter dem Namen HPPO bisher in einer Großanlage kommerzialisert.

Eine Schlüsselaufgabe für die Prozessentwicklung beim HPPO-Verfahren war, dass das Oxidationsmittel Wasserstoffperoxid ( $H_2O_2$ ) vollständig umgesetzt und gleichzeitig eine hohe Selektivität bei der Umsetzung des  $H_2O_2$  mit Propen zu Propylenoxid erzielt werden muss. Ausbeute- bzw. Selektivitätsverluste gehen beim HPPO-Verfahren auf die Folgereaktion des hochreaktiven Propylenoxids mit Wasser (welches u.a. in der Reaktion von  $H_2O_2$  mit Propen entsteht) und die Folgereaktion von Propylenoxid mit Methanol (dem auch in der Literatur am häufigsten eingesetzten Lösungsmittel für die Reaktanden) zurück. In der Literatur ist eine große Anzahl an Ideen zu finden, wie es gelingen könnte, die Folgereaktionen des Propylenoxids zu unterdrücken. Ein technisch umsetzbarer Weg ist es,



Abbildung 19: Produktionsanlage zur Herstellung von Propylenoxid nach dem Evonik Uhde-HPPO-Verfahren der SKC in Ulsan / Korea



die Reaktionsbedingungen im Reaktor so zu wählen, dass die Reaktionsmischung in zwei Phasen vorliegt, einer polaren Phase mit  $\text{H}_2\text{O}_2$ , Wasser, Methanol und einer unpolaren Phase, die überwiegend aus Propen und Propylenoxid besteht.

Unter diesen Reaktionsbedingungen wurde es möglich, beide Ziele der Prozessentwicklung zu erreichen, die geforderten hohen  $\text{H}_2\text{O}_2$ -Umsätze bei gleichzeitig hohen Propylenoxid-Selektivitäten.

Das Verfahren wurde in Kooperation von Uhde GmbH und Evonik Degussa GmbH im Labor- und Miniplantmaßstab entwickelt und anschließend über einen Scale-up-Faktor von mehr als 10000 in den Produktionsmaßstab übertragen. Dieser enorme Scale-Up-Faktor wurde nur dadurch ermöglicht, dass während der gesamten Verfahrensentwicklung ein vollständiges Prozessmodell erstellt und ständig an die experimentellen Daten angepasst wurde. Parallel zur Entwicklung des Verfahrens und des Reaktorsystems erfolgte die Entwicklung und Optimierung eines maßgeschneiderten, hochselektiven Katalysators vom Typ Titan-Silikalit.

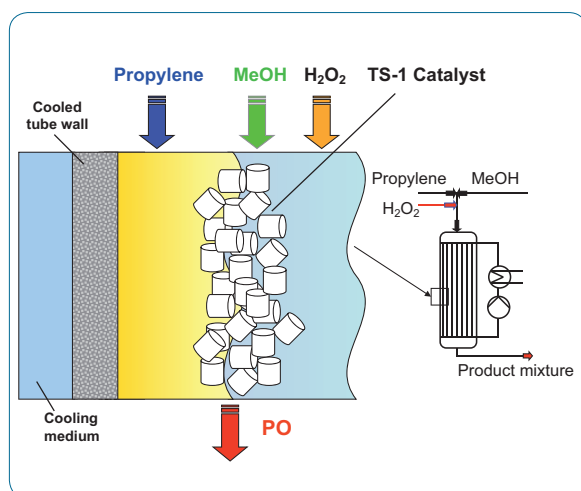


Abbildung 20: Strömungszustand im Reaktor des Evonik Uhde HPPO-Verfahrens

### C. AUTOABGASKATALYSE

Autoabgaskatalysatoren stellen die am häufigsten ge- und verbauten chemischen Reaktoren der Welt dar. Ihre Aufgabe ist es, Schadstoffe wie unverbrannte Kohlenwasserstoffe,  $\text{CO}$ ,  $\text{NO}_x$  und Rußpartikel, welche bei der Verbrennung des Motorkraftstoffs unter stöchiometrischen (Benzinmotor) oder sauerstoffreichen (Magermix Motor, Diesel) Bedingungen entstehen, aus dem Abgas zu entfernen. Hierbei stecken ständig verschärfte gesetzliche Auflagen und ein offener Wettbewerb der Katalysatorhersteller einen Rahmen, in dem Autoabgaskatalysatoren und -systeme immer weiter optimiert werden müssen.

Im Vergleich zum Großteil aller chemischen Prozesse, die auf einen optimalen Bereich von Betriebspunkten ausgelegt werden können, muss der Autoabgaskatalysator bei allen während des Fahrbetriebs auftretenden Bedingungen seine Funktion erfüllen. So unterliegen die Temperaturen des Abgases, dessen Schadstoffgehalt und der Abgasvolumenstrom starken Schwankungen. Diese hängen nicht nur davon ab, ob sich das Kraftfahrzeug im Stadtverkehr oder auf der Autobahn befindet, sondern zum Teil auch von der individuellen Fahrweise des Fahrzeugführers.

Keramische Monolithe haben sich als Grundstruktur für die Autoabgaskatalyse etabliert (Abbildung 21). Sie verbinden die Eigenschaften eines ausreichend schnellen Stofftransports mit einem minimalem Druckverlust. Damit



Abbildung 21: Autoabgaskatalysator mit keramischem Monolithen (Quelle: Umicore AG & Co. KG)



sind sie den in den Anfängen der Autoabgasnachbehandlung ebenfalls verwendeten Kugelbettreaktoren in Bezug auf Druckverlust, Gewicht und mechanische Stabilität überlegen.

Beim Benzinmotor, der bei einem stöchiometrischen Verhältnis von Kraftstoff zu Luftsauerstoff ( $\lambda$ ) arbeitet, ist seit Mitte der 70er Jahre schrittweise ein effektives Katalysatorkonzept entwickelt worden. Der heutige, so genannte Drei-Wege-Katalysator (TWC) ist in der Lage, alle anfallenden Schadstoffe (HC, CO, NO<sub>x</sub>) in einem auf  $\lambda = 1$  geregelten Betriebspunkt zu entfernen.

Neuere Problemstellungen in der Abgaskatalyse betreffen die Nachbehandlung von Abgasen aus mager betriebenen Motoren, d.h. bei Sauerstoffüberschuss. Solche Motoren erfreuen sich immer größerer Beliebtheit, da sie weniger Kraftstoff verbrauchen und damit zur Verminderung von CO<sub>2</sub>-Emissionen beitragen. Hier funktioniert das TWC Konzept nicht mehr, da weniger HC und CO, aber größere Mengen an NO<sub>x</sub> entstehen. Auch stellen Rußpartikel im

Besonderen bei Dieselmotoren eine neue Schadstoffquelle dar. Somit ergeben sich für solche Abgase verschiedene Katalysatorsysteme (siehe Tabelle 1), deren Zusammenspiel und Regelung zu aktuellen Herausforderungen in der Abgaskatalyse geworden sind.

Gerade weil sich eine große Zahl an Kombinationsmöglichkeiten der Systeme ergibt und Synergien gefunden bzw. ausgenutzt werden müssen, ist es für die Katalysator- aber auch für die Autohersteller wichtig, detaillierte Modelle für einzelne Katalysatoren und ganze Abgassysteme zu entwickeln. Hier spielen neben der Kinetik natürlich Stoff- und Wärmetransport, Strömungsverhalten im Wall-flow Monolithen (DPF) und Alterungskorrelationen eine Rolle.

Eines der zurzeit komplexesten Systeme zur Nachbehandlung von Dieselaabgasen ist das Bluetec I von Daimler. Es verwendet beide in Tabelle 1 aufgeführten Komponenten zur NO<sub>x</sub> Reduktion. Dabei wird der NSR-Katalysator in seiner Regenerationsphase als Ammoniakquelle genutzt,

**Tabelle 1: Übersicht über aktuelle Komponenten, die zur Nachbehandlung von Dieselaabgasen verwendet werden.**

System	Aufgabe
DOC	<ul style="list-style-type: none"> <li>» Diesel-Oxidations-Katalysator</li> <li>» Oxidation von HC und CO</li> <li>» Oxidation von NO zu NO<sub>2</sub>, um für NSR oder SCR ein optimales Verhältnis NO:NO<sub>2</sub> einzustellen</li> </ul>
DPF	<ul style="list-style-type: none"> <li>» Dieselpartikelfilter, Wall-flow Monolith</li> <li>» Zurückhalten von Rußpartikeln</li> <li>» muss zyklisch durch Rußabbrand regeneriert werden</li> </ul>
NSR	<ul style="list-style-type: none"> <li>» NO<sub>x</sub>-Speicher-Reduktions-Katalysator</li> <li>» Speichert NO<sub>2</sub> in Form von Nitraten ein</li> <li>» muss zyklisch durch kraftstoffreichen Betrieb regeneriert werden</li> <li>» Nitrat wird mit CO zu N<sub>2</sub> umgesetzt</li> </ul>
SCR	<ul style="list-style-type: none"> <li>» Katalysator für selektive katalytische Reduktion von NO<sub>x</sub> zu N<sub>2</sub> mittels NH<sub>3</sub></li> <li>» kontinuierliche Reduktion von NO<sub>x</sub> mit NH<sub>3</sub></li> <li>» wird aus in separatem Tank mitgeführter wässriger Harnstofflösung durch Hydrolyse „on board“ erzeugt</li> </ul>
SCO	<ul style="list-style-type: none"> <li>» Katalysator für selektive katalytische Oxidation von NH<sub>3</sub> zu N<sub>2</sub></li> <li>» erforderlich in manchen SCR Systemen</li> <li>» erlaubt aggressivere Dosierung des Reduktionsmittels</li> </ul>

um verbleibendes  $\text{NO}_x$  im stromabwärts platzierten SCR-Katalysator zur reduzieren.

Seit den 90er Jahren sind die  $\text{NO}_x$  Emissionen in Deutschland um 50 %, die CO-Emissionen um 76 % und der Ausstoß von Kohlenwasserstoffen um 90 % zurückgegangen. Neben Verbesserungen im Motormanagement ist dies nicht zuletzt der Autoabgaskatalyse zu verdanken, die damit durchaus als eine Erfolgsgeschichte der chemischen Reaktionstechnik bezeichnet werden kann.

#### D. SIMULATIONS-GESTÜTZTES PRODUKT-DESIGN IN DER HOCHDRUCK-POLYMERISATIONSTECHNIK

Das Design neuer polymerer Werkstoffe ist eine ausgesprochen anspruchsvolle Aufgabe in der Polymerisationstechnik als einer Spezialdisziplin der Reaktionstechnik. Als Bewertungsgrößen für den Prozess gelten für die Produktqualität nicht nur die Reinheit und für die Produktivität nicht ausschließlich Umsatz und Selektivität. Vielmehr kommen die Anwendungseigenschaften des polymeren Produkts als maßgebliche Größen hinzu, wobei diese übergreifend für die Verarbeitbarkeit, spätere Eigenschaf-

ten im endgültigen Produkt und Alterungseigenschaften stehen. Diese Anwendungseigenschaften sind wiederum durch die mikrostrukturellen Eigenschaften des makromolekularen Ensembles determiniert, die ihrerseits durch die Reaktionskinetik und die Prozessbedingungen festgelegt werden. Damit eröffnet sich ein extrem weites Parameterfeld für das Design neuer Produkte und Werkstoffe. Die Komplexität der physikalisch-chemischen Vorgänge bei den Polymerisationsreaktionen führt insbesondere im Betrieb kleiner Anlagen zu Besonderheiten, die den Scale-up-Prozess erschweren. Bedingt durch z.B. die sich erheblich ändernden Systemviskositäten bilden sich an Oberflächen Randschichten aus, die ein zu langen Zeiten hin verschobenes Verweilzeitverhalten zeigen. Das Produkt, welches in diesen Randschichten gebildet wird, weicht aus diesen Gründen in seinen Eigenschaften erheblich vom eigentlichen Hauptprodukt ab, vorzugsweise werden sehr hohe Molmassen gebildet (Abbildung 22). Auch wenn diese Fraktionen in der Menge nur sehr geringe Anteile am Reaktionsprodukt ausmachen, so verändern sie doch erheblich dessen Anwendungseigenschaften. Als Konsequenz sind, obwohl sich Produktivität und Betriebsparameter in Pilot-Anlagen gut nachstellen lassen, die Produkte in ihren Anwendungseigenschaften nicht zwingend vergleichbar und damit kann das Konzept der Musterherstellung auf Pilotanlagen versagen.

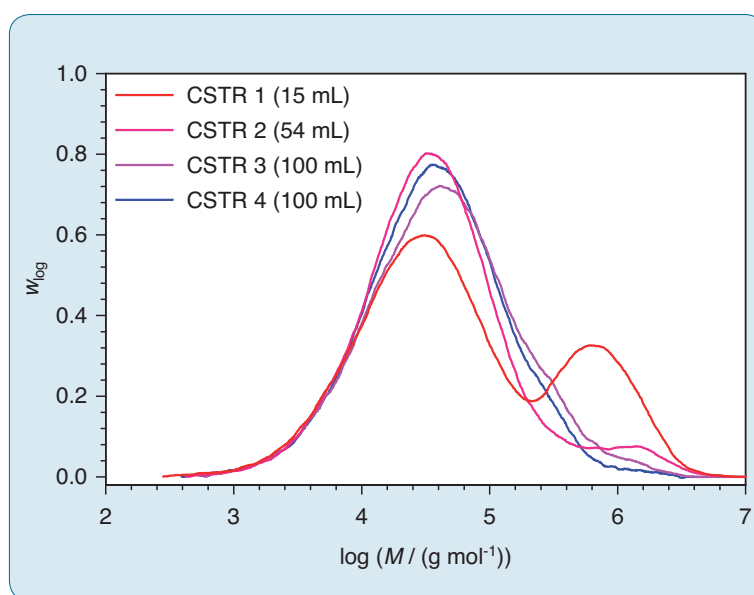


Abbildung 22: Molmassenverteilungen aus Rührkesselreaktoren unterschiedlicher Größe für Vergleichsexperimente bei identischen Betriebsparametern. Der Vergleich von CSTR 3 & 4, betrieben an unterschiedlichen Standorten, zeigt die Reproduzierbarkeit.

Ein Ausweg sind Modellierung und Simulation. Geeignete Modelle auf Basis einer detaillierten Reaktionskinetik sind in der Lage, erhebliche Maßstabsübertragungen zu realisieren und die Produkteigenschaften abzubilden. Die Anwendungen reichen von der Prozessoptimierung bis hin zum Computer-gestützten Produkt-Design. Unabdingliche Grundlagen sind dabei detaillierte kinetische Modelle, deren Koeffizienten möglichst aus unabhängigen Experimenten der Grundlagenforschung abgeleitet werden, und eine umfassende und sorgfältige Charakterisierung der polymeren Mikrostruktur. Diese dient als quantifizierbare Schnittstelle zwischen der kinetischen Modellierung und der Beschreibung der Anwendungseigenschaf-

ten. Mit solchen Modellen lassen sich mittlerweile sehr gut die mikrostrukturellen Polymereigenschaften von Produkten aus großen technischen Reaktoren beschreiben (Abbildung 23).

Bedingt durch die Komplexität der Systeme lag das bisherige Interesse vornehmlich bei Homo- und einigen ausgesuchten Co-Polymerisationen. Der Erfolg in diesen Bereichen führt allerdings dazu, dass zunehmend Mehrkomponenten-Polymerisationen in den Blickpunkt des Interesses rücken. Die Grundlage hierfür bilden moderne, die polymere Mikrostruktur abbildende kinetische Modelle auf Basis von Elementarreaktionen und unter Berücksichtigung von Stofftransportphänomenen, sowie eine detaillierte Analytik der polymeren Mikrostruktur zur Validierung dieser Modelle. Gleichzeitig bildet sie die Brücke zu Modellen der Struktur-Eigenschaftskopplung als drittes tragendes Element in dieser Entwicklungslinie.

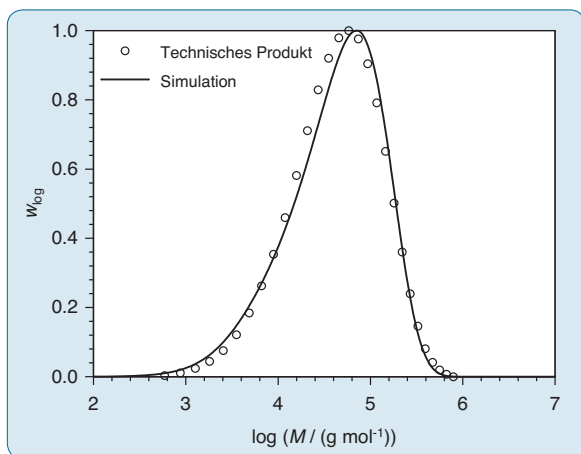


Abbildung 23: Vergleich der Molmassen-Verteilungen für ein technisches Produkt aus einer Großanlage und dem Simulationsergebnis für diesen Prozess.

## E. MEMBRANREAKORTECHNOLOGIE FÜR EFFIZIENTE REAKTIONSFÜHRUNG MIT HOCHSELEKTIVEN HOMOGEN-KATALYSATOREN

Der Einsatz homogener Katalysatoren ermöglicht bei einer Reihe von Reaktionen eine sehr gute Steuerung der Selektivität zu dem gewünschten Zielprodukt. Gegenüber

der heterogenen Katalyse kann bei der homogenen Katalyse auf eine einfachere Reaktortechnik zurückgegriffen werden, bei der eine effiziente Wärmeabfuhr mit einfachen Mitteln realisiert werden kann. Homogene Katalysatoren sind häufig als Metallkomplexe aufgebaut mit einem Übergangsmetall als Zentralatom und Liganden, über die die Eigenschaften des Katalysators gesteuert werden können.

Ein wesentliches Problem stellt die Abtrennung des Homogenkatalysators aus der Reaktionsmischung nach dem Reaktor dar. So müssen die entstandenen Produkte in der Regel unter Bedingungen vom Katalysator abgetrennt werden, die die sensiblen Katalysatorsysteme beeinträchtigen können. Die Folge sind Produktverunreinigungen und hohe Kosten durch Katalysatorverluste: Homogenkatalysatoren enthalten häufig Metalle der VIII. Nebengruppe des Periodensystems, wozu auch Edelmetalle wie Rhodium, Palladium und Platin gehören, die gerade in Zeiten hoher Rohstoffpreise mit entsprechenden Kosten zu Buche schlagen. Und auch die spezifischen Liganden, die die Selektivität maßgeblich beeinflussen, sind in der Regel sehr teuer.

Bei einigen wichtigen organischen Synthesen bietet die organophile Nanofiltration eine neue Möglichkeit zur „sanften“ Abtrennung der homogenen Katalysatorsysteme. Dazu zählen insbesondere die Suzuki-Kupplung, eine Palladium-katalysierte Kreuzkupplung zwischen Organoboronsäuren und Arylhalogeniden, die Metathese, bei der formal Substituenten an Doppel- bzw. Dreifachbindungen ausgetauscht werden, wobei katalytisch aktive Übergangsmetallverbindungen anwesend sind, und die Hydroformylierung, bei der Olefine mit Wasserstoff und Kohlenmonoxid zu Aldehyden reagieren (siehe Abbildung 24).

Evonik hat in einer gemeinsamen Entwicklung mit dem GKSS Forschungszentrum in Geesthacht, der GMT Membrantechnik GmbH in Rheinfelden, der TU Darmstadt und der Universität Rostock das Verfahren der organophilen Nanofiltration vor kurzem zur industriellen Anwendungsreife gebracht<sup>21</sup>. Als Modellprozess diente die durch einen Rhodium-Komplex katalysierte Hydroformylierung. Bei diesem Verfahren ist die thermische Abtrennung der länger-kettigen Aldehyde problematisch für das empfindliche

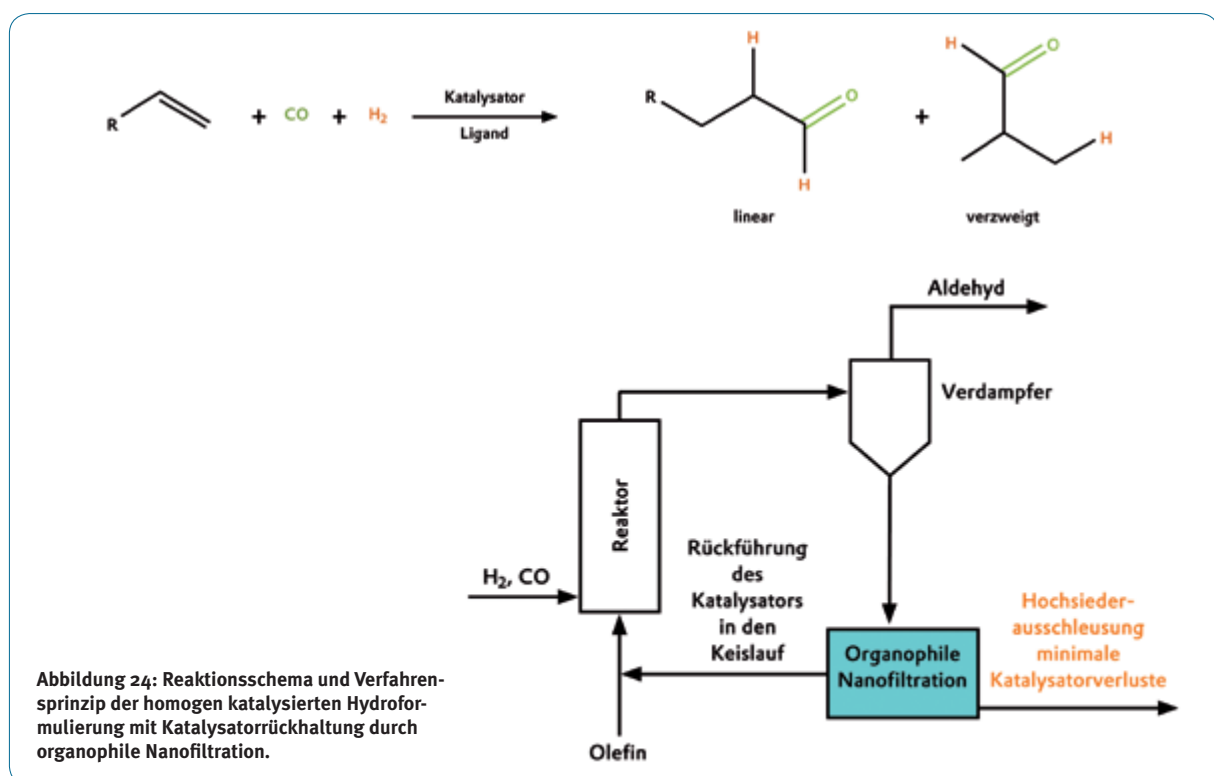
21 elements30, Evonik Science Newsletter, 1/2010, 6-11.

Katalysatorsystem, das neben Kohlenmonoxid auch noch Liganden enthält. Die Produkte müssen im Hochvakuum entfernt werden, wodurch der Partialdruck von CO gegen Null geht. In der Folge verlassen Carbonyl-Gruppen den Rhodiumkomplex, so dass Andockstellen frei werden, die von anderen Rhodiumatomen genutzt werden. So kommt es zu einer fortschreitenden Verclustering, die den Katalysator deaktiviert.

Dieser Prozess wird durch den Einsatz einer organophilen Nanofiltrationsmembran verhindert, die eine schonende Abtrennung der hoch siedenden, länger-kettigen Aldehyde vom homogenen Katalysator bei tieferer Temperatur ermöglicht. Entscheidend für die technische Machbarkeit war die Entwicklung verbesserter mehrschichtig aufgebauter Membranen mit einer neuen Klasse von intrinsisch mikroporösen Polymeren<sup>22</sup> als eigentlicher Nanofiltrationsschicht, die sich durch besonders hohe Temperaturstabilität und geringe Quellneigung in der organischen Reaktionsmischung auszeichnen und auch nach langer Prozesszeit einen Rückgewinnungsgrad von Rhodium von über 99% ermöglichen.

## F. CRACKER-ENTWICKLUNG UND VERÄNDERUNG DER CHEMISCHEN ROHSTOFFBASIS

Die Geschichte der Reaktionstechnik ist auch geprägt von der jeweils aktuellen Rohstoffsituation. In der Anfangszeit der industriellen Chemie wurden natürliche Rohstoffe und zugängliche Bodenschätze wie Kohle oder Asphalt verwendet. Bei der Verkokung von Steinkohle zu Koks für die Stahlindustrie oder Gebäudeheizung fielen flüssige Abfallprodukte an, der Steinkohlenteer, der eine reichhaltige Quelle für die Entwicklung chemischer Produkte wurde. Ebenso war die aufkommende Verwendung von Erdöl gegen Ende des 19. Jahrhunderts eine neue Quelle für die chemische Industrie. Auch bei der Rohöl-Destillation bleibt ein hoch siedender Rückstand übrig, der anfangs als Abfall entsorgt wurde oder in den Straßenbau wanderte. Der stark steigende Bedarf an Benzin führte zunächst zur Einführung des thermischen Crackens nach 1910 und des katalytischen Crackens etwa nach 1935. Das katalytische Cracken, das zuerst in Festbett-Reaktoren durchgeführt wurde (Houdry-Verfahren), hatte gegenüber



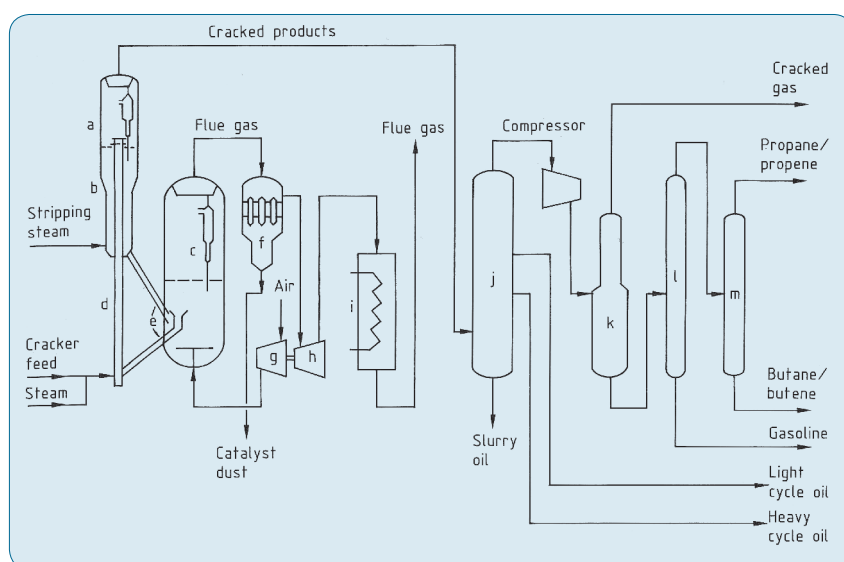
dem in einfachen Röhrenöfen stattfindenden thermischen Cracken mehrere Vorteile: Das Produktspektrum enthielt weniger Methan und C<sub>2</sub>-Kohlenwasserstoffe und mehr C<sub>3</sub>- und C<sub>4</sub>-Komponenten, die sich durch Alkylierung und Polymerisation zu Motorbenzin umwandeln ließen. Durch die niedrigeren Reaktionstemperaturen enthielt das Produkt weniger Diolefine und war dadurch beständiger gegen Oxidation. Zudem wies es höhere Anteile an verzweigten Alkanen, Naphthenen und Aromaten auf, was die Oktanzahl erhöhte. Und schließlich resultierte aus der höheren Reaktionsgeschwindigkeit die Möglichkeit kleinere Anlagen zu bauen.

Die Entwicklung des katalytischen Crackens ist durch viele technologische Verbesserungen während relativ kurzer Zeitspannen geprägt. Das erste Houdry-Design von 1936 war ein Festbett-Prozess, der als Folge von Koksablagerungen auf dem Katalysator zyklisch betrieben werden musste. Eine Anlage verfügte dazu über mehrere parallele Festbetten, von denen sich eines in Betrieb und die anderen in verschiedenen Stadien der Regeneration befanden. Das nächste Design war ein kontinuierliches Verfahren, bekannt als Thermoform Catalytic Cracking (TCC). Es nutzte einen Röstofen zum Abbrennen der auf dem Katalysator abgeschiedenen Koksablagerungen in Verbindung mit einem mechanischen Katalysatortransport zwischen Reaktor und Regenerator über ein vertikales Transportsystem. Dieses mechanische Wanderbett-Prinzip wurde zunächst

durch einen Feststofftransport mittels Gasströmung abgelöst, später dann als Gas-Lift, und nach der Einführung pulverförmiger Katalysatoren Anfang der 1940er Jahre durch das heute dominierende Wirbelschicht-Crackverfahren (FCC).

Abbildung 25 zeigt die wesentlichen Komponenten einer solchen FCC-Anlage. Der durch das Abbrennen der Koksablagerungen aufgeheizte Katalysator fließt aus dem Regenerator (c) nach unten, wo er am Fuß des Risers mit dem flüssigen Feed und Wasserdampf vermischt wird. Durch den heißen Katalysator und den eingeblasenen Wasserdampf kommt es zu einer Teilverdampfung des Feeds und die Mischung wird durch den Riser (d) nach oben in den Reaktor (a) getrieben, wo die Fluidisation durch die freigesetzten Kohlenwasserstoffdämpfe erfolgt. Die Crackreaktion beginnt bereits im Riser und setzt sich in der Wirbelschicht fort, wobei der Katalysator mit Koks beladen und dadurch rasch deaktiviert wird. Er gelangt daraufhin über den Stripper (b) in den Regenerator, wo er durch Zugabe von Verbrennungsluft erneut fluidisiert und die Koksablagerungen abgebrannt werden.

Zwischen den technologischen Neuerungen beim katalytischen Cracken und den Verbesserungen auf der Katalysatorseite besteht eine enge Wechselbeziehung. Ursprünglich wurden natürliche Tonmaterialien (Montmorillonit) im Festbett eingesetzt. Als dann ab 1940 die



**Abbildung 25: Typischer katalytischer Cracker in einer Raffinerie (FCC)<sup>23</sup>**  
 a) Reaktor; b) Stripper; c) Regenerator; d) Riser; e1) Regenerator Standrohr; e2) Stripper Standrohr; f) Zyklonabscheider; g) Luftgebläse; h) Abgas-Entspannungsturbine; i) Abhitzeessel; j) Fraktionierungskolonne; k) Absorber; l) Debutanizer; m) Depropanizer

<sup>23</sup> Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Oil Refining, Wiley-VCH, Weinheim, 2005 (10.1002/14356007.a18 051)



wesentlich aktiveren, stark sauren synthetischen  $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ -Katalysatoren zum Einsatz kamen, wurde neben der höheren Aktivität auch eine viel schnellere Desaktivierung festgestellt, die für einen zyklischen Betrieb in Festbettreaktoren sehr problematisch war und dadurch den Übergang zu einer anderen Reaktortechnologie erzwang. Seit etwa 1960 werden überwiegend synthetische Zeolithe als FCC-Katalysatoren eingesetzt, was zu beachtlichen Verbesserungen der Aktivität, Stabilität und Selektivität, d.h. vor allem höhere Benzin- und geringere Gasausbeute, geführt hat.

Als Weiterentwicklung des katalytischen Crackens kann das Cracken in Gegenwart von Wasserstoff betrachtet werden. Es wird bei ca.  $400^\circ\text{C}$  und erhöhtem Druck von 8-15 MPa meist als zweistufiges Verfahren durchgeführt und liefert höhere Ausbeuten und eine bessere Qualität an Destillaten als das katalytische Cracken. Die erste Stufe ist dabei mit Cobalt-Molybdän-Katalysatoren ausgerüstet und dient der hydrierenden Entfernung von Schwefel-, Stickstoff- und Sauerstoffverbindungen im Einsatzstoff. In der zweiten Stufe werden Nickel-Wolfram-Katalysatoren eingesetzt, an denen die eigentlichen Hydrocrackreaktionen stattfinden. Ein weiterer Vorteil des Hydrocrackens ist seine größere Flexibilität hinsichtlich der Einsatzstoffe und der Steuerung des Produktspektrums durch Variation der Bedingungen.

Die über die vergangenen Jahrzehnte zunehmende Nachfrage nach Benzin, Diesel, Kerosin und leichtem Heizöl bei sinkendem Bedarf an schwerem Heizöl, nicht zuletzt wegen dessen hoher Schwefel- und Metallgehalte, und der allgemein zunehmende Anteil schwerer Einsätze in der Rohölverarbeitung erzeugen einen immer weiter steigenden Anfall hoch siedender Rückstände, für die Verwertungsschemata entwickelt wurden. Diese werden mit dem Sammelbegriff Rückstandsumwandlungsverfahren bezeichnet. Hierzu gehören hydrierende Verfahren ebenso wie thermische und katalytische Crackverfahren, Lösungsmittel-Entasphaltierung und partielle Oxidation zu Synthesegas, wobei das Synthesegas anschließend über die Fischer-Tropsch-Synthese, Methanol-to-Gasoline- oder ähnliche Verfahren in synthetische Treibstoffe umgewandelt werden kann.

Rückstandsumwandlungsverfahren können auch eingesetzt werden zur Verwertung von Ölsanden, Ölschiefern, diversen Abfallstoffen und verschiedenen nachwachsenden Rohstoffen. Beispiele sind Pflanzenöle, Tierfette, Cellulose-haltige Biomassen, Lignin, Bio-Öl aus der Biomasse-Pyrolyse, Stärke und Zucker. Je nach Verfahren und Bedingungen sind grundsätzlich sehr verschiedene Produkte zugänglich.

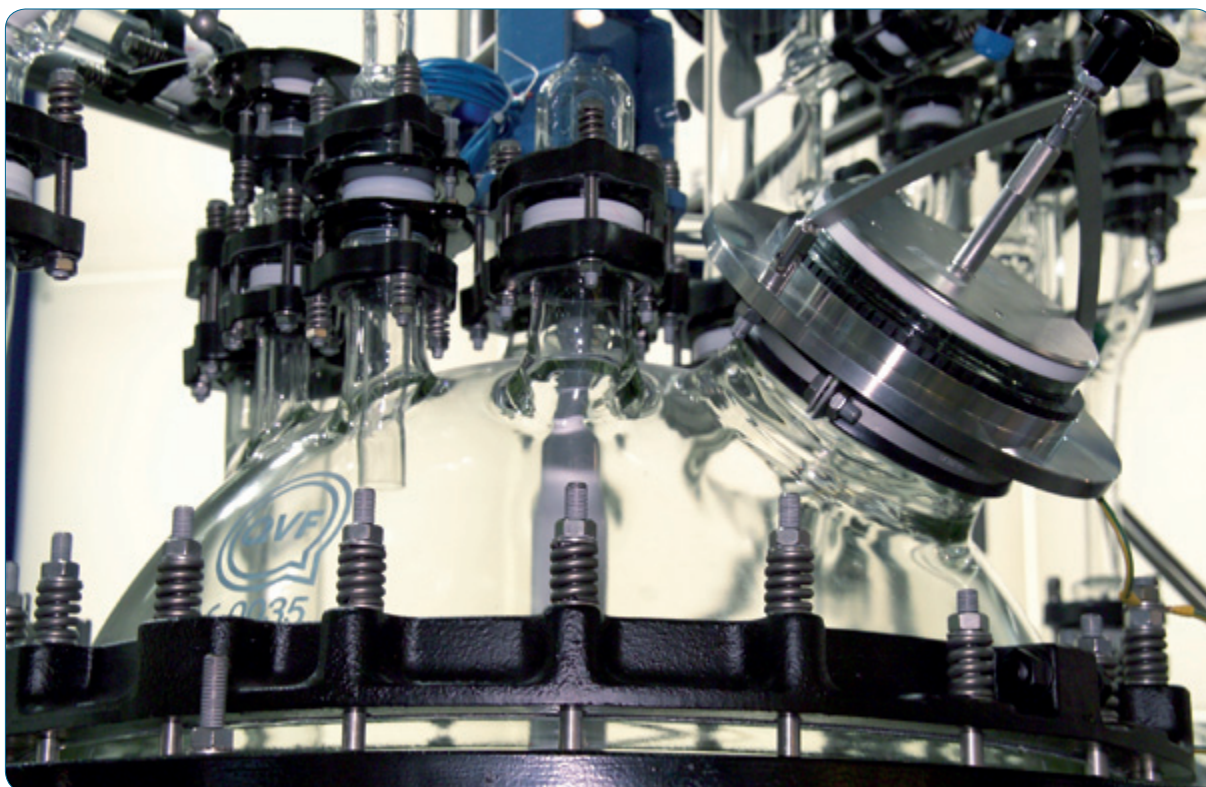
Die Anpassung solcher Verfahren, ggf. unter Einbeziehung neuer oder verbesserter Katalysatoren, an in Zukunft kostengünstig verfügbare Einsatzstoffe auf der einen Seite und marktgängige Produkte auf der anderen Seite wird wie schon in der Vergangenheit eine der wichtigen Aufgaben der Reaktionstechnik in diesem Bereich sein.

# 7 Ausblick

Die chemische Reaktionstechnik wird ihre anerkannte Stellung als Schlüsseldisziplin im Chemieingenieurwesen an der Schnittstelle von Verfahrenstechnik und technischer Chemie auch in Zukunft behaupten. Das Bekenntnis der Gesellschaft zum Prinzip der Nachhaltigkeit erfordert heute mehr denn je effiziente, Ressourcen schonende, wirtschaftliche und mit minimalen Umweltbelastungen einhergehende Verfahren zur Stoffumwandlung in der chemischen und pharmazeutischen Industrie. Dies gilt umso mehr als die gegenwärtige globale Entwicklung charakterisiert ist durch eine weiter stark wachsende Weltbevölkerung bei teilweise rasch zunehmendem Wohlstand in vielen bevölkerungsreichen Schwellen- und Entwicklungsländern. Hiermit verbunden ist ein stark ansteigender Bedarf an Trinkwasser, Nahrungsmitteln, Wohnraum und Energie, der die Welt vor große technische und ökonomische Herausforderungen stellt.

Ein zentrales Problem der Menschheit ist die Endlichkeit der Ressourcen, die in steigendem Umfang dazu führen wird, auch qualitativ minderwertige fossile Rohstoffe wie Kohle, Ölsande oder Ölschiefer zu nutzen, bei entsprechend erhöhtem Aufwand und Umweltbelastungen. Noch gravierender ist jedoch der inzwischen allgemein anerkannte Zusammenhang zwischen dem Verbrauch fossiler Ressourcen, der Zunahme der Konzentration von Kohlendioxid in der Atmosphäre und der Klimaerwärmung, der eine Reduzierung der weltweiten Kohlendioxidemissio-

nen, unter anderem durch Umstellung der Rohstoffbasis von fossilen auf nachwachsende Rohstoffe, d.h. Biomasse, erzwingt. Die Nutzung von Biomasse in großem Umfang zur Strom- und Wärmeerzeugung und für Stoffumwandlungen steht in Konkurrenz zur Nahrungsmittelproduktion und zur Erhaltung erwachsener Ökosysteme. Deshalb kommt der Entwicklung robuster, schnell wachsender, ertragreicher Pflanzen und in gleichem Maße von effizienten Umwandlungsverfahren für Biomasse mit minimalem Energiebedarf und maximaler Ausnutzung



der Einsatzstoffe größte Bedeutung zu. Zur Lösung der drängenden Kohlendioxidproblematik genügt es dabei aber nicht, langfristig neue Rohstoffquellen zu erschließen. Um kurz- und mittelfristig Effekte zu erzielen, muss die Kohlendioxidbilanz der existierenden Stoffkreisläufe verbessert werden, sei es durch Effizienzsteigerungen bei Stoff- und Energieumwandlungen, durch bessere Nutzung von Abwärme und effizientere Speicherung von Überschussstrom, oder ggf. durch gezielte Abtrennung von Kohlendioxid aus Rauchgasen und dessen sichere unterirdische Einlagerung.

Um die wirtschaftlichen Risiken zu minimieren wird die Produktion der Zukunft versuchen, die Lagerung von Rohstoffen und Produkten weitestgehend zu vermeiden und eine Herstellung zum Zeitpunkt des Bedarfs zu ermöglichen. Für die Bereitstellung von Energie und Wertstoffen in entlegenen Gebieten werden dezentrale Anlagenkonzepte und die Nutzung von Solarenergie an Bedeutung gewinnen. Beispiele sind die Stromerzeugung durch Solarthermie oder Photovoltaik sowie die Elektromobilität. Die Integration ausreichend großer und effizienter Energiespeicher in die Stromnetze ist dabei besonders in dezentralen Netzen unverzichtbar, um die fluktuierend anfallende Wind- oder Sonnenenergie zwischenspeichern. Chemische Speicher erreichen hier die höchsten Energiedichten.

Die Herausforderungen für die Reaktionstechnik vor diesem Hintergrund bestehen unter anderem darin, umweltschädliche oder unerwünschte Nebenprodukte durch gezielte Manipulation der apparateinternen Geschwindigkeits-, Temperatur- und Konzentrationsfelder zu vermeiden oder die Syntheserouten prinzipiell zu ändern, etwa mit Hilfe neuartiger Katalysatoren oder biotechnologischer Verfahren. Hand in Hand mit der chemischen Forschung müssen zukünftig in zunehmendem Maße verfahrenstechnische Module entwickelt werden, um hochkomplexe Syntheseprodukte und multifunktionale Materialien bereitzustellen. Die benötigten Syntheserouten sind dabei oft erst noch zu erschließen. Die Reaktionssysteme der Zukunft werden sich stark von den bisher eingesetzten Prozessen unterscheiden. Wenn alternative Rohstoffquellen wie zum Beispiel Biomasse eingesetzt werden, führt dies in aller Regel zu aufwändigeren Reaktorsystemen. Ingenieure, Chemiker und Physiker müs-

sen sich daher in Zukunft auf komplexere, mehrphasige Stoffgemische einstellen. Um die Entwicklungszeiten zu verkürzen und mit neuen Produkten rascher auf den Markt zu gelangen, wird immer mehr auf simulationsgestützte Entwicklungswerkzeuge zurückgegriffen werden müssen. Die zugrundeliegenden reaktionstechnischen Modelle müssen daher konsequent weiterentwickelt werden, wozu in verstärktem Umfang auch verbesserte lokale Messtechniken benötigt werden.

Darüber hinaus wird auch die im Reaktor implementierte Messtechnik zukünftig eine entscheidende Rolle bei der Weiterentwicklung von Prozessen spielen. Der Reaktor wird dank einer deutlich verbesserten Mess- und Regelungstechnik auf schwankende Ausgangsstoffqualitäten und apparative Alterungsprozesse unmittelbar reagieren können und die Produktqualität aufrechterhalten. Zukünftige Reaktoren sind auf der makroskopischen wie auch auf der mikroskopischen Ebene hinsichtlich Konvektion, Diffusion, Reaktion sowie der simultan ablaufenden Wärmetransportprozesse optimiert. Sie erzielen dank sehr guter Kontrolle der Reaktionsbedingungen maximale Selektivitäten zu den Zielprodukten und müssen in einigen Fällen gleichzeitig mehrere verfahrenstechnische Grundoperationen, wie Mischen, Wärme- und Stoffübertragung, Reaktion und Separation in einem Prozessschritt ermöglichen. Apparate mit geordnetem zellularem Aufbau aller Ebenen können ein Beispiel für zukünftige Konzepte sein. Dies betrifft den Apparat selbst, den Reaktionsraum sowie auch die Struktur von Oberflächen vergrößernden und/oder katalytisch aktiven Materialien. Damit kann hochgradig flexibel auf die Anforderungen des Reaktionssystems hinsichtlich Strömungsführung, Verweilzeitverteilung und Temperaturführung je nach Art der chemischen Synthese reagiert werden. Die Produktionsmenge kann mit solchen Reaktorsystemen flexibel an den Produktlebenszyklus angepasst werden, sodass außerdem echte Mehrproduktfähigkeit erreicht wird. Neue Reaktoren sollen zyklisch oder ganzjährig im kontinuierlichen Betriebsmodus arbeiten, um die Produktivität zu erhöhen und eine gleichbleibende Produktqualität zu garantieren. Ein modularer Aufbau des Reaktors und angrenzender Komponenten kann eine kostengünstige Produktion dezentral am Ort des Bedarfs ermöglichen. Um solche hoch integrierten Reaktorkonzepte realisieren zu können, ist die Reaktionstechnik in vielen Fällen auf Fortschritte bei Materialien und Ferti-

gungsmethoden angewiesen. Dies gilt für Katalysatoren, Adsorbentien, Membranen, etc., aber auch für die Reaktorwerkstoffe selbst, für Verbindungstechniken und Beschichtungsverfahren.

Neben den etablierten Einsatzgebieten in der chemischen Industrie wird die Reaktionstechnik nicht nur zur Herstellung von Produkten für die Nahrungsmittelindustrie und den landwirtschaftlichen Sektor an Bedeutung gewinnen, sondern ihre Methoden werden verstärkt auch in anderen Bereichen Einzug halten. Durch eine fortschreitende Vernetzung verschiedener naturwissenschaftlicher Teilbereiche untereinander haben interdisziplinäre Ansätze schon heute große Bedeutung erlangt. In Zukunft wird diese Vernetzung ein starker Antrieb für neue Prozessinnovationen sein. Die an chemischen Prozessen entwickelten Methoden und Lösungsansätze der Reaktionstechnik stellen auch für die Etablierung neuer Prozesse in angrenzenden Bereichen wie etwa der Elektrochemie oder der Bioverfahrenstechnik Kernkompetenzen dar. Als Beispiele für besonders aktuelle Systeme, die sich mit reaktionstechnischen Methoden beschreiben lassen, seien hier die komplexen, instationären Transport- und Reaktionsschritte beim Transport von Lithium während des Ladens und Entladens einer Lithiumionenbatterie und bei Biotransformationen mit Enzymen oder Mikroorganismen-Zellen als Katalysatoren genannt.

Um reaktionstechnische Grundlagen und Methoden in neue Bereiche übertragen und dort anwenden zu können, ist es erforderlich, über die Grenzen der Fachrichtungen hinaus gemeinsam und interdisziplinär zu forschen. Hierzu muss der mit angrenzenden Fachgebieten wie z.B. der thermischen Trenntechnik traditionell sehr gut gepflegte Dialog in gleicher Qualität auf weitere Bereiche der Ingenieur- und Naturwissenschaften ausgedehnt werden. Neben der Intensivierung des Exports von reaktionstechnischem Wissen in solche Disziplinen ist es dabei gleichermaßen nötig, durch interdisziplinäre Forschung gemeinsam neue Methoden im experimentellen Bereich sowie in der Auswertung, Modellierung und Optimierung zu entwickeln. Als Themenfelder mit besonders interessanten Schnittstellen zur Reaktionstechnik erscheinen gegenwärtig:

- » Prozesse der Bioverfahrenstechnik, der Lebensmittelverfahrenstechnik und der Agrarwirtschaft
- » Elektrochemische Prozesse von der Brennstoffzelle bis zur Energiespeicherung in Kondensatoren
- » Solarkraftwerke zur Wärme- und Stromerzeugung
- » Prozesse zur effizienten dezentralen Wärme- und Stromerzeugung
- » Nutzung von Solarenergie zur Kraftstoffsynthese und zur Bereitstellung von Chemierohstoffen
- » Synthese und Verwendung alternativer chemischer Energiespeicher
- » Reaktionstechnik zur Erzeugung neuer Werkstoffe, z.B. für den Leichtbau
- » Meerwasserentsalzung und Abwasserreinigung
- » Prozesse zum effizienten Rohstoff-Recycling

# 8 Liste der Autoren

<b>Prof. Dr. David W. Agar</b>	TU Dortmund
<b>Dr.-Ing. Tobias Bauer</b>	TU Dresden
<b>Prof. Dr. Martin Bertau</b>	TU Bergakademie Freiberg
<b>Prof. Dr. Markus Busch</b>	TU Darmstadt
<b>Prof. Dr. Peter Claus</b>	TU Darmstadt
<b>Dr. Dana Demtröder</b>	DECHEMA e.V., Frankfurt
<b>Prof. Dr. Roland Dittmeyer</b>	KIT – Karlsruher Institut für Technologie
<b>Prof. Dr.-Ing. Bastian Etzold</b>	Universität Erlangen-Nürnberg
<b>Prof. Dr. Georg Fieg</b>	TU Hamburg-Harburg
<b>Dr.-Ing. Hannsjörg Freund</b>	MPI für Dynamik komplexer technischer Systeme, Magdeburg
<b>Dr.-Ing. Robert Güttel</b>	MPI für Kohlenforschung, Mülheim
<b>Dipl.-Ing. Thomas Herrmann</b>	TU Darmstadt
<b>Prof. Dr.-Ing. Kai-Olaf Hinrichsen</b>	TU München
<b>Prof. Dr. Johannes Khinast</b>	TU Graz
<b>Prof. Dr.-Ing. Elias Klemm</b>	Universität Stuttgart
<b>Dr. Norbert Kockmann</b>	Lonza AG, Visp/CH
<b>Dr. Dieter Lilge</b>	Lyondell Basell Industries, Frankfurt
<b>Dr. Michael Nilles</b>	BASF SE, Ludwigshafen
<b>Prof. Dr. Wilhelm F. Maier</b>	Universität des Saarlandes, Saarbrücken
<b>Prof. Dr. Martin Muhler</b>	Ruhr-Universität Bochum
<b>Dr. Stefan Olejnik</b>	Uhde GmbH, Dortmund
<b>Dr. Michael Paul</b>	hte Aktiengesellschaft, Heidelberg
<b>Dipl.-Ing. Bernhard Pfeuffer</b>	TU Clausthal
<b>Dipl.-Ing. Stefan Radl</b>	TU Graz
<b>Dr.-Ing. Jörg Sauer</b>	Evonik Degussa GmbH, Marl
<b>Prof. Dr.-Ing. Andreas Seidel-Morgenstern</b>	Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg
<b>Prof. Dr. Michael Schlüter</b>	TU Hamburg-Harburg
<b>Dr.-Ing. Markus Schubert</b>	Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V.
<b>Prof. Dr.-Ing. Thomas Turek</b>	TU Clausthal
<b>Prof. Dr.-Ing. Herbert Vogel</b>	TU Darmstadt
<b>PD Dr. Horst-Werner Zanthoff</b>	Evonik Degussa GmbH, Marl



DECHEMA  
Gesellschaft für Chemische Technik  
und Biotechnologie e.V.  
Theodor-Heuss Allee 25  
60486 Frankfurt am Main  
Telefon: 069 7564-295  
Telefax: 069 7564-304  
E-Mail: [info@dechema.de](mailto:info@dechema.de)



[www.processnet.org](http://www.processnet.org)