



Positionspapier

Kohlenveredlung

Mai 2009

Erarbeitet durch den gemeinsamen Initiativkreis
„Kohlenveredlung“
von DGMK e.V. und DECHEMA e.V.

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis.....	3
Abbildungsverzeichnis.....	4
Tabellenverzeichnis.....	4
1 Einführung	5
2 Primärprozesse der Kohlenveredlung	8
2.1 Direkte Kohleverflüssigung (Kohlehydrierung)	8
2.1.1 Status Quo	8
2.1.2 Potentiale und Ausblick	8
2.1.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf.....	9
2.2 Kohlevergasung.....	9
2.2.1 Status Quo	9
2.2.2 Potentiale und Ausblick	10
2.2.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf.....	11
2.3 Kohleentgasung.....	12
2.3.1 Status Quo	12
2.3.2 Potentiale und Ausblick	12
2.3.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf.....	13
2.4 Sonstige Pyrolyseverfahren.....	13
2.4.1 Status Quo	13
2.4.2 Potentiale und Ausblick	13
2.4.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf.....	14
3 Sekundärprozesse der Kohlenveredlung	14
3.1 Aufarbeitung von Steinkohlenteer.....	14
3.1.1 Status Quo	14
3.1.2 Potentiale und Ausblick	14
3.1.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf.....	14
3.2 Methanol-Synthese.....	14
3.2.1 Status Quo	14
3.2.2 Potentiale und Ausblick	15
3.2.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf.....	15
3.3 Fischer-Tropsch-Synthese.....	15
3.3.1 Status Quo	15
3.3.2 Potentiale und Ausblick	15
3.3.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf.....	16
3.4 Hydroformylierung (Oxo-Synthese)	16
3.4.1 Status Quo	16
3.4.2 Potentiale und Ausblick	16
3.4.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf.....	16
4 Weitere Verfahren	16
4.1 Extraktion.....	16
4.1.1 Status Quo	16
4.1.2 Potentiale und Ausblick	17
4.1.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf.....	17
4.2 Herstellung von Adsorbentien.....	17
4.2.1 Status Quo	17
4.2.2 Potentiale und Ausblick	17
4.2.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf.....	17
5 Personelle, strukturelle und wissenschaftlich-technische Ressourcen	17
5.1.1 Status Quo	17
5.1.2 Potentiale und Ausblick	18
5.1.3 Entwicklungsbedarf.....	18
6 Zusammenfassung	18
7 Danksagung	22

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Schematische Darstellung der auf Kohle aufbauenden Prozessketten, die zu chemischen Grundstoffen führen..	8
--	---

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Übersicht über den Status fossiler Rohstoffe in Deutschland im Jahre 2007.....	5
Tabelle 2: Übersicht über die in diesem Dokument behandelten technischen Verfahren.....	20

1 Einführung

Im Gegensatz zu den eher unbedeutenden Vorkommen an Erdöl und Erdgas verfügt Deutschland über beträchtliche Stein- und Braunkohlevorkommen, die zur Zeit hauptsächlich für die Verstromung sowie in der Eisen- und Stahlherstellung verwendet werden. Die Steinkohleförderung ist unter den gegenwärtigen Bedingungen in Deutschland von Subventionen abhängig. Demgegenüber ist die Braunkohleförderung auch international konkurrenzfähig. Sowohl im Bergbau, als auch in der Stahl- und Eisenherstellung nimmt Deutschland, dank der hoch entwickelten modernen Technologien und seiner hoch qualifizierten Arbeitskräfte, eine weltweite Spitzenstellung ein. Tabelle 1 fasst den gegenwärtigen Stand der Nutzung und der Potentiale für die fossilen Rohstoffe in Deutschland mit den Daten des Jahres 2007 zusammen.

Tabelle 1: Übersicht über den Status fossiler Rohstoffe in Deutschland im Jahre 2007¹.

Rohstoff / Einheit	Verbrauch	Produktion	Import	Export	Reserven ²	Ressourcen ²
Steinkohle ³ / Mto	71,3	24,2	47,5	0,3	118	82.947
Braunkohle ³ / Mto	180,0	180,4	-	-	40.818	36.760
Erdöl / Mto	101,8	3,4	106,7	-	37	20
Erdgas ⁴ / Gm ³	96,3	18,0	88,1	16,4	218	200

In Deutschland werden zur Zeit (2007) 24,2 Mto Steinkohle und 180,4 Mto Braunkohle jährlich gefördert⁵. Zusätzlich importiert Deutschland jährlich rund 47,5 Mto Steinkohle und Steinkohlenkoks, hauptsächlich aus Polen, Südafrika und aus der Gemeinschaft unabhängiger Staaten (GUS)⁶. Im Falle der Steinkohle fließen rund 18 Mto (26,2%) in die Koksherstellung für die Eisen- und Stahlindustrie⁷, während der Rest in der Strom- und Dampferzeugung eingesetzt wird, wie auch praktisch die gesamte Braunkohle. Die Kohlegewinnung und deren Weiterverarbeitung beschäftigt in Deutschland rund 58000 Arbeitskräfte (2006)⁵.

Die deutsche chemische Industrie setzt jährlich rund 20 Mto kohlenstoffbasierte Rohstoffe in Produkte um. Von den verschiedenen Rohstoffquellen sind bisher nur im Falle des Erdöls die Prozessketten weit genug entwickelt, um sämtliche Grundchemikalien in ausreichender Menge zur Verfügung zu stellen. Es überrascht daher nicht, dass Erdöl die bedeutendste Rohstoffquelle der chemischen Prozessketten, mit einem Anteil von rund 76%, darstellt. Daneben kommen Basischemikalien aus Erdgas und nachwachsenden Rohstoffen mit je rund 11% zum Einsatz. Demgegenüber spielen kohlebasierte Grundstoffe mit geschätzten

¹ Reserven, Ressourcen und Verfügbarkeit von Energierohstoffen 2007, BGR

² Reserven sind definiert als technisch und wirtschaftlich gewinnbare Vorkommen. Ressourcen umfassen nachgewiesene Vorkommen, die zum gegenwärtigen Zeitpunkt nicht wirtschaftlich abbaubar sind sowie Vorkommen, die aufgrund geologischer Indikatoren erwartet werden. Im Falle von Erdgas und Erdöl werden die als gewinnbar eingeschätzten Mengen, im Falle der Kohle die gesamte Menge angegeben.

³ In dem Bericht wird zwischen Kohle mit hohem Brennwert: Steinkohle und Hartbraunkohle sowie Kohle mit niedrigem Brennwert: Weichbraunkohle unterschieden. Der Übersichtlichkeit halber sind diese in der Tabelle als Steinkohle und Braunkohle ausgewiesen.

⁴ Die Diskrepanz zwischen Import und Produktion im Vergleich zu Export und Verbrauch beruht auf unterschiedlicher Berechnungsgrundlage der Erdgasmenge als Rohgas oder genormtes Heizgas. Eine geringe Menge wurde auch in Untertagespeicher eingespeist.

⁵ Statistik der Kohlenwirtschaft: Zur Lage des Kohlenbergbaus in der Bundesrepublik Deutschland – Jahr 2007-

⁶ Jahrbuch der europäischen Energie- und Rohstoffwirtschaft 2006

⁷ Der Bergbau in der Bundesrepublik Deutschland, 2007, BMWI

2% am Gesamtanteil nur noch eine stark untergeordnete Rolle⁸, wenn auch spezielle Grundchemikalien praktisch nur aus Kohle zur Verfügung gestellt werden.

Weltweit sind allerdings Ammoniak und Methanol mengenmäßig die wichtigsten kohlebasierten Chemieprodukte. Die Weltproduktion von Ammoniak beläuft sich auf etwa 150 Mto, wovon 15% von Kohle ausgehend hergestellt werden. Bei Methanol mit einer Weltjahresproduktion von 40 Mto ist der kohlebasierte Anteil annähernd gleich groß.

Die stoffliche Nutzung der oben genannten Rohstoffquellen stellt jedoch in allen Fällen nur einen geringen Teil (wenige Prozent) der Gesamtnutzung des entsprechenden Rohstoffes dar. Die überwiegende Nutzung besteht hauptsächlich in deren energetischer Verwendung für Erdöl, Kohle und Gas sowie der Eisen- und Stahlproduktion für Kohle, und der Nahrungsmittelproduktion für nachwachsende Rohstoffe. Daher ist die relative Bedeutung der Rohstoffquellen, neben kurzfristigen Schwankungen, auch eher längerfristigen Trends unterworfen, in denen sich die Verfügbarkeit und der Stand der Prozesstechnologie für den jeweiligen Rohstoff widerspiegeln.

Andererseits nimmt der Chemiestandort Deutschland einen weltweiten Spitzenplatz ein, der mit 440661 (2007)⁹, zu einem großen Teil hoch qualifizierten, Arbeitsplätzen einen wesentlichen Anteil des gesellschaftlichen Wohlstands generiert.

Die gegenwärtige Diskussion über das Erreichen des Peak-Oil Punktes (das Erreichen der maximalen Ölfördermenge mit konventionellen Methoden und ein anschließender Rückgang derselben), macht deutlich, dass sich die Rahmenbedingungen für Industrieprodukte aus erdölbasierten Rohstoffen, aufgrund des damit einhergehenden Anstiegs des Erdölpreises, grundlegend verändern werden. Neben dem zu erwartenden langfristigen Aufwärtstrend des Erdölpreises, ist dieser auch durch andere Ereignisse und Spekulationen teilweise heftigen Schwankungen unterworfen.

Aus Sicht der Rohstoffsicherung ist daher eine Verbreiterung der verwendeten Rohstoffbasis eine wesentliche Grundlage für die Wettbewerbsfähigkeit des Chemiestandorts Deutschland.

Kohle ist hierbei eine interessante Option, da sie von allen fossilen Rohstoffen die längste statische Reichweite aufweist. Kohle¹⁰ war von den Anfängen der chemischen Industrie bis zur Mitte des 20. Jahrhunderts Hauptrohstoffquelle und wurde dann rasch durch preisgünstigere Ausgangsstoffe, insbesondere Erdöl und Erdgas, abgelöst. Kohle ist aber noch immer ein bedeutender Rohstoff für die chemische Industrie weltweit, da zum Beispiel viele, insbesondere mehrkernige aromatische Grundverbindungen praktisch vollständig aus Steinkohlenteer gewonnen werden.

Kohle ist keine wohl definierte Verbindung, sondern ein organisches Sedimentgestein aus einem Gemisch organischer Moleküle unterschiedlicher Größe und Struktur, das auch noch mineralische Bestandteile enthält. Für eine Verwendung von Kohle als Rohstoff sind Art und Qualität der Kohle entscheidend. Die Kohleart wird über den Inkohlungsgrad, quantifiziert durch den zunehmenden Kohlenstoffgehalt oder abnehmenden Sauerstoffgehalt definiert. Die Kohlequalität wird u. a. über den Mineralstoff- und Wassergehalt definiert. Die Reaktivität der Kohle wird wesentlich durch den Inkohlungsgrad der Kohle beeinflusst.

Durch ihren biogenen Ursprung ist die Zusammensetzung von Kohlen unterschiedlicher geographischer Herkunft sehr unterschiedlich. Die exakte Zusammensetzung ist ein

⁸ J.-D. Arndt, S. Freyer, R. Geier, O. Machhammer, J. Schwartz, M. Volland, R. Dierks: Rohstoffwandel in der chemischen Industrie; CIT 79 (9) (2007) 524; DOI:10.1002/cite.200700025

⁹ Chemiewirtschaft in Zahlen 2008, VCI

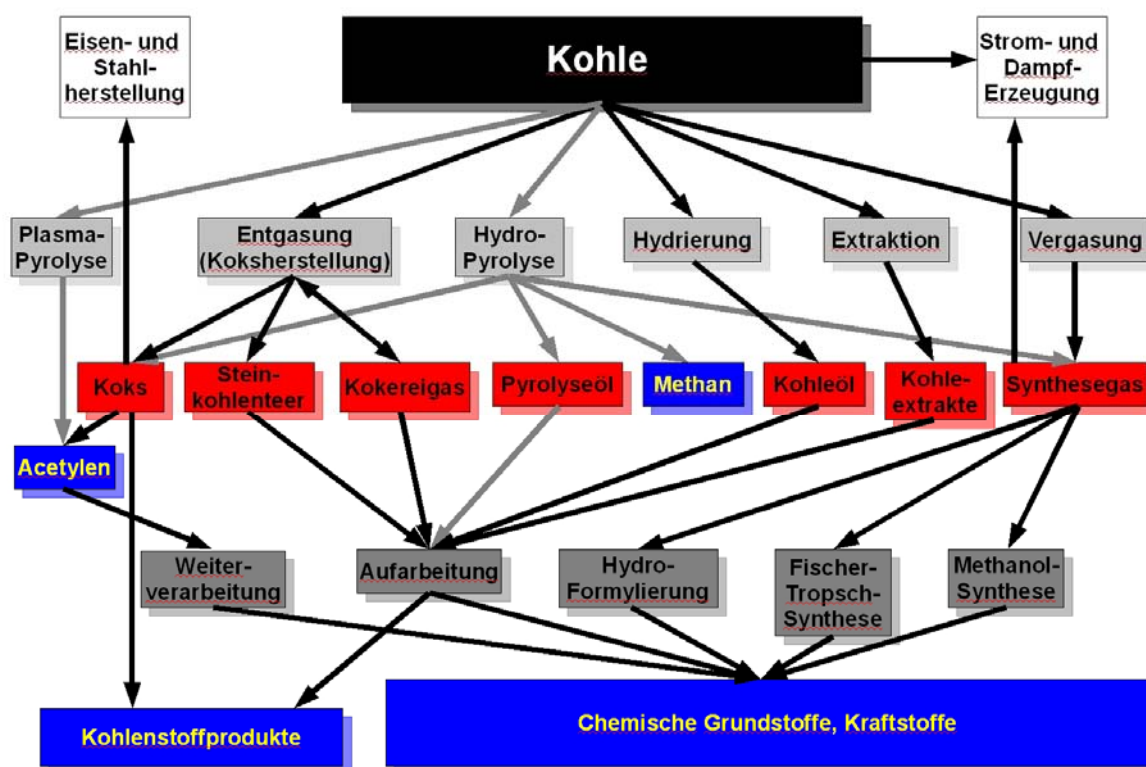
¹⁰ Der Begriff Kohle wird in diesem Dokument als Sammelbegriff verwendet, der sämtliche Erscheinungsformen beinhaltet. Verschiedene Kohlen weisen, je nach ihrer geologischen Geschichte und Ursprung, eine stark variierende Zusammensetzung auf. Für eine eingehendere Diskussion sei auf die Fachliteratur verwiesen.

wesentlicher Faktor für die Auswahl eines, für die gegebene Kohle optimierten, Kohlenveredlungsverfahren.

Neben Kohle können einige der in diesem Papier diskutierten Verfahren auch auf eine Verwertung von Biomasse und kohlenstoffhaltigen Reststoffen als Grundstoffe ausgelegt werden.

Historisch gesehen, sind für praktisch alle Verfahren zur Kohlenveredlung¹¹ wesentliche technische Entwicklungen in Deutschland geleistet worden. Aufgrund der sich nach dem 2. Weltkrieg entwickelnden Dominanz von günstigem Erdöl sind aber sämtliche Entwicklungsarbeiten auf industriellem Niveau mit Ausnahme einiger Aktivitäten (Kohlevergasung) im Rheinischen Braunkohlenrevier vor rund 30 Jahren eingestellt und die Forschungsaktivitäten im akademischen Bereich stark zurückgefahren worden. Deutschland hat damit seine technologische Spitzenposition, vor allen Dingen in der Anwendung, verloren: Das noch vorhandene Fachwissen ist ohne industrielle Perspektive und weitgehend isoliert.

Das vorliegende Papier stellt kurz die wesentlichen Prozesse der Kohlenveredlung dar. Für eine weiterführende Darstellung sei hierzu auf die technisch-wissenschaftliche Fachliteratur verwiesen, insbesondere auf die aktuelle Dokumentation der DGMK¹² über den technischen Stand der Kohlenveredlungsverfahren in Deutschland bis zum Jahre 2000. In Abbildung 1 sind die in diesem Papier diskutierten Prozesse und ihre jeweiligen Produkte, ausgehend von dem Rohstoff Kohle, schematisch dargestellt:



¹¹ Unter Kohlenveredlung wird die Anwendung von Prozessen der Ent- und Vergasung, der Verflüssigung sowie auch der Verbrennung von Kohle zu deren Nutzung als Energie- und Rohstoffträger verstanden.

¹² DGMK-Dokumentation: „Die Veredlung und Umwandlung von Kohle - Technologien und Projekte 1970 bis 2000 in Deutschland“, Hrsg: Jörg Schmalfeld, ISBN: 978-3-936418-88-0, Hamburg 2008.

Abbildung 1: Schematische Darstellung der auf Kohle aufbauenden Prozessketten, die zu chemischen Grundstoffen führen. Prozessketten, die zur Zeit nicht im großtechnischen Maßstab betrieben werden, sind mit grauen Pfeilen gekennzeichnet. Primärverfahren sind hellgrau und Sekundärverfahren dunkelgrau hinterlegt. Zwischenprodukte sind rot, Endprodukte blau hinterlegt.

Das Papier analysiert den gegenwärtigen technischen Stand der Haupt- und Folgeverfahren, und es wird der sich ergebende F&E-Bedarf abgeleitet. Es ist fokussiert auf die Potentiale, Kohle als Rohstoff für die Herstellung von Chemikalien und Kraftstoffen zu nutzen. Das darüber hinausgehende, wesentlich größere Potential der Kohle durch Kohlenveredlung zur Erzeugung von Strom und Wärme sollte nicht unerwähnt bleiben, wenn es auch in der vorliegenden Betrachtung unberücksichtigt bleibt.

Über die technischen Aspekte hinaus sind auch regulatorische und lizenzrechtliche Beschränkungen sowie die Verfügbarkeit von kompetentem Fachpersonal zu beachten. In diesem Zusammenhang ist zu erwähnen, dass Kohlenveredlung zur energetischen oder stofflichen Nutzung nicht ohne eine gleichzeitige CO₂-Bildung zu erreichen ist. Strategien zur Vermeidung von CO₂ durch höchste thermische Wirkungsgrade und zur Abtrennung von CO₂ werden daher einen wichtigen Bestandteil zukünftiger Anstrengungen zur Anwendung von Kohlenveredlungsverfahren darstellen.

2 Primärprozesse der Kohlenveredlung

2.1 Direkte Kohleverflüssigung (Kohlehydrierung)

2.1.1 Status Quo:

Die Kohlehydrierung geht auf grundlegende Arbeiten von Friedrich Bergius vor rund 100 Jahren zurück und wurde von Matthias Pier zur großtechnischen Reife gebracht. In den Jahren 1940 bis 1944 wurden in 12 deutschen Kohlehydrierwerken etwa 4 Mto Kohlebenzin pro Jahr produziert.

Zur Kohlehydrierung wird gemahlene Kohle in einem kohlestämmigen Öl suspendiert und in Gegenwart eines Feststoffkatalysators auf Basis von Übergangsmetallen mit Wasserstoff unter hohem Druck bei Temperaturen um 450 °C in ein flüssiges Kohlenwasserstoffgemisch umgewandelt. Für die erste Verflüssigungsstufe der Kohlepartikel in flüssiger Phase („Sumpfpphase“) werden preiswerte suspendierte Einwegkatalysatoren eingesetzt, da eine Katalysatorrückgewinnung aus dem Hydrierrückstand zu aufwendig ist. Eine Alternative stellt die indirekte Hydrierung z. B. mit Tetralin dar. Nach Abtrennung des Rückstandes mittels Destillation muss das erhaltene Kohleöl weiter behandelt werden, da es hohe Mengen an Aromaten sowie S- und N-Verbindungen enthält. Dies geschieht mittels Hydrotreating.

Gegenwärtig sind drei Verfahren bis zur großtechnischen Reife entwickelt worden: Die Deutsche Technologie / Integrierte Gesamtöl Raffination (DT/IGOR), das New Energy and Industrial Technology Development Organisation (NEDOL)-Verfahren aus Japan und von Hydrocarbon Technology Inc. das Direct Coal Liquefaction (HTI/DCL)-Verfahren aus den USA. Eine großtechnische Anlage auf Basis des HTI/DCL-Verfahren wird gegenwärtig in China in Betrieb genommen und vorrausichtlich 1-1,5 Mto Kohle pro Jahr umsetzen.

2.1.2 Potentiale und Ausblick:

Im Gegensatz zur Kohlevergasung bestehen bei der direkten Kohleverflüssigung sehr viel höhere Anforderungen bezüglich Kohleart und Kohlequalität: Nur niedrig-inkohlte Kohlen wie Braunkohlen und hoch-flüchtige Steinkohlen (Flamm-, Gasflamm- und Gaskohle) können direkt mit Wasserstoff verflüssigt werden, während Fett-, Eß- und Magerkohle sowie

Anthrazit für diesen Hydrocrack-Prozess zu wenig reaktiv sind. Der Mineralstoffgehalt der Einsatzkohle sollte, mit Ausnahme von katalytisch wirksamem Pyrit, möglichst niedrig sein, um den Verschleiß an den Hochdruckpumpen zur Förderung des Kohleslurry gering zu halten.

Die Aufarbeitung des Kohleöls zu Kraftstoffen heutiger Normen erfordert erheblichen Aufwand an nachfolgender Raffinerietechnik (katalytisches Hydrotreating), was auf die relativ hohen Anteile von polyzyklischen Aromaten und Verbindungen mit den Heteroatomen Sauerstoff, Stickstoff und Schwefel zurückzuführen ist. Insgesamt müssen daher bedeutende Mengen an Wasserstoff bei der Kohlehydrierung verfügbar gemacht werden. Die Aufwendungen für den Wasserstoff lassen sich ökonomischer gestalten, wenn die direkte Kohleverflüssigung mit einer großen Kokerei kombiniert und der Wasserstoff im Kokereigas genutzt wird. Zur Weiterverarbeitung des Kohleöls in Kraftstoffe bietet sich der Verbund mit einer Erdölraffinerie an.

Im Vergleich zur indirekten Kohleverflüssigung über Kohlevergasung und nachfolgende Fischer-Tropsch-Synthese bzw. Methanol-Route hat die direkte Kohleverflüssigung thermodynamische Vorteile, d.h. keine Temperatursenken, was sich letztlich im günstigeren Wirkungsgrad widerspiegelt. Dies gilt insbesondere für die Verfahrensweise mit integrierter Gesamtöl-Raffination des DT/IGOR-Prozesses, da die Kohlehydrierung, die Abtrennung des Rückstandes im Heißabscheider sowie die integrierte Raffination des Kohlerohöls auf ähnlichem Temperaturniveau durchgeführt werden.

2.1.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf:

Ein Schlüssel in der Verbesserung des Verfahrens wird in der Entwicklung neuartiger Katalysatorsysteme zur Erhöhung der Selektivität gesehen. Die Problemstellung der Kohlehydrierung, ein extrem inhomogenes Gemisch möglichst selektiv katalytisch zu hydrieren, ist von einer wissenschaftlich-technischen Komplexität, der bisher in Deutschland nur ungenügende Aufmerksamkeit seitens der katalytischen Community entgegen gebracht wurde.

Ansatzpunkte sind:

- Neuartige Katalysatorsysteme mit signifikant höherer Selektivität, die sich aus der Sumpfhase abtrennen lassen (z. B. über ungewöhnliche Dichte oder magnetisch)
- Integrierte Verfahrenskonzepte
- Optimierung von Katalysatoren für die Weiterverarbeitung des Kohleöls zu marktfähigen Kraftstoffen.

2.2 Kohlevergasung:

2.2.1 Status Quo:

Die Kohlevergasung bildet u. a. den ersten Schritt in der indirekten Kohleverflüssigung. Dabei wird die Kohle mit Sauerstoff und Wasserdampf zu einem „Synthesegas“¹³ umgesetzt. Prinzipiell kann jede Kohleart und jedes kohlenstoffhaltige Material eingesetzt werden. Je nach Verfahren und Betriebsbedingungen kann die Zusammensetzung des Synthesegases unabhängig von der Detailzusammensetzung des Ausgangsmaterials in Grenzen variiert werden. Das Synthesegas eignet sich über die Folgeprozesse der Gasreinigung und Konditionierung zur Herstellung der gewünschten Endprodukte (Methanolherstellung, Methanisierung zu SNG (Substitute Natural Gas), Fischer-Tropsch-Synthese zur Herstellung

¹³ Der Begriff Synthesegas wird im folgenden für das Gasgemisch verwendet, das im Vergaser entsteht. Dieses Gemisch ist nicht notwendigerweise identisch mit dem technischen „Syngas“-Begriff.

von Alkanen bzw. von kurzkettigen Alkenen oder Oxo-Synthese mit Alkenen). Siehe hierzu die Kapitel 3.2, 3.3, und 3.4.

Der großtechnische Einsatz der Vergasungstechnologien wird gut beherrscht. Weltweit werden gegenwärtig rund 45 Mto Kohle pro Jahr durch Vergasung umgesetzt. Zur Zeit sind technische Vergasungsverfahren auf Basis von drei unterschiedlichen Technologien im Einsatz:

Im **Flugstromvergaser** können flüssige, gasförmige und staubförmige Ausgangsstoffe eingesetzt werden. Es ist das technische Verfahren mit der höchsten Betriebstemperatur, und es arbeitet bei Drücken bis zu 40 bar. Stein- und Braunkohle können darin staubförmig vergast werden, Biomasse in Form eines Kokes oder als Gemisch aus flüssigen und festen Pyrolyseprodukten als sogenannter Bioslurry. Die Leistung solcher Vergaser liegt zwischen 500-1000 MW_{th}.

Die **Wirbelschichtvergasung** eignet sich besonders für reaktive Braunkohlen, kann aber auch für Steinkohlen, Koks sowie kohlenstoffhaltige Reststoffe und Biomasse, nach Trocknung und Zerkleinerung, eingesetzt werden. Dabei entsteht generell ein geringer Kohlenwasserstoffanteil im Produktstrom. Die Wirbelschichtvergasung erreicht thermische Leistungen bis zu 750 MW_{th}, kann aber auch in kleinen dezentralen Einheiten betrieben werden. Ein wesentlicher Nachteil ist jedoch, dass die eingesetzte Kohle nur zu rund 95% umgesetzt wird und somit die festen Rückstände einer Nachbehandlung bedürfen.

Im **Festbettverfahren** können nur stückige Kohlen und Brennstoffe vergast werden. Diese Anlagen zeichnen sich durch eine ausgezeichnete Verfügbarkeit aus. Verfahrensbedingt haben diese Anlagen eine maximale thermische Leistung von rund 200 MW_{th} und sind nicht weiter skalierbar. Für größere Kapazitäten muss eine entsprechend größere Anzahl Vergaser eingesetzt werden. Nachteilig ist der relativ hohe Anteil an unerwünschten Nebenprodukten, wie Teer und Phenole, die eine aufwändigere Aufarbeitung des Rohgases erfordern.

Kohlevergasung kann auch unterirdisch direkt in den Kohleflözen (In situ – oder Underground Coal Gasification, UCG) vorgenommen werden. Dabei werden durch ein Bohrloch Sauerstoff und Wasser in die kohlehaltige Sedimentschicht gepresst. Es erfolgt die Umsetzung zu einem Synthesegas, das durch ein zweites Bohrloch entweicht und zur weiteren Verwendung aufgefangen wird.

2.2.2 Potentiale und Ausblick:

Die Kohlevergasung und somit auch die indirekte Kohleverflüssigung bietet eine hohe Flexibilität bezüglich des Einsatzstoffes und auch bezüglich der Produkte. Man wird daher im Einzelfall entscheiden müssen, welcher Weg der Kohleverflüssigung unter vorgegebenen Randbedingungen günstiger ist.

Der Ausbau der Vergasungskapazitäten hängt wesentlich von den politischen Rahmenbedingungen zur CO₂-Emissionsvermeidung ab. Sollte es hierdurch zu einer weitgehenden Implementierung von CO₂-Abtrenntechniken kommen, so würden z. B. IGCC-(Integrated Gasification Combined Cycle) Kraftwerke stark an Potential gewinnen, die einen Vergasungsschritt beinhalten und nach einer entsprechenden Rohgas-/Synthesegasbehandlung CO₂ abtrennen und nur den verbleibenden Wasserstoff verbrennen.

In diesem Fall muss erst die möglichst vollständige Umwandlung des im Synthesegas enthaltenen CO zu CO₂ durchgeführt werden. Dies erfolgt mittels der so genannten Shift-Reaktion, der Umwandlung von CO mit H₂O unter Erzeugung von CO₂ und H₂. Im Falle eines Sour-Shift erfolgt die Shift-Reaktion direkt mit dem Synthesegas. Die maximale Temperatur wird durch den Katalysator begrenzt. Im Falle eines Sweet-Shifts erfolgt eine Gasreinigung (Schwefelabtrennung) vor der Durchführung der eigentlichen Shift-Reaktion.

IGCC-Kraftwerke eignen sich prinzipiell auch zur Polygeneration, d.h. der Verstromung und parallelen Herstellung von Kraft- und Chemierohstoffen, da das Synthesegas für beide Routen zur Verfügung steht. Die damit verbundene Flexibilität stellt einen wesentlichen Vorteil der Nutzung von Kohle über die Vergasungstechnologie dar. Abhängig von der weiteren Entwicklung auf dem Mineralöl-Markt kann die Kohlevergasung in Zukunft auch eine wesentliche Rolle bei der Bereitstellung von Kraft- und Chemierohstoffen spielen. Unter Bedingungen, unter denen eine Abtrennung von CO₂ nicht gefordert ist, ist die IGCC-Technologie jedoch gegenüber den etablierten Dampfkesselprozessen zur Stromerzeugung derzeit nicht konkurrenzfähig.

Ein Ausbau von Vergasungskapazitäten mit dem alleinigen Ziel der Verwendung von Kohle als Chemierohstoff über Synthesegas als langfristige Perspektive bedingt eine Implementierung von CO₂-Abtrenntechniken, um das im Rohgas gebildete CO₂ vor der Verwendung des Synthesegas zu Syntheseprodukten abzutrennen. Je nach Abtrennverfahren steht das CO₂ hieraus zur Ablagerung oder Weiterverarbeitung zur Verfügung¹⁴.

Synthesegas kann nach Abtrennung von CO₂ auch zur Reduktion oxidischer Schlacken und Erze in der Eisenverhüttung eingesetzt werden.

2.2.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf:

Die Kohlevergasung ist bereits weit entwickelt. Dementsprechend liegt der F&E-Bedarf primär in der großtechnischen Umsetzung der Vergasungstechnik und weniger in den Grundlagen. Die nächste Generation von Vergasungstechnologien sollte in den Bereich von bis zu 1500 MW_{th} bis 2000 MW_{th} Leistung vorstoßen.

Der technische Aufwand und Kapitaleinsatz für Vergaseranlagen sind beträchtlich. Ein wesentliches Ziel der Forschungs- und Entwicklungsbemühungen liegt daher in der Reduzierung des apparativen Aufwands. Hierzu zählen ein besseres Verständnis der im Vergaser ablaufenden Prozesse, wie z.B. der Schlackebildung und eine verbesserte Modellierung der Transportprozesse.

Ein Zugang zu höheren Druckbereichen bis zu 80 bar in der Flugstromvergasung stellt eine verfahrenstechnische Herausforderung dar. Bei Hochdruck betriebene Systeme stellen große Anforderungen an Feststoffein- und Reststoffaustrag.

Im Bereich der Wirbelschichtverfahren wird bisher nur ein Ausbrand von 95% erreicht. Ein höherer Umsatz des Kohlenstoffanteils in der Kohle führt zu einem effizienteren Verfahren und sollte daher für diese Technik als Entwicklungsziel verfolgt werden.

Der Einsatz der Vergasertechnologien mit unkonventionellen Rohstoffen, wie Biomasse und kohlenstoffhaltigen Reststoffen, aber auch niederwertigen Kohlen, birgt zur Zeit noch verfahrenstechnisches Potential. Bei einem gemischten Eintrag ist darauf zu achten, dass die Zusatzstoffe ein ähnliches Fließverhalten aufweisen. Gegebenenfalls durch thermische und mechanische Vorbehandlung. Der Betrieb einer mit solchen Einsatzstoffen betriebenen Vergasereinheit sollte eine gleichmäßige Qualität des Synthesegases gewährleisten können.

Die gegenwärtige Implementierung der Shift-Reaktion zur CO₂-Abtrennung ist ebenfalls ausbaufähig. Insbesondere müssen die Verfahrensschritte so weiterentwickelt werden, dass Temperatur- und Drucksprünge vermieden werden können, während generell bei möglichst

¹⁴ Die derzeit verfügbaren Abtrenn- und Speicher-Technologien sind in einem Diskussionspapier der DECHEMA zur Verwertung und Speicherung von CO₂ im Detail dargestellt:
http://www.dechema.de/dechema_media/diskussionco2.pdf

hoher Temperatur und hohem Druck gearbeitet wird. Viel versprechend ist hier die Entwicklung neuer Katalysatoren, die zum einen schwefelresistent sind und zum anderen bei optimalen Temperaturen eingesetzt werden können.

Generell werden Methoden in der Gasabtrennung und -reinigung von S, Cl und Partikeln bei hoher Temperatur und hohem Druck benötigt, die einen effizienteren Betrieb ermöglichen würden.

In diesem Bereich sollten auch die neueren Entwicklungen in der Membrantechnologie in das Zentrum der Überlegungen rücken. Es eröffnen sich bedeutende Anwendungsmöglichkeiten insbesondere in drei Bereichen: Abtrennung und Einsatz von O₂ aus Luft zur Vergasung im IGCC-Kraftwerk, Abscheidung von CO₂ sowie in der Abtrennung von H₂ aus Synthesegas.

Im Bereich der Kohlevergasung in kohlehaltigen Sedimentschichten gibt es Aktivitäten in Polen und England innerhalb der Europäischen Union sowie außerhalb in Usbekistan, Russland, China und Indien. Diese Technologie hat Potential für kohlehaltige Sedimente, deren bergmännischer Abbau nicht wirtschaftlich ist. Diese Aktivitäten sollten auch weiterhin beobachtet werden.

2.3 Kohleentgasung:

2.3.1 Status Quo:

Die Kohleentgasung oder Verkokung ist das älteste Kohlenveredlungsverfahren für Braun- und Steinkohle. Größere Bedeutung zur Darstellung von Chemierohstoffen hat heute noch die Verkokung von Steinkohle. Dabei entstehen bei hoher Temperatur und unter Luftausschluss aus Steinkohle flüchtige Bestandteile: das so genannte Kokereigas, das nach Abtrennung der aromatischen Bestandteile, hauptsächlich Benzol, üblicherweise zur Deckung des Energiebedarfs der Verkokung verbrannt wird, und der Steinkohlenteer, der abgetrennt und der Aufarbeitung zugeführt wird. Der verbleibende Koks, das Hauptprodukt der Kohleentgasung/Verkokung, findet als Reduktionsmittel hauptsächlich in der Stahl- und Eisenherstellung Verwendung. Koks bildete früher, über die Verfahrensrouten des Kalziumcarbids, ein wichtiges Vorprodukt zur großtechnischen Acetylenherstellung. Dieses Verfahren ist heute großtechnisch nur noch in China im Einsatz.

Zur Zeit befinden sich noch 5 Kokereien in Deutschland im Betrieb. Die Technologie ist weit entwickelt und wird gut beherrscht. Weltweit werden pro Jahr 450 Millionen Tonnen Steinkohle zu 350 Millionen Hüttenkoks verkokt.

2.3.2 Potentiale und Ausblick:

Die Zukunft der Kohleentgasung in Deutschland ist vor allem mit der Entwicklung der Eisen- und Stahlherstellung verknüpft. Zum gegenwärtigen Zeitpunkt kann davon ausgegangen werden, dass die Kohleentgasung/Verkokung von Steinkohle auch weiterhin im großen Maßstab betrieben werden wird. Damit wird auch weiterhin das interessante Nebenprodukt, der Steinkohlenteer, in entsprechenden Mengen anfallen und als Rohstoff für Chemikalien zur Verfügung stehen. Gegenwärtig ist der Umsatz von Kohle in Kokereiprozessen weltweit ungefähr zehnfach größer als in der Kohlevergasung. Eine koksfreie Eisenverhüttung wird zwar immer wieder diskutiert, jedoch ist gegenwärtig kein Zeithorizont für den Ersatz der etablierten Verfahren absehbar.

Denkbar ist auch, dass im Zuge der Konzentration der Verkokungstechnologie auf eine Zweiproduktkokerei im Verbund mit einer Kohlevergasung oder -hydrierung Synergieeffekte erzielt werden können, indem der im Kokereigas anfallende Wasserstoff vorteilhaft genutzt wird.

2.3.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf:

In der Kokereitechnologie laufen seit einigen Jahren Entwicklungen zum Bau von Großraumverkokungsreaktoren und Optimierung zur Zweiproduktkokerei (Fokus auf Gas und Kohle, kein Teer). Neben dem Ausbau der Umweltverträglichkeit stehen die weitere Optimierung der Energierückgewinnung und die Verbreiterung der Einsatzkohlenpalette im Vordergrund. Die Entwicklung und der Bau von Kokereien ist für deutsche Firmen auch ein wichtiger Exportfaktor.

2.4 Sonstige Pyrolyseverfahren:

2.4.1 Status Quo:

Die ehemalige Bergbauforschung (heute DMT) in Essen und die ehemalige DEGUSSA Hüls (heute Evonik) entwickelten als Alternative zur Kalziumcarbid-Route die Plasmapyrolyse von Kohle zur Acetylenherstellung. Dieses Verfahren ist nicht über eine Pilotanlage hinaus entwickelt worden, eignet sich aber prinzipiell zur Herstellung von Acetylen und ungesättigten Verbindungen für die Weiterverarbeitung.

Bei der Pyrolyse gepulverter Kohle unter Wasserstoffatmosphäre (Hydropyrolyse) im Temperaturbereich 500–900°C entstehen als Produkte Methan, Flüssigkeiten (Pyrolyseöl, bestehend u. a. aus Naphthalin, Benzol, Toluol und Xylole sowie Teer) und Koks, deren relative Mengen von den Bedingungen, insbesondere dem Wasserstoffdruck abhängen.

Verschiedene Konzepte für Flugstrom- und Wirbelschichtverfahren wurden entwickelt und einige davon auch in Pilotanlagen getestet. Eine bemerkenswerte Neuentwicklung stellt der japanische ECOPRO-Prozess (efficient co-production with coal flash hydropyrolysis technology) dar,¹⁵ der in einem zweistufigen Flugstromreaktor eine Kohlevergasung (1400–1700°C, 20 bar) im unteren Teil und eine milde partielle Kohle-Hydropyrolyse (700–900°C, 20 bar, Konzentration H₂ 30–50%) im oberen Teil kombiniert. Unten werden Kohle, Sauerstoff und Wasserdampf zur Vergasung injiziert und oben in den heißen Flugstrom der Vergasungsgase weitere Kohle und Wasserstoff eingeblasen, wodurch die für die Hydropyrolyse benötigte Wärme von der Kohlevergasung geliefert wird. Da der Koks aus der Hydropyrolyse wieder in die Vergasung zurückgeführt wird, entstehen als Produkte nur Gas und ein Leichtöl.

2.4.2 Potentiale und Ausblick:

Bezüglich der Plasmapyrolyse sind keine weiteren Aktivitäten bekannt oder absehbar, da die hierfür erforderlichen Bedingungen großtechnisch nur schwer einzuhalten sind.

Die Hydropyrolyse könnte sich zu einer Alternative entwickeln, unter der Bedingung, dass der Wasserstoff preiswert aus regenerativen Quellen oder im Verbund zu Verfügung steht. Dieser Aspekt wird in dem Papier „Energieversorgung der Zukunft“¹⁶ der chemischen Gesellschaften ausführlich behandelt.

¹⁵ H, Yabe et al., Development of Coal Partial Hydropyrolysis Process, *Nippon Steel Technical Report* No. 92, July 2005 (<http://www.nsc.co.jp/en/tech/report/pdf/n9203.pdf>).

¹⁶ Positionspapier: „Energieversorgung der Zukunft – der Beitrag der Chemie“ der deutschen Chemieorganisationen: DECHEMA – Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V., GDCh – Gesellschaft Deutscher Chemiker, DBG – Deutsche Bunsen-Gesellschaft für physikalische Chemie e.V., DGMK - Deutsche Wissenschaftliche Gesellschaft für Erdöl, Erdgas und Kohle e.V., VDI-GVC - Gesellschaft für Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen und VCI – Verband der Chemischen Industrie e.V.

2.4.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf:

Kombinationsprozesse von Pyrolyse und Vergasung ähnlich dem ECOPRO-Verfahren können lohnende F&E-Objekte darstellen.

3 Sekundärprozesse der Kohlenveredlung

3.1 Aufarbeitung von Steinkohlenteer

3.1.1 Status Quo:

Steinkohlenteer fällt in großen Mengen von etwa 17,5 Millionen Tonnen pro Jahr bei der Kohleentgasung/Verkokung an und war schon immer als Rohstoffquelle für die chemische Industrie von großer Bedeutung, insbesondere für die Bereitstellung aromatischer Grundverbindungen. Weiterhin ist Steinkohlenteerpech der zentrale Ausgangsstoff für die Herstellung von Kohlenstoffmaterialien, wie zum Beispiel Kohlenstoff- und Graphitelektroden. Die Aufarbeitung von Steinkohlenteerpech ist in Deutschland historisch stark verwurzelt und das wissenschaftlich-technische weltweit führende Know-how konzentriert sich zur Zeit nur noch auf die Firma Rütgers Chemicals in Castrop-Rauxel.

3.1.2 Potentiale und Ausblick:

Steinkohlenteer wird auch weiterhin in großen Mengen zur Verfügung stehen, da dieser als Koppelprodukt der Koksherstellung anfällt.

3.1.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf:

Der F&E-Bedarf wird als nicht prioritär eingeschätzt. Die Aufarbeitung wird von der oben genannten Firma sehr gut beherrscht. Bedarf besteht jedoch in der Weiterentwicklung von Methoden zur Aromatenumwandlung, was ein Aufgabenfeld der Petrochemie und Katalyse ist.

3.2 Methanol-Synthese

3.2.1 Status Quo:

Das Verfahren ermöglicht, unabhängig von der Rohstoffquelle, eine Umwandlung von Synthesegas mit Hilfe entsprechender Katalysatoren zu Methanol ($\text{CO} + 2\text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$). Das Verfahren wird im großtechnischen Maßstab eingesetzt und gut beherrscht. Die zur Zeit größten Anlagen stehen im Iran und in Trinidad und haben eine Leistung von 5000 bzw. 5500 t/Tag (Lurgi bzw. JMC) auf. Eine Anlage weisen Leistungen von 7000 t/Tag befindet sich im Iran in Planung (Casale). Neben der Synthese von Methanol kommt auch die großtechnische Umwandlung zu Dimethylether zum Einsatz (China, Schweden).

Unter Verwendung des von Mobil entwickelten Methanol-to-Gasoline Verfahrens (MTG, formal: $n\text{CH}_3\text{OH} \rightarrow (-\text{CH}_2-)_n + \text{H}_2\text{O}$ mit dem Zeolithkatalysator HZSM-5), lässt sich direkt die Umwandlung in einen Ottokraftstoff durchführen. Dieses Verfahren ist großtechnisch zur Zeit aber nicht im Einsatz. Die bisher einzige großtechnisch betriebene Anlage wurde in Neuseeland nach einer Betriebszeit von 10 Jahren Mitte der 90er Jahre aus wirtschaftlichen Gründen stillgelegt. Aktuell befinden sich jedoch neue MTG-Anlagen im Bau (China) bzw. in Planung (USA).

3.2.2 Potentiale und Ausblick:

Methanol ist eine Plattformchemikalie für chemische Produktionsketten. Weiterhin ist die Herstellung von Kraftstoffen über diese Route möglich. Der direkte Einsatz von Methanol als Kraftstoff im Automobil wird zwar immer wieder propagiert, stößt jedoch auf Ablehnung in der Automobilindustrie. Während Ottokraftstoffe über den Umweg Methanol ohne Probleme realisierbar sind, können Dieselmotorkraftstoffe über diese Route zur Zeit nicht normkonform hergestellt werden. Es ist jedoch ein entsprechendes Verfahren in der Entwicklung, eine Demonstrationsanlage wurde bereits erfolgreich betrieben.

In der Polygeneration gewonnenes Methanol kann als Zwischenspeicher für den Fall einer zeitweise geringeren Kraftwerksleistung verwendet werden, um bei erhöhtem Bedarf direkt als Brenngas in den Kraftwerksturbinen eingesetzt zu werden. Dies ist selbstverständlich mit energetischen Speicherverlusten verbunden. Die Umwandlung von Methanol in die wichtigen Olefine Ethylen und Propylen ist mit dem MTO (Methanol-to-olefins) Verfahren möglich, wird zur Zeit aber nicht großtechnisch durchgeführt. Für die gezielte Darstellung von Propylen steht das MTP Verfahren zur Verfügung. Es erlaubt die Herstellung von Propylen als Hauptprodukt (70%) und schwefelfreiem Kraftstoff als Nebenprodukt (30%) aus Methanol. Eine erste Pilotanlage ist im belgischen Feluy in Betrieb gegangen.

3.2.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf:

Der F&E-Bedarf liegt hauptsächlich in der Katalysatorentwicklung. Es wäre wünschenswert Katalysatoren zu entwickeln, die eine effiziente und selektive Darstellung oxygenerter Kohlenwasserstoffe erlauben. Für die Wirtschaftlichkeit des Verfahrens ist weiterhin die Langzeitstabilität der eingesetzten Katalysatoren wesentlich. Hier besteht noch Optimierungspotential. Eine wirtschaftliche Herstellung von Dieselmotorkraftstoffen über die Methanolroute ist mit dem gegenwärtigen Stand von Wissenschaft und Technik nicht absehbar. Für eine weitere Verwendung im Rahmen des Grundstoffspektrums der chemischen Industrie wäre die weitere Entwicklung von Folgeprozessen zur Umwandlung in kleine ungesättigte Moleküle (C_2 bis C_4) von großem Wert.

3.3 Fischer-Tropsch-Synthese

3.3.1 Status Quo:

Dieses Verfahren ermöglicht die Herstellung von sauberen, synthetischen Kraftstoffen aus Synthesegas. Im Vergleich zu erdölbasierten Kraftstoffen aus der Raffinerie ist der Prozess bei niedrigen Erdölpreisen nicht konkurrenzfähig. Deshalb erlebte dieser Prozess historisch seine Entwicklungsschübe in Ländern, die nur einen eingeschränkten Zugang zu billigen Kraftstoffen auf Erdölbasis hatten, wie in Deutschland während des 2. Weltkrieges und in Südafrika während des Apartheidregimes. Gegenwärtig sind zwei Technologien des Verfahrens, von SHELL und SASOL, verfügbar. Allerdings hat nur das SASOL-Verfahren bisher seine Eignung mit Synthesegas auf Kohlebasis großtechnisch unter Beweis gestellt. Die von SASOL installierten Anlagen in Sasolburg und Secunda erreichen eine Gesamtkapazität von 4,5 Mto pro Jahr. Die Verfahren sind auf die jeweils gewünschte Produktpalette, hauptsächlich Kraftstoffe, hin optimiert.

3.3.2 Potentiale und Ausblick:

Die derzeitige Fischer-Tropsch-Synthese wird hauptsächlich für den Bereich Kraftstoffe betrieben. Die Lizenzvergabe wird von den beiden Technologieführern allerdings restriktiv gehandhabt. Obwohl die Fischer-Tropsch-Synthese der führende Weg zur Darstellung von Kraftstoffen und Chemiegrundstoffen aus Synthesegas ist, so sind ihre derzeitigen Einsatzmöglichkeiten in Deutschland stark eingeschränkt. Neue Verfahren werden sich nur dann auf dem Markt etablieren lassen, wenn auf der Basis langfristig hoher Rohölpreise eine

gewisse Risikobereitschaft der Betreiber und auch das Kapital für entsprechend große Referenzanlagen aufgebracht werden kann. Andererseits ist die FT-Synthese wegen der beabsichtigten Nutzung von Biomasse in Verfahren der 2. Generation für Kraftstoffe bei CHOREN in Freiberg und dem Forschungszentrum Karlsruhe im Fokus. In den Kosten und Risiken von Neuentwicklungen liegt ein erhebliches Markteintrittshemmnis.

3.3.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf:

Eine F&E-Empfehlung kann nur für Verfahren gegeben werden, die unabhängig von den bestehenden lizenzierten Technologien entwickelt werden, da sonst die Gefahr besteht, dass die Weiterentwicklungen nicht genutzt werden können. Aus Sicht der Rohstoffsicherung der chemischen Industrie ist die Entwicklung eines unabhängigen, einstufigen Verfahrens zur Herstellung von chemischen Grundstoffen, wie Olefinen oder Aromaten von überragender Bedeutung. Hierzu sind koordinierte Anstrengungen in der Katalysator- und Verfahrensentwicklung sowie in der Entwicklung neuer Routen zu anderen Grundchemikalien unter direkter Beteiligung der chemischen Industrie nötig.

3.4 Hydroformylierung (Oxo-Synthese):

3.4.1 Status Quo:

Der Kern dieses Verfahrens besteht in der katalytischen Umsetzung von Olefinen mit Synthesegas unter Bildung von Aldehyden, wobei diese meistens zu Alkoholen weiterverarbeitet werden. Das Produktspektrum kann wesentlich durch die Wahl des geeigneten Katalysators beeinflusst werden. Der Prozess ist großtechnisch mit einer Jahresproduktion von rund 10,8 Mto (2002)¹⁷ im Einsatz und wird gut beherrscht.

3.4.2 Potentiale und Ausblick:

Die möglichen Potentiale des Prozesses liegen vor allen Dingen in der verbesserten Selektivität des Produktspektrums. Weiterhin könnte eine Ausweitung der Folgechemie basierend auf den Produkten der Hydroformylierung zur Eröffnung neuer Märkte und Anwendungen führen.

3.4.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf:

Bei dem gegenwärtigen Stand des Verfahrens sind F&E-Anstrengungen hauptsächlich im Bereich der Erweiterung der Betriebsparameter sowie in der Katalysatorforschung mit dem Ziel einer verbesserten Katalysator-Rückgewinnung und einer Erhöhung der Selektivität zu empfehlen.

4 Weitere Verfahren:

4.1 Extraktion:

4.1.1 Status Quo:

Mit der Extraktion werden unkonventionelle Kohlevorräte für eine stoffliche Nutzung erschlossen. Sie ermöglicht eine stoffliche Abtrennung und spätere Nutzung von jenen Teilen der Kohle, die sich in dem Extraktionsmittel lösen. In England wurde in den 1980er Jahren hierzu überkritisches Toluol, in Japan neuerdings Methylnaphthalin als Extraktionsmittel

¹⁷ Hans-Jürgen Arpe: „Industrielle Organische Chemie“, Wiley-VCH, Weinheim, 6. Auflage 2007

eingesetzt. Die Verfahren orientieren sich an der lokal verfügbaren Kohlequalität. In Deutschland wird die Gewinnung von Montanwachsen aus bitumenreichen Braunkohlen / Salzkohlen, betrieben. Die Montanwachse kommen in der Gußtechnik, in Pflegemitteln und im Straßenbau zur Anwendung. Das Know-how in Deutschland liegt bei der Firma ROMONTA.

4.1.2 Potentiale und Ausblick:

Es werden gegenwärtig nur sehr eingeschränkte weitere Entwicklungspotentiale gesehen.

4.1.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf:

Deutschland verfügt über eine starke wissenschaftlich-technische Basis im Bereich Extraktion, deren Fachleute für Anwendungen in der Kohlenveredlung bisher nicht sensibilisiert wurden. Eine Anpassung neuer Extraktionsmethoden auf nicht zugängliche oder unwirtschaftliche Kohlevorkommen könnte zu einer neuen Bewertung der Potentiale des Verfahrens führen.

4.2 Herstellung von Adsorbentien:

4.2.1 Status Quo:

Kohlenstoffhaltige Adsorbentien spielen eine herausragende Rolle im Bereich der Gasreinigung. Diese werden zur Zeit entweder auf Basis von Biomasse, durch Verkokung von Braunkohle im Herdofenverfahren, oder durch Aktivierung von Steinkohlekoks mit Wasserdampf, hergestellt.

4.2.2 Potentiale und Ausblick:

Mit den absehbaren Verschärfungen der Umweltschutzgesetzgebung im Bereich Luftreinhaltung und dem wachsenden Bedarf an hochselektiven Trenntechniken in der Gas- und Flüssigphase in vielen technischen Bereichen wird mit einer erheblichen zusätzlichen Verwendung von Adsorbentien gerechnet.

4.2.3 Forschungs- und Entwicklungsbedarf:

Mit den derzeitigen Herstellungsverfahren sind pulverförmige Adsorbentien nur durch zusätzliche Mahlung zu erhalten. Die Entwicklung neuer Verfahren oder die Anpassung bestehender Verfahren könnte die Kosten der Herstellung von Adsorbentien deutlich senken.

5 Personelle, strukturelle und wissenschaftlich-technische Ressourcen

5.1.1 Status Quo:

Historisch gesehen hat Deutschland schon früh eine führende Rolle im Bereich der Nutzung der Kohle durch Umwandlung und in der Kohlechemie innegehabt. Die Intensität der Aktivitäten auf diesem Sektor verhielt sich zyklisch zum Erdölpreis (Erdölpreis hoch $\Rightarrow$ Aktivitäten groß). Mit der letzten Baisse des Erdölpreises wurden bis 2000 alle Aktivitäten heruntergefahren, bzw. ganz eingestellt. Im akademischen Bereich haben sich die Institute aus der Kohlenforschung zunehmend zurückgezogen und die Nachwuchsausbildung wurde vernachlässigt oder praktisch eingestellt. Die Technologieführerschaft ist bis auf Teilbereiche (Anlagenbau) verloren gegangen. Das heutige Know-how ist nur noch verstreut und isoliert im technischen und wissenschaftlichen Fachpersonal vorhanden, das zudem häufig nicht

mehr aktiv auf dem Themengebiet tätig ist. Auf Initiative der DGMK ist eine Dokumentation des aktuellen Wissensstandes¹² entstanden.

5.1.2 Potentiale und Ausblick:

Wenn nicht prinzipiell gegengesteuert wird, verschwinden auch noch die letzten Überreste der Wissensgesellschaft „Kohlechemie“, d.h. das Wissen, die praktische Erfahrung und die Kenntnis zum Bau von Anlagen zur Nutzung von Kohle im Kraftwerks-, Kraftstoff- und Rohstoffbereich aus Deutschland.

Aus Sicht der damit verbundenen verstärkten Abhängigkeit von Rohstoffquellen außerhalb Deutschlands, nicht nur für die chemische Industrie, wäre der Verlust dieser Kernkompetenz nicht mehr zu kompensieren.

Mittel- und langfristig wäre es ein großer Fehler, wenn Deutschland das Know-how im Umgang mit dem einzigen nennenswerten verbliebenen Rohstoff verlieren würde.

5.1.3 Entwicklungsbedarf:

Der gegenwärtige Verlust an Know-how muss gestoppt und die Nutzung der Kohle und Kohlechemie wieder als strategischer Teil in Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten integriert werden. Dafür wird die Gründung eines Kompetenzzentrums für Kohlenforschung empfohlen. Es sollte das verbliebene Know-how und die Aktivitäten auf dem betrachteten Gebiet der darin noch tätigen wissenschaftlich-technischen Institutionen und Unternehmen aufzeigen und bündeln. Das Zentrum müsste nicht notwendigerweise geographisch lokalisiert sein, ein virtuelles Zentrum reicht unter Umständen zunächst für diese benötigte Bündelung und Netzbildung von wissenschaftlichem und technischem Know-how aus. Aus der Tätigkeit und Empfehlung dieses Zentrums heraus sollten dann Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten unter direkter Einbindung industrieller Anwender angeregt und begleitend durchgeführt werden können.

Ein weiterer Schwerpunkt der Tätigkeit des Kompetenzzentrums sollte in der Ausbildung und Nachwuchsarbeit liegen, um den nötigen Know-how-Transfer in eine ausreichende personelle Basis zu gewährleisten.

Auch wird die Kohlechemie aus ihrer Isolation heraustreten, sich neu definieren und die Vernetzung mit angrenzenden technisch-wissenschaftlichen Gebieten (z.B. der Katalyse oder Extraktion) suchen müssen, um von einem gegenseitigen Austausch profitieren zu können. Weiterhin sollte eine enge Einbindung des Anlagenbaues im Zentrum der Vernetzungsbemühungen stehen, da hier für alle Beteiligten beachtliche, auch wirtschaftlich verwertbare Synergieeffekte erwartet werden.

6 Zusammenfassung:

Im Bereich der Kohlenveredlung sind wesentliche Verfahren großtechnisch verfügbar, die eine Umwandlung von Kohle in chemische Grundrohstoffe und Kraftstoffe erlauben. Diese Verfahren haben das Potential, die Abhängigkeit der chemischen Industrie von erdölbasierten Rohstoffen zu vermindern.

Das derzeit in Deutschland einzige und mengenmäßig bedeutendste Primärverfahren der Kohlenveredlung zur Rohstoffversorgung, die Kohleentgasung ist eng gekoppelt mit der Eisen- und Stahlherstellung. Die Produktion von chemischen Grundstoffen aus dieser Route ist zur Zeit durch Nutzung der Koppelprodukte Gas und Teer gängig, aber für sich nicht wirtschaftlich.

Die Primärverfahren Kohlehydrierung und Kohlevergasung kommen zur Zeit nicht in Deutschland zum Einsatz, obwohl deren Grundlagen und industrielle Verwendung in der Vergangenheit maßgeblich von Deutschland beeinflusst wurden.

Die Kohlehydrierung ermöglicht die Bildung einer flüssigen Fraktion, die zu chemischen Grundstoffen und begrenzt zu Kraftstoffen aufgearbeitet werden kann. Das Produktspektrum ist nicht so flexibel wie im Falle der Kohlevergasung. Mit der Vergasungsrouten lässt sich ein Synthesegas herstellen, das durch einen geeigneten Sekundärprozess in chemische Rohstoffe und Kraftstoffe umgewandelt werden kann. Diskutiert wird auch der Einsatz der Kohlevergasung für IGCC-Kraftwerke mit gekoppelter CO₂-Abtrennung. Diese Kraftwerke können auch zur Polygeneration verwendet werden, indem das erzeugte Synthesegas teilweise zur Herstellung von Chemikalien verwendet wird, bevor – nach Abtrennung des CO₂ – nur der verbleibende Wasserstoff in Form von Wasserdampf aus dem angekoppelten Kraftwerksprozess in die Atmosphäre gelangt. Die relative Wirtschaftlichkeit dieser neuen Kraftwerksgeneration gegenüber den konventionellen Dampfkesselanlagen hängt wesentlich von den regulatorischen Rahmenbedingungen ab und hierbei insbesondere von den Kosten für CO₂-Emissionsrechte.

Die Sekundärverfahren, die es ermöglichen, das Zwischenproduktgemisch zum Beispiel aus Hydrierung oder Vergasung in das gewünschte Endprodukt umzuwandeln, sind gegenwärtig auf wenige Hauptprodukte spezialisiert und nur bedingt in der Lage, das benötigte Grundrohstoffspektrum der chemischen Industrie abzubilden. Der Einsatz der hierbei herausragenden, vormals in Deutschland entwickelten Fischer-Tropsch-Synthese zur Herstellung von synthetischen Kraftstoffen und anderen Grundstoffen, hängt wesentlich von der lizenzrechtlichen Situation und der lokalen Verfügbarkeit von kostengünstiger Kohle ab. Ein großtechnischer Einsatz der Fischer-Tropsch-Synthese aus Kohle ist derzeit in Deutschland unter den vorliegenden Rahmenbedingungen wirtschaftlich nicht möglich.

Die Aktivitäten im Bereich der Kohlenveredlung, in denen Deutschland historisch führend war, sind extrem reduziert worden. Die Lehre und die Ausbildung in der Kohlechemie findet im akademischen Bereich nur noch vereinzelt statt. Die industrielle Basis ist weg gebrochen, und das Know-how ist nur noch isoliert im Anlagenbau und in einigen Spezialfirmen vorhanden. Der Großteil der Wissensträger ist inzwischen im Ruhestand, und Nachwuchs ist nicht ausgebildet worden.

Aktivitäten im Bereich Kohlenveredlung sind von strategischer Bedeutung, da sie die Rohstoffabhängigkeit der chemischen Industrie und anderer industrieller Anwender vom Erdöl mit den damit verbundenen politischen und finanziellen Risiken vermindern und deren Wettbewerbsfähigkeit sichern. Hiermit ist eine zusätzliche Perspektive für die heimische Kohleindustrie verbunden, die nicht mehr als nur Lieferant von Brennstoff, sondern auch als Produzent bedeutender Grundrohstoffe für die Weiterverarbeitung begriffen werden muss.

Als Grundlage für zukünftige Aktivitäten werden folgende Maßnahmen empfohlen:

- Gründung eines nationalen, gegebenenfalls virtuellen, interdisziplinären Kompetenzzentrums für Kohlenforschung zur Bündelung und Koordination des vorhandenen wissenschaftlichen und technischen Know-hows, in und mit Beteiligung von Wissenschaft und Industrie und beratender Einbindung des ehemaligen Fachpersonals
- Reaktivierung der Forschungsaktivitäten und der Nachwuchsausbildung im akademischen Bereich
- Wiederaufnahme der Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten in den oben beschriebenen Verfahren unter Berücksichtigung der dargestellten Prioritäten
- Verstärkte Zusammenarbeit und Vernetzung mit angrenzenden Themengebieten, wie Katalyse, Membranforschung und Extraktionstechniken
- Beschleunigte gesetzliche Klärung der zukünftigen Rahmenbedingungen, wie für Emissionen von CO₂ und anderer klimaschädlicher Gase

Tabelle 2: Übersicht über die in diesem Dokument behandelten technischen Verfahren.

Verfahren	Produkt	Technischer Entwicklungsstand	Potential und Ausblick	Forschungs- und Entwicklungsbedarf	Sonstige Anmerkungen
Kohlehydrierung	Kohleöl	Entwürfe für drei großtechnische Verfahren	Höchster Wirkungsgrad, aber Konkurrenzfähigkeit wegen aufwändiger Raffination fraglich	Neuartige Katalysatorsysteme mit signifikant höherer Selektivität, die sich aus der Sumpfpfase abtrennen lassen (z.B. über ungewöhnliche Dichte oder magnetisch) Integrierte Verfahrenskonzepte Optimierung von Katalysatoren für die Weiterverarbeitung des Kohleöls zu marktfähigen Kraftstoffen	Abhängig von Kohleart Verfügbarkeit des DT/IGOR-Verfahrens gewährleisten
Kohlevergasung	Synthesegas	Großtechnisch mehrere Verfahren im Einsatz	Größtes Potential, da Synthesegas universell einsetzbar	Flugstromvergasung für Drücke bis 80 bar Stoffein- und -austragssysteme für Hochdruck Einsatz minderwertiger Kohlen, Biomasse, kohlenstoffhaltige Reststoffe Shiftreaktion: Vermeidung von Temperatur- und Drucksprüngen Schwefelresistente Katalysatoren für hohe Temperaturen Gasreinigungstechnologie, insb. auch Membrantechnologien zur Gasabtrennung Kohlevergasung in Sedimenten	Kopplung mit IGCC Kraftwerken zur Stromerzeugung und Polygeneration möglich, aber abhängig von Rahmenbedingungen für CO ₂ Emissionen.
Kohleentgasung / Verkokung	Koks, Steinkohlenteer, Kokereigas	Kokereitechnik großtechnisch im Einsatz	Ausblick wie Eisen- und Stahlindustrie	Großraumverkokungsreaktor, Zweiproduktkokerei	Abhängig von Eisen- und Stahlherstellung
Plasmapyrolyse	Acetylen	Ehemalige Pilotanlage	Keine	Kein Forschungsbedarf	Alternative Acetylenherstellung
Hydropyrolyse	Methan, Teer, Koks	Pilotanlage in Japan im Einsatz	Kombinationen von Kohlevergasung und Hydropyrolyse	Kombinationsverfahren mit interessanten Produktspektren und hoher Flexibilität	
Steinkohlenteer-aufarbeitung	Aromatische Verbindungen, Kohlenstoffmaterialien	Großtechnisch im Einsatz	Wird auch weiterhin zur Verfügung stehen	Umwandlung der Aromaten für die Feinchemie	Abhängig von Eisen- und Stahlherstellung
Methanol-Synthese	Methanol	Großtechnisch im Einsatz	Grundsubstanz für Folgechemie, Otto-Kraftstoffe gut darstellbar, Dieselmotorkraftstoffe nicht	Katalysatoren zur selektiven Darstellung von Oxygenaten Optimierung für Kraftstoffanwendungen Entwicklung effizienter Folgeprozesse	

Verfahren	Produkt	Technischer Entwicklungsstand	Potential und Ausblick	Forschungs- und Entwicklungsbedarf	Sonstige Anmerkungen
Fischer-Tropsch-Synthese	Kraftstoffe Chemierohstoffe	Großtechnisch im Einsatz	Herstellung von Kraft- und Chemierohstoffen	Katalysator- und Verfahrensentwicklung zur Herstellung von Olefinen	Lizenzrechtliche Fragen
Hydroformylierung	Aldehyde, Alkohole	Großtechnisch im Einsatz	Ausbau der Folgechemie	Erweiterung des Betriebsparameterspektrums, Verbesserung der Selektivität in der Produktpalette	
Extraktion	z. B. Montanwachse	Großtechnisch im Einsatz	In Deutschland nur für bitumenhaltige Braunkohle	Anwendung auf andere Kohlen Neue Extraktionsverfahren und –wege	
Adsorption	Adsorbentien	Großtechnisch im Einsatz	Absorbentien für Luft- und Gasreinigung	Entwicklung selektiver und verbesserter Verfahren für spezielle Anwendungen	Abhängig von gesetzlichen Vorgaben und Neuentwicklungen in anderen Verfahrenstechniken

7 Danksagung

Die folgenden Personen waren als „Initiativkreis Kohlenveredlung“ der DGMK und der DECHEMA an der Erstellung des vorliegenden Positionspapiers beteiligt:

- Ralf Abraham, Uhde GmbH, Dortmund
- Dr. Florian Ausfelder, DECHEMA e.V., Frankfurt
- Prof. Dr. Eckhard Dinjus, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
- Prof. Dr. Michael Dröscher, Evonik Degussa GmbH, Essen
- Prof. Dr. Matthias W. Haenel, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim
- Dr. Johannes Heithoff, RWE Power AG, Essen
- Dr. Gisa Teßmer, DGMK Deutsche Wissenschaftliche Gesellschaft für Erdöl, Erdgas und Kohle e.V., Hamburg
- Dr. Kurt Wagemann, DECHEMA e.V., Frankfurt
- Prof. Dr. Jens Weitkamp, Universität Stuttgart

Der „Initiativkreis Kohlenveredlung“ möchte sich bei folgenden Personen für den regen wissenschaftlichen Austausch und fachliche Ergänzungen sowie Kommentare bedanken:

- Dr. Gerd-Peter Blümer, Rütgers Carbo-Tech AG, Essen
- Dr. Gerd Collin, Frankfurt
- DGMK Fachbereich Kohlenveredlung
- Dr. Steffen Krzack, TU Bergakademie Freiberg
- Prof. Dr. Bernd Meyer, TU Bergakademie Freiberg
- Dr. Jörg Schmalfeld, Bad Homburg
- Dr. Hans-Joachim Schulze, CHOREN, Freiberg