



Fachsektion Prozessintensivierung

PROZESSINTENSIVIERUNG

- Eine Standortbestimmung -

Vorstand der ProcessNet Fachsektion Prozessintensivierung

Inhalt

1	Vorwort.....	3
2	Einleitung und Allgemeines	4
3	Bedeutung der Prozessintensivierung.....	5
3.1	Prozessintensivierung und Energieversorgung.....	6
3.2	Prozessintensivierung und die Erschließung neuer Rohstoffquellen	7
3.3	Effiziente biotechnologische Prozesse.....	7
3.4	Zugang zu neuen Prozessen und Produktqualitäten	8
4	Neue Prozesstechnologien für die Prozessintensivierung	9
4.1	Neuartige Produktionskonzepte	9
4.1.1	Reaktive Trennverfahren.....	9
4.1.2	Hybride Trennverfahren	11
4.1.3	Rationelle Prozessführung	11
4.1.4	Biotechnologieproduktion der nächsten Generation	13
4.2	Miniaturisierung	13
4.2.1	Mikrostrukturierte Apparate.....	14
4.2.2	Tropfen als chemischer Reaktor	15
4.3	Prozessausrüstung zur Intensivierung des Stofftransports und der Wärmeübertragung ...	15
4.4	Neuartige Lösungsmittel.....	15
4.5	Strukturierte Katalysatoren und Trägermaterialien.....	17
4.6	Gezielter Energieeintrag und unkonventionelle Energieformen	19
5	Ausblick: Produktion der Zukunft.....	20
6	Literatur	20

1 Vorwort

Dieses durch den Vorstand der Fachsektion Prozessintensivierung erarbeitete Papier hat das Ziel, die Bedeutung und verschiedene Aspekte der Prozessintensivierung zu beleuchten und zu erläutern. Es dient der Präzisierung des Gebiets „Prozessintensivierung“ und möchte dabei auch das Selbstverständnis des Vorstands bezüglich der Rolle und Aufgabe der Fachsektion erläutern.

Prozessintensivierung ist keine eigenständige Fachdisziplin. Wesentliche Beiträge zur Prozessintensivierung werden durch verschiedenste verfahrenstechnische Entwicklungen und Beiträge geleistet, die in zahlreichen ProcessNet-Gremien der Fachgemeinschaften Reaktionstechnik, Fluidodynamik und Trenntechnik, Partikeltechnik und Produktdesign, Prozess-, Apparate- und Anlagentechnik, oder Nachhaltige Produktion, Energie und Rohstoffe (SuPER) vorgestellt und diskutiert werden. Prozessintensivierung ist somit ein natürlicher und wichtiger Aspekt der Arbeit der meisten Gremien von ProcessNet. Die Ergebnisse der durch die Fachsektion Prozessintensivierung 2007 gestarteten Anfrage nach „best practise“ Beispielen der Prozessintensivierung unter allen ProcessNet-Gremien belegt dies eindrucksvoll.

Die eingegangenen Beispiele zeigen aber auch, dass vielfältig noch Unklarheit über den Begriff Prozessintensivierung und dessen Abgrenzung von bzw. Überschneidung mit z.B. Prozessoptimierung oder Prozessintegration herrscht. Selbst unter den Vorstandsmitgliedern der Fachsektion, die sich die Aufgabe gestellt haben, die Beispiele zu beurteilen, gingen im Einzelfall die Meinungen auseinander.

Die Grenzen zwischen Prozessoptimierung und Prozessintensivierung sind fließend und fallabhängig, häufig überschneiden sie sich. Eine pragmatische Abgrenzung mag darin liegen, dass Prozessoptimierung sich um Verbesserungen an bereits bestehenden bzw. implementierten Prozessen bemüht, während Prozessintensivierung mehr auf ganzheitliche Prozessentwicklung neuer Prozesse unter optimierten Bedingungen ausgerichtet ist.

Die folgenden Aspekte bestimmen für die Fachsektion Prozessintensivierung und deren Vorstand wesentlich Selbstverständnis und Zielstellung ihrer Arbeit:

1. die Fachsektion versteht sich als Katalysator und Brücke zwischen den verschiedenen Disziplinen und ProcessNet-Gremien. Ziel der Fachsektion ist es, das Thema Prozessintensivierung in allen relevanten Gremien präsent zu machen, so dass der Begriff und die Facetten der Prozessintensivierung selbstverständliche Elemente der Arbeit in diesen Gremien werden. Sie möchte dabei helfen, den Begriff Prozessintensivierung zu präzisieren und in den Kontext der Arbeit der jeweiligen Gremien zu stellen.
2. die Arbeit der Fachsektion ist dann als optimal erfolgreich zu bewerten, wenn sie sich als eigenständige Fachsektion irgendwann überflüssig gemacht hat, weil die Zielvorstellungen, Konzepte und Ansätze der Prozessintensivierung Allgemeingut in der Prozessentwicklung geworden sind. Dies ist dann der Fall, wenn die unter 1. genannten Ziele erreicht sind. Der Vorstand der Fachsektion Prozessintensivierung strebt hierzu einen Zeitraum von ca. fünf Jahren an. Dieses Zeitfenster ist auch gewählt unter dem Aspekt der Wettbewerbsfähigkeit der europäischen Prozesstechnologien im globalen Umfeld.

Gemäß den o.g. Ausführungen bezieht sich dieses Papier, wo immer sinnvoll, auf Positionspapiere und Roadmaps anderer ProcessNet-Gremien. Diese enthalten vielfältige

Elemente, die Beiträge zur Prozessintensivierung darstellen, auch wenn sie häufig nicht als solche benannt werden. Des weiteren wurde die „European Roadmap for Process Intensification“ berücksichtigt, die durch die niederländische „Action Group PI“ in Zusammenarbeit mit ausgesuchten internationalen Expertenerarbeitet wurde. Der Vorstand der Fachsektion unterhält einen intensiven Austausch mit der Action Group PI.

Es ist möglich, dass zu einzelnen Aspekten dieses Papiers kritische Stimmen laut werden, die anzweifeln, dass bestimmte Themen unter dem Begriff Prozessintensivierung gefasst werden sollten. Der Vorstand begrüßt dies und lädt zu einem konstruktiven Disput ein, der zur Präzisierung des Begriffs Prozessintensivierung beiträgt.

2 Einleitung und Allgemeines

In den letzten Jahren hat der Begriff der Prozessintensivierung wieder zunehmend Einzug in Industrie und Wissenschaft gefunden. Im Umfeld der ProcessNet-Arbeitsfelder zielt Prozessintensivierung auf eine drastische (signifikante) ökonomische und ökologische Steigerung der Effizienz chemischer und biotechnologischer Prozesse ab. Dies beinhaltet auch die Generierung neuer Produkte oder Produktqualitäten.

Eine genaue Begriffsbestimmung ist zurzeit noch Gegenstand einer durchaus kontroversen Diskussion im universitären Bereich wie auch in der Industrie. So umfasst zum Beispiel nach Stankiewicz und Moulijn die Prozessintensivierung als eine Disziplin der Verfahrenstechnik sämtliche verfahrenstechnische Entwicklungen, die schließlich zu drastisch kleineren, sauberen und energie-effizienteren Prozesstechnologien führen [1]. Hier stehen insbesondere die verfahrenstechnischen Methoden im Vordergrund. Letztlich sollen mittels prozessintensivierender Technologien mögliche Limitierungen im Energie- und Stofftransport minimiert und die Reaktionskinetik optimiert werden.

Aufbauend auf den Erfahrungen auf dem Gebiet der Spezialchemie wird in einer von Hüther et al. [2] vorgeschlagenen Definition Prozessintensivierung als holistischer Ansatz aufgefasst, der von den ökonomischen Randbedingungen ausgehend die Analyse der chemischen und technischen Determinanten eines Produktionsprozesses umfasst (siehe auch [3,4]). Darauf fußt dann im nächsten Schritt die Strategieentwicklung zur Intensivierung des Prozesses. Diese kann u.a. den Einsatz von z.B. Mikroverfahrenstechnik oder Reaktivdestillation umfassen; sie kann aber auch den Einsatz einer veränderten chemischen Syntheseroute oder alternativer Lösungsmittel bedeuten. In einem solchen konzeptionellen Ansatz zur Prozessintensivierung ist folgerichtig der erste Schritt, nämlich die ganzheitliche Analyse eines Prozesses, von entscheidender Bedeutung. Von Prozessintensivierung könnte man in diesem Sinne sprechen, wenn für den resultierenden Prozess über mehrere Jahre keine signifikanten Kapazitätserhöhungen/Prozessverbesserungen erzielt werden können. Prozessoptimierung beinhaltet im Gegensatz hierzu die inkrementelle Verbesserung und Kapazitätserhöhung einer bestehenden Anlage.

Im Sinne der bisher genannten Elemente des Begriffs Prozessintensivierung ist auch der Definitionsversuch der European Roadmap for Process Intensification verfasst: *Process Intensification provides radically innovative principles ("paradigm shift") in process and equipment design which can benefit (often with more than a factor two) process and chain efficiency, capital and operating expenses, quality, wastes, process safety and more.*

Konzepte und Methoden der Prozessintensivierung werden seit einigen Jahren an Hochschulen und zunehmend auch in der chemischen Industrie entwickelt und eingesetzt. Diese werden sich in vielfältiger Weise auswirken auf die Art, wie die chemische und die pharmazeutische Industrie zukünftig produziert. Prozessintensivierung ermöglicht flexiblere Produktionsanlagen, variable, durch modulare Anlagen dem Bedarf anpassbare Kapazitäten und neue Produktionskonzepte wie die verteilte Produktion, die das Paradigma der World Scale Anlagen auf Basis der Economy of Scale durchbrechen und Lieferketten grundlegend umgestalten könnten.

3 Bedeutung der Prozessintensivierung

Entsprechend dem Mission Statement der ProcessNet Fachsektion zielt Prozessintensivierung auf eine drastische, ökonomische und ökologische Steigerung der Effizienz chemischer und biotechnologischer Prozesse und die Generierung neuer Produkte oder Produktqualitäten ab.

Prozessintensivierungsmaßnahmen lassen sich in folgende Kategorien unterteilen:

- Miniaturisierung
- Hybridisierung
- Strukturierung
- Dynamisierung
- Integration und Rationalisierung
- Neuartige Lösungsmittel und unkonventioneller Energieeintrag

Prozessintensivierungsmaßnahmen können wesentliche Beiträge leisten zur Bewältigung der bevorstehenden Herausforderungen der chemischen und pharmazeutischen Industrien. Beispielsweise ist infolge der Umstellung auf nachwachsende Rohstoffe mit Paradigmenwechseln zu rechnen, wie z.B. von Schüth und Schaub geschildert. Weiterhin fordert der Klimawandel neue technologische Lösungsansätze zur Abtrennung von CO₂ aus Abgasen und dessen Verwertung oder Sequestrierung (Carbon Capture and Storage - CCS). Im Rahmen der Globalisierung der Wirtschaft findet ein zunehmender Wettbewerb mit Schwellenländern statt, in dem sich die deutsche Industrie nur mit hoch effektiven und zugleich effizienten Produktionsprozessen bzw. mit herausragenden Produktqualitäten behaupten kann. Dieser Trend zu höherwertigen Produkten bedingt den Bedarf an innovativen und intensivierten Herstellverfahren, wie z.B. biotechnologische Verfahren zur Erzeugung neuer Wirkstoffe.

Der Gesamteinfluss des Menschen auf seinen Lebensraum kann durch den sogenannten „Ecological Footprint“ beschrieben werden, der sich wesentlich aus den Einflußfaktoren Bevölkerungszahl, Lebensstandard sowie der Effizienz eingesetzter Technologien und deren Entwicklungsstand ergibt. Während bestehende Technologien bezüglich Effizienz weitgehend ausgereizt wurden, besteht bei der Einführung von neuen innovativen Technologiegenerationen die Möglichkeit, die benötigten drastischen Leistungssteigerungen zu erzielen.

3.1 Prozessintensivierung und Energieversorgung

Der Klimawandel als Folge anthropogener Emissionen wurde mittlerweile in der Gesellschaft als eine der großen Herausforderungen der Menschheit erkannt. Das Positionspapier „Energieversorgung der Zukunft – der Beitrag der Chemie“ des Koordinierungskreises chemische Energieforschung, getragen von den großen Chemieorganisationen, hebt die Wichtigkeit der chemischen Verfahrenstechnik in einer zukünftigen Energieversorgung und in der effizienten Energienutzung hervor. Innovative Konzepte der Prozessintensivierung spielen hier eine wesentliche Rolle.

Bei Kraftwerkstechnologien stellen Maßnahmen zur Abtrennung und Speicherung von CO₂ (CCS) derzeit den politisch am stärksten motivierten Ansatz zum Umgang mit der CO₂-Problematik dar, da die Kernenergie gesellschaftlich nach wie vor kontrovers diskutiert wird und erneuerbare Energiequellen wahrscheinlich nur einen begrenzten Beitrag leisten können. Die Bewältigung der Stoffströme, die zwei bis drei Größenordnungen höher liegen als in der Chemischen Industrie setzt im Sinne der Prozessintensivierung kompakte Hochleistungsapparate, die das volle Potential der bestmöglichen Trennverfahren ausschöpft, voraus. Der Einsatz von rotierenden Packungen bietet beispielsweise deutlich höhere volumenspezifische Trennleistungen (geringere HETP Werte) sowie signifikante Steigerung der Flutgrenze (Erhöhung der Stromdichte). Darüber hinaus kann man sich die Verwendung von neuartigen maßgeschneiderten Lösemitteln (Tailored Solvents), die eine hohe Beladungskapazität bei niedriger Regenerationsenergie miteinander verbinden.

Auch die dezentrale Energieversorgung kann einen entscheidenden Beitrag zur Absenkung der CO₂-Emissionen leisten. Kleine Blockheizkraftwerke zur verbesserten Ausnutzung von Abwärme setzten die Verwendung miniaturisierter Technologien voraus. Eine intensivierte Speicherung von Wärme bzw. Strom bietet den Schlüssel zum effektiven Ausgleich von Angebot und Nachfrage verschiedener Energiequellen und –senken. Auf diese Weise kann man auch größere Abwärmemengen aus industriellen Prozessen beispielsweise zur Beheizung von Gebäuden verwenden. Der Einsatz von intelligenten Energiezählern kann hierzu auch einen wichtigen Beitrag zur Wahrnehmung der Potentiale leisten.

Zur Herstellung von Biofuels als Energieträger für Kraftfahrzeuge eignet sich hervorragend die Verwendung von Prozessintensivierungsansätzen in Form von flexiblen modularen Anlagen. Daneben wurde bei der BTL-Technologie eine Reihe neuer Katalysatorstrukturen für die Fischer Tropsch-Synthese entwickelt. Die Erzeugung von Wasserstoff durch on-board- bzw. dezentrales Reforming profitiert ebenfalls von Prozessintensivierung.

Trotz langjähriger Anstrengungen zur Verminderung von Energieverbräuchen bzw. CO₂-Emissionen besteht weiteres Einsparpotential in der Chemischen Industrie, das derzeit durch hohe Energiepreise und den steigenden weltweiten Energiebedarf auch aus rein wirtschaftlichen Gründen erschlossen werden muß. Die Katalyse spielt als Schlüssel zur erfolgreichen Reaktionsführung eine entscheidende Rolle. Die zweckmäßige Zusammenführung mehrerer Prozessschritte in hybriden Verfahren eröffnet sowohl Wege zur Rationalisierung der Verfahren als auch gesteigerte Ausbeuten und Trennleistungen durch synergetische Wechselwirkungen. Selbst die Verbrennungsreaktion bei der Energieerzeugung kann intensiviert werden. Durch eine hybride homogene-heterogene Umsetzung in der Katalysatorgrenzschicht kann man sehr hohe Reaktionsgeschwindigkeiten ohne die Emissionen der herkömmlichen Verbrennung in Flammen erzielen.

3.2 Prozessintensivierung und die Erschließung neuer Rohstoffquellen

Verschiedene Konzepte zur stofflichen Verwertung von Biomasse wurden ausgearbeitet [Kamm]. Die anfallenden Mengen an lignozellulosehaltigen Abfällen könnten den Rohstoffbedarf der deutschen chemischen Industrie (20 Mio. t Öl/J) abdecken [Wagemann].

Neue Wärmekopplungsstrategien ergeben sich infolge der hydrodynamischen Vergasung (auch überkritisch) von Biomasse anstelle von Steamcracker/Reforming (HT, endotherme Funktionalisierungen mit Verbrennung als Wärmequelle).

Eine Alternative zur Syngasschiene stellt die Umwandlung von Biomasse in neue Plattformchemikalien, wie etwa Lävulinsäure, dar, die neue Trenntechniken anstelle der bislang weitverbreiteten Destillation erfordern. Darüber hinaus benötigt man zur ‚Defunktionalisierung‘ solcher Moleküle auch Wasserstoff aus regenerativen Quellen (Integration).

Auch bei einer direkten Anwendung von Bioprodukten, beispielsweise durch Modifikation von Polymeren auf Zellulosebasis, können Prozessintensivierungsansätze, z.B. Aufschluß in maßgeschneideten Lösungsmittel, wie z.B. ionische Flüssigkeiten [Wasserscheid] eine wichtige Rolle spielen .

3.3 Effiziente biotechnologische Prozesse

Biotechnologische Prozesse zählen zu den ältesten Produktionsverfahren des Menschen und sind durch teils jahrhundertalte Optimierung sehr effizient. Beispiele sind das Bierbrauen oder die Verarbeitung und Haltbarmachung von Nahrungsmitteln

Dagegen bieten biotechnologische Prozesse für Hochwertprodukte zum Teil enorme Intensivierungspotentiale, da bisher die schnelle Verfügbarkeit des Wirkstoffs in der erforderlichen Reinheit weit wichtiger war als die Realisierung ökonomisch und ökologisch optimierter Prozesse.

Nachdem die Fermentation zwischenzeitlich deutlich effizienter und aufgrund höherer Produktkonzentrationen (Titer) von mehreren Gramm Zielprodukt pro Liter Fermentervolumen auch deutlich kostengünstiger geworden ist, werden Konzepte entwickelt, die den derzeit kostenintensivsten Teil des Gesamtprozesses, die Produktaufarbeitung oder das „Downstream Processing“ im Fokus haben.

Die Produktabtrennung und Aufreinigung erfolgt klassisch durch eine Sequenz von bis zu 5 säulenchromatographischen Schritten in Batch-Fahrweise. Ziele der Forschungsansätze ist zum einen die Reduzierung der Trennschritte auf 2 bis 3 Stufen durch Erhöhung von Selektivität und Produktivität der eingesetzten Trennmaterien, der partielle Ersatz von Säulen durch Membrantechnologien und deren geschickte Verkopplung. Dabei sind auch bereits die ersten kontinuierlichen Prozessansätze vorgestellt worden [Morbideilli].

Wichtig für die Auslegung und Prozessüberwachung effizienter biotechnischer Verfahren ist die Verfügbarkeit von leistungsfähiger Analytik. Hier haben einerseits die sogenannten „Lab-on-a-Chip“-Ansätze interessante Anwendungspotentiale, zum anderen erlauben

trägergestützte Tests, sogenannte „Bead-based Assays“ die Verfolgung der Produktbildung im Fermenter bereits bei sehr geringen Anfangskonzentrationen, um somit die optimalen Wachstumsbedingungen einstellen zu können, die für die Führung intensivierter Prozesse unabdingbar sind. Dabei sollten alle analytischen Verfahren neben der Anwendbarkeit im Forschungslabor auch validiert und zur Prozessüberwachung im Großmaßstab eingesetzt werden können, also PAT-Bedarfe erfüllen (Process Analytical Technologies).

Ein weiterer wichtiger Einstieg in die Intensivierung biotechnologischer Prozesse ist auch die gesamthafte Betrachtung des Prozessablaufs von der Discovery, d.h. der Entdeckung eines neuen Wirkstoffs bzw. der zielgerichteten Suche danach über die Entwicklung bis hin zur Produktion und der Formulierung des Wirkstoffes und seines Verbringens an den Wirkort (Delivery). Dabei kann beispielsweise der Einschluss von selbst hochtoxischen Substanzen in geeignete Trägersysteme für den Transport zum Wirkort unter patientenverträglichen Bedingungen Therapiekonzepte erlauben, die sonst nicht realisierbar wären.

Die Umsetzung von Prozessintensivierungspotentialen in meist biopharmazeutischen Herstellprozessen lässt sich trotz der vergleichsweise hohen Aufwendungen durch die hohen Marktpreise der Endprodukte relativ schnell refinanzieren. Der hohe Bedarf an innovativen Wirkstoffen zur Bekämpfung lebensbedrohender Erkrankungen ist ein weiterer Treiber auf dem Weg zur schnelleren, kostengünstigeren und trotzdem sicheren Prozessen für die Bereitstellung von Arzneimitteln. Verzögernd wirkt allerdings der hohe regulative Aufwand auf die Umsetzung neuer Prozesstechnologien, der bis zur Durchführung neuer klinischer Studien gehen kann.

3.4 Zugang zu neuen Prozessen und Produktqualitäten

Neben der Zielsetzung der Prozessintensivierung, Produktionsanlagen beispielsweise für die Herstellung von Spezial- oder Feinchemikalien flexibler zu machen, wird mit Hilfe neuer Prozesstechnologien auch die Entwicklung neuer Produkte ermöglicht. Zur anlagentechnischen Umsetzung von Prozessintensivierung kann Modulares Engineering gewissermaßen als Querschnittskonzept dienen – eine Art Baukasten, bei dem verschiedene Anlagenteile zeitgleich gebaut und vor Ort "zusammengesetzt" werden. Der Vorteil: die Zeit zur Errichtung einer Anlage verkürzt sich deutlich, so dass neue Produkte dem Markt schneller zur Verfügung gestellt werden können. Zudem kann eine modulare Bauweise auch dazu beitragen, die Investitionskosten bei der Erweiterung bestehender Anlagen zu senken und Produktionskapazitäten bedarfsgerecht anzupassen.

Höhere Prozesskontrolle erlaubt das gezieltere Einstellen von Produkteigenschaften und ermöglicht damit kundenspezifischere Produkte. Schließlich bietet der Zugang zu neuen Verfahren oder Prozessfenstern die Möglichkeit, Produkte bzw. Produktqualitäten zu erzielen, die bisher nicht, oder nur mit relativ hohem Aufwand erreicht werden können.

4 Neue Prozesstechnologien für die Prozessintensivierung

Es existiert eine Vielzahl von Prozesstechnologien, die als Werkzeuge für eine Prozessintensivierung eingesetzt werden können. Im folgenden sollen wesentliche Konzepte übersichtsartig vorgestellt werden. Auf eine detaillierte Betrachtung einzelner Prozesstechnologien oder Verfahren wird jedoch verzichtet. Hierzu sei auf die „European Roadmap for Process Intensification“ verwiesen, in der 72 PI Technologien (Equipment-Typen und Verfahren) identifiziert und 47 dieser Technologien in sog. „Technology Reports“ ausführlich beschrieben wurden.

4.1 Neuartige Produktionskonzepte

4.1.1 Reaktive Trennverfahren

Durch die Zusammenlegung mehrerer Unit Operations ergeben sich sowohl eine klare apparative Rationalisierung als auch Leistungssynergien. Die Integration eines Trennverfahrens in einen chemischen Reaktor kann beispielsweise Gleichgewichtsbeschränkungen überwinden und Zwischenprodukte von unerwünschten Folgereaktionen verschonen. Darüber hinaus können durch chemische Reaktionen Azeotrope umgangen werden.

Membranreaktoren stellen die integrale Kopplung von chemischer Reaktion mit Membranverfahren dar. Im Sinne der reaktiven Trennverfahren werden sie eingesetzt, um selektiv Produkt aus dem Reaktionsgemisch zu entfernen (Membranextraktion) oder homogene Katalysatoren zurückzuhalten (Immobilisierung von Katalysatoren oder Membranfiltration).

Die Reaktivpervaporation ist als Spezialfall anzusehen (selektive Verdampfung einer Komponente mit Hilfe einer Membran. Einsatzbeispiel ist die Synthese von Methy-tert-butylether (MTBE) aus Methanol und Terbutylazin, bei der sich im Gegensatz zur Reaktivdestillation höhere MTBE-Umsätze durch Vermeidung des MTBE/Methanol-Azeotrops erzielen lassen.

Neben reaktiven Trennverfahren werden Membranreaktoren aber auch eingesetzt um Edukte über eine Membran der Reaktion zuzuführen (Distributor) oder Reaktanden zu kontaktieren (Kontaktor). Beispiel für die erste Variante ist die Erzeugung von Synthesegas mit integrierter Luftzerlegung im Festoxidmembranreaktor eingesetzt, Beispiel für die zweite ist die Durchführung von Mehrphasenreaktionen im katalytischen Membrankontaktor.

Spezielle Polymere und neue anorganische Materialien sowie technologische Fortschritte bei modernen Beschichtungsverfahren und in jüngster Zeit auch die Mikrostrukturtechnik haben für Membranreaktoren neue Möglichkeiten eröffnet.

Die **Reaktivdestillation** oder die **Reaktivrektifikation** ist eine Kombination von chemischer Reaktion und destillativer Stoffabtrennung in einem Verfahrensschritt. Wie bereits erläutert eignet sie sich vor allem bei gleichgewichtslimitierten Reaktionen zur Umsatzsteigerung, oder zum Brechen von durch die Reaktion auftretenden Azeotropen. Ferner kann die Reaktionswärme zur Stofftrennung verwendet werden. Verglichen mit konventionellen Verfahren können die Investitions- und Betriebskosten gesenkt, der Reaktionsumsatz, die

Selektivität und der Stoffübergang i. d. R. dagegen verbessert werden. Heute sind weltweit eine ganze Reihe kommerziell betriebener Reaktivrektifikations-Verfahren in Betrieb, unter denen die Methylacetat-Synthese ein gutes Beispiel für die Reduzierung von Verfahrensschritten durch Einführung eines reaktiven Trennverfahrens ist. Eine einzige reaktive Rektifikationskolonne ersetzt hierbei einen Reaktor und neun nachfolgende Destillationskolonnen, die im konventionellen Verfahren zur Aufarbeitung des Produktes benötigt werden.

Die Verbindung der adsorptiven Stofftrennung mit der heterogenen Katalyse führt zum **adsorptiven Reaktor**. Mit Hilfe einer integrierten Trennfunktion lässt sich simultan zur Reaktion ein Produkt adsorptiv entfernen oder ein Edukt als Adsorbat vorlegen. Im ersten Fall steht die Steigerung reaktionstechnischer Kennzahlen, wie Umsatz und Selektivität, im Vordergrund, während im zweiten Fall neben der Selektivitätslenkung die Nutzung von Edukten trotz ihrer starken Verdünnung im Zulaufstrom die Motivation für ein adsorptives Reaktorkonzept liefert. In der Regel vermindert die Adsorption mehr als einer Komponente die Effektivität adsorptiver Reaktoren, so daß die Auswahl des geeigneten Adsorptionsmittels hinsichtlich der Selektivität, jedoch ohne seine Kapazität außer acht zu lassen, eines der wichtigsten Auslegungskriterien für adsorptive Reaktoren darstellt. [vgl. ConNeCat-Roadmap der deutschen Katalyse-Forschung, 2. Auflage, Kapitel 6.1]

Die Vorteile der **Reaktivextraktion** liegen im geringen Energieeinsatz, der kontinuierlichen Betriebsweise und der hohen Selektivität. Jedoch ist der Stofftransport bei der Reaktivextraktion im Vergleich zur physikalischen Extraktion komplex, da dem physikalischen Vorgang die chemische Reaktion überlagert ist. Einsatzgebiete der Reaktivextraktion sind z. B. die Abtrennung von Schwermetallen, organischen Säuren oder Pharmazeutika aus niedrig konzentrierten wässrigen Lösungen bis in den ppm-Bereich, sowie die Anreicherung und Umwandlung von Salzen.

Reaktivkristallisation umfasst den Zusammenschluss der Grundoperationen chemische Reaktion und physikalische Trennung mittels Kristallisation. Dies beinhaltet, aber nicht ausschließlich, Fällungen. Ziel der Reaktivkristallisation ist die Herstellung von Produkten mit den gewünschten Eigenschaften (Partikelgröße, Morphologie, Reinheit, etc.). Die Reaktivkristallisation ist ein weit verbreiteter Prozess mit Anwendungen von der Diastereomerenkristallisation bis zur Abwasseraufbereitung.

Chromatographische Reaktoren integrieren eine chemische (oder biochemische Reaktion) und eine chromatographische Trennoperation in einem Apparat. Besonders attraktive Anwendungsgebiete für chromatographische Reaktoren liegen im Bereich der Biotechnologie, der Pharmazie und der Feinchemie. Ihr Einsatz bietet sich immer dann an, wenn die involvierten Komponenten nicht-flüchtig oder wärmeempfindlich sind. Die chromatographische Reaktionsführung eröffnet einen eleganten Weg zur Herstellung enantioreiner Produkte. Funktionsprinzipien umfassen die Batch-Kolonne und kontinuierliche chromatographische Reaktoren im Gegenstromprinzip. Letztere liegen im Fall der Simulated-Moving-Bed-Reaktoren vor, sowie bei den (technisch schwer realisierbaren) True-Moving-Bed-Reaktoren.

Die zum Teil widersprüchlichen Anforderungen der einzelnen Teilverfahren führen bei deren Kopplung zu suboptimalen Kompromissen (Krishna) und benötigen aufwendige Modelle zur Erfassung der komplexen Wechselwirkungen. Als Lösungsansatz hierfür gelten Strukturierungsmaßnahmen, die die einzelnen Funktionalitäten auf verschiedenen Ebenen räumlich anordnen. In der heterogen katalysierten Reaktivdestillation beschränkt man häufig die katalytische Aktivität auf einen bestimmten Abschnitt der Kolonne, um negative Interaktionen zu verhindern und die angestrebten Synergien zu verstärken. Hierfür stellt die der Kühlkapazität angepasste Verteilung der katalytischen Aktivität im Rohrbündelreaktor zur Verhinderung der Hot Spot Bildung ein weiteres Beispiel dar. Zur kinetischen Harmonisierung verschiedener Funktionalitäten kann man sich die Miniaturisierung zu Nutze machen: Durch die große Oberfläche von Hohlfasermembranmodulen kann man beispielsweise die Widerstandslimitierung des Stofftransports ausgleichen.

4.1.2 Hybride Trennverfahren

Unter hybriden Trennverfahren versteht man die Verschaltung von mehreren Grundoperationen derart, dass sie in einem Verfahrensschritt, apparativ getrennt, anhand unterschiedlicher physikalischer Phänomene gemeinsam zur Lösung einer Trenaufgabe beitragen. Die Grundoperationen hängen dabei wechselseitig voneinander ab, wodurch Synergien geschaffen werden, die es erlauben, die Grenzen des einen Verfahrens durch das Potential des anderen zu überschreiten. Hybride Trennverfahren werden bei schwierigen Trennungen, wie eng siedenden oder azeotropen Gemischen eingesetzt.

Bei der **extraktiven Destillation** wird einem destillativ zu trennenden Gemisch ein schwersiedender Hilfsstoff zugesetzt, der das Phasengleichgewicht selektiv beeinflusst. Die extraktive Destillation ist als hybrides Verfahren in der chemischen Prozessindustrie weit verbreitet, insbesondere in der Petrochemie.

Neue Ansätze, wie die **Membrandestillationen**, werden augenblicklich intensiv erforscht. Die Kombination von Destillation bzw. Rektifikation mit einer Membrantrennung (Pervaporation/Dampfpermeation) zu einem Hybridprozess in verschiedenen Verschaltungsvarianten hat ein Hauptanwendungsgebiet in der Entwässerung (Absolutierung) von Lösungsmitteln, kann aber auch die erhebliche Kapazitätserweiterung bestehender Kolonnen (De-Bottlenecking) ermöglichen.

Beispiele für die **Extraktivkristallisation** sind die Trennung von m- und p-Cresol mit Essigsäure als Lösungsmittel, oder von o- und p-Nitrochlorbenzol mit p-Dichlorbenzol.

4.1.3 Rationelle Prozessführung

Auf Ebene der Prozessführung finden sich vielfältige Ansätze zur drastischen Erhöhung der Energie- und Ressourceneffizienz von Prozessen.

Eine effiziente und stabile Prozessführung auf der Basis **automatisierter Prozesskontrolle** und –optimierung kann erheblich zu einem ressourcen-schonenden Betrieb von Produktionsanlagen beitragen und gleichzeitig die Produktionskosten reduzieren. Die Etablierung verteilter und bedarfsgerichteter Produktionsmodelle ("On-Site", "On-Demand"),

die sich aus den Möglichkeiten der Prozessintensivierung erschließen, ist nur mit einem hohen Grad an automatisierter Prozessbeobachtung und –kontrolle denkbar.

Bei komplexen Zwischen- oder Endprodukten, wie z.B. Polymere oder Feststoffe, besteht die Möglichkeit, durch gezieltere Prozessführung deutliche Steigerungen der Produktqualität zu bewerkstelligen.

Sowohl gehobene regelungstechnische Ansätze als auch innovative Ansätze der Prozessbeobachtung beruhen weitgehend auf modellgestützten Methoden. Die Einbeziehung von Wissen über das Prozessverhalten in Prozessführungsstrategien führt zu einer stabilen und präzisen Einhaltung von ökonomischen und ökologischen Anforderungen. Dabei können die Modelle sowohl aus Simulationsmethoden stammen, die im Rahmen der Verfahrensentwicklung angewendet werden, als auch durch eine intelligente Nutzung von Prozessdaten gewonnen werden.

Hohes Potential bietet generell der Ersatz von Batch-Prozessen durch **kontinuierliche Prozesse**. Während die großen petrochemischen Produkte sowie die Top 30 der organischen Commodity-Chemikalien kontinuierlich hergestellt werden, ist die Produktion in der Fein- und Spezialchemie in der Regel auf den Rührkessel festgelegt. Im Zuge der Anlageneffizienz und besseren Prozesskontrolle werden kontinuierliche Anlagen auch für niedrigtonnagige Produkte zunehmen, auch flexiblere Konzepte für kontinuierliche Mehrproduktanlagen sind in der Entwicklung.

Die Einführung der Pinch Point Methodik zur **Wärmeintegration** hat zu deutlichen Energieeinsparungen in Chemieanlagen geführt. Die Erweiterung solcher Ansätze auf Standorte bzw. unter Berücksichtigung von Wärmepumpen/Transformatoren bietet eine weitere Möglichkeit zur Verbesserung der Energieeffizienz. Darüber hinaus kann man diese Vorgehensweise zur effektiveren Nutzung und Integration von Prozesswasserströmen nutzen.

Die **Dynamisierung der Prozessführung** durch periodische Betriebsweisen kann als zeitliches Pendant zur räumlichen Strukturierung verstanden werden. Die pulsierte Extraktionskolonne führt durch die eingetragene Energie zur Vergrößerung der Phasengrenzfläche und damit zur Beschleunigung der Stofftransportvorgänge. Durch die Ansammlung und erst spätere Rückführung von Rücklauf bei Batch-Destillationen gewinnt man einen wichtigen Freiheitsgrad bei der Gestaltung von Konzentrations- und Temperaturprofilen. Durch periodische Variation der Flüssigkeitszufuhr in Rieselbettreaktoren erhöht man die Zugänglichkeit des Katalysators für die Gasphase und die Gleichmäßigkeit der Flüssigkeitsverteilung. Oft wird die zyklische Fahrweise zur Einstellung eines metastabilen Zustands, z.B. am Rande des Durchgehens, ausgenutzt. Die Modulation des variierten Betriebsparameters sollte eine Resonanz in der inhärenten Systemdynamik anregen. Bei der katalytischen Oxidation von Abgasen im Strömungsumkehrreaktor [Eigenberger/Matros] entspricht die Schaltfrequenz der thermischen Speicherzeit des katalytischen Festbetts. In der intrinsisch instationären chromatographischen Reaktionsführung im Simulated Moving Bed Reaktor können die Konzentrationsverhältnisse durch sogenannte asymmetrische Zyklen optimiert und gesteuert werden. Zur Steigerung des Stofftransports im Katalysatorkorn können periodische Druckschwankungen, die entweder extern auferlegt oder durch autonome gasbildende Vorgänge hervorgerufen werden, genutzt werden. Diese induzieren eine

konvektive Strömung, die den Diffusionstransport bei weitem übersteigt [Datsevitch]. Besonders die zuverlässige Modellierung dynamischer Prozesse stellt noch eine Herausforderung dar.

4.1.4 Biotechnologieproduktion der nächsten Generation

Triebkräfte für deutlich verbesserte biotechnologisch-basierte Herstellverfahren sind die deutlich verschärften Rahmenbedingungen in allen Bereichen unserer Gesellschaft, wie Ressourceneffizienz, Wettbewerbsfähigkeit, Nachhaltigkeit, aber auch Lebensqualität etc.. Hierbei können die verschiedenen Bereiche sowohl voneinander lernen wie auch gemeinsam neue Technologien entwickeln. So kann die pharmazeutische Biotechnologie die konsequente Prozessoptimierung der Nahrungsmittelindustrie besser adaptieren als bisher, z.B. durch Betrachtung kompletter Kreisläufe wie in anderen Bereichen (z.B. der Aminosäuresynthese) praktiziert. Daneben kann die Integration moderner biochemischer Analytik in die Prozessentwicklung und Produktionsüberwachung von Biotherapeutika dazu beitragen, Kosteneffizienz und Produktsicherheit zu erreichen. Die Einbeziehung kontinuierlicher und mikrostrukturierter Prozesselemente sowohl in der biopharmazeutischen wie der industriell-biotechnologischen Anwendung wird deutliche Fortschritte auf dem Weg zu Bioproduktionsanlagen bringen, die nurmehr um den Faktor 1000 grösser und ineffizienter sind als es Milliarden menschlicher oder tierischer Bioprozess-Prototypen seit langem vorleben.

4.2 Miniaturisierung

Die Miniaturisierung kann einen wichtigen Beitrag zur Entwicklung neuer Prozesse leisten, die eindeutige technische und wirtschaftliche Vorteile gegenüber herkömmlichen Apparaten anbietet, z.B: Intensivierung von Vermischen, Stoff- und Wärmeaustausch [Hessel]. Durch Miniaturisierung bzw. optimale Ausnützung einer mehrskaligen Prozessarchitektur („so groß wie möglich, so klein wie nötig“) kann man die asymptotische chemische Leistung eines Reaktionssystems erschließen. Die erfolgreiche Implementierung eines mikrostrukturierten Reaktors zur Herstellung industrieller Produktmenge wurde im Rahmen des DemiS-Projektes (Gasphasenoxidation von Propen durch Wasserstoffperoxid – Schirrmeister) demonstriert.

Abgesehen von erhöhten Selektivitäten und Ausbeuten sowie deutlich kleineren Reaktorinhalten ermöglicht die Miniaturisierung einheitlichere Prozessbedingungen auf der molekularen Ebene, die erhebliches Verbesserungspotential bezüglich der erzielbaren Produktqualitäten eröffnet. Dieses Potential zur Verringerung stochastischer Einflüsse, z.B. bei Emulsionspolymerisation, Kristallisation oder Herstellung von neuen Nanopartikeln, wurde oft nur unzureichend berücksichtigt.

Durch die Absenkung der Mengenschwelle, bei der sich ein kontinuierlicher Betrieb rentiert, können die ökonomischen Randbedingungen für neue Produkte begünstigt werden und dadurch deren Zugänglichkeit schon bei kleineren Kapazitäten ermöglicht werden. Weiterhin vereinfacht die Mikrotechnik eine Implementierung der Just-in-time Produktion.

4.2.1 Mikrostrukturierte Apparate

Mikrostrukturierte Apparate sind kontinuierlich betriebene Reaktoren, Mischer, Wärmeübertrager, aber auch andere verfahrenstechnische Apparate mit charakteristischen Abmessungen im Bereich von einigen 10 Mikrometern bis wenigen Millimetern. Scale-up Konzepte umfassen die Parallelisierung der Mikrostrukturen durch (internes oder externes) Numbering up unter Konstanthaltung oder nur leichter Veränderung der charakteristischen Abmessungen und der daraus resultierenden Mikroeffekte.

Aus der Miniaturisierung resultiert eine erhebliche Intensivierung des Wärme- und Stoffaustausches sowie kontrollierte Strömungsbedingungen und Verweilzeiten. Mikrowärmeübertrager bieten ca. 1000fach höhere Wärmeübertragungsleistung gegenüber Plattenwärmetauscher. Mikromischer erlauben charakteristische Mischzeiten bis in den ms-Bereich und mind. 10fach geringere volumenspezifische Arbeit verglichen mit dem Rührkessel.

Dies führt u.a. zu einer größeren Selektivität und höheren Ausbeute bei chemischen Reaktionen und damit auch zu einer höheren Energieeffizienz und Effektivität von Prozessen. Neue Synthesewege, wie die direkte Fluorierung am Aromaten, wurden in Mikroreaktoren beschrieben, ebenso wie die Durchführung extrem schneller, üblicherweise unter kryogenen Bedingungen gefahrener, Umsetzungen bei wesentlich milderen Bedingungen oder gar RT oder die stöchiometrische Umsetzung von Reaktanden ohne zusätzliche Lösungsmittel.

Die Handhabung von toxischen bzw. sicherheitstechnisch anspruchsvollen Produkten wird durch die geringen Hold-ups in miniaturisierten und modularisierten Anlagen erheblich erleichtert, wodurch auch die erforderlichen Genehmigungsverfahren verkürzt werden können. Infolge der kleinen Kanalabmessung eröffnen Mikrobauteile auch den Weg zum Betrieb im Ex-Bereich [Deutschmann]. Diese ‚fette‘ Fahrweise führt zu beträchtlichen Verkleinerungen bei den nachgeschalteten Aufarbeitungsstufen.

Im Gegensatz zu den Mikroreaktoren wurde die Mikroaufarbeitung bisher etwas stiefmütterlich behandelt. Die Umsetzung von Verfahren, die auf Temperaturgradienten bzw. Gegenstromführung der beteiligten Phasen beruhen, ist im Mikromaßstab äußerst problematisch. Dadurch ist das am häufigsten angewendete Trennverfahren, die Destillation, nicht auf die Mikroebene direkt übertragbar. Dafür gewinnen andere Trennverfahren, z.B. Extraktion, durch den möglichen Einsatz neuer Lösemittelsysteme, z.B. ionische Flüssigkeiten, an Bedeutung. Zur Realisierung einer Gegenstromfahrweise kann man entweder eine Gegenstromschaltung von Gleichstrommodulen, Trennwände zwischen den Phasen (Hohlfasermodule) oder zentrifugale Apparate einsetzen. Durch die hohen Oberflächen-zu-Volumen Verhältnisse in Mikrobauteilen kann man auch neuartige Trennverfahren, die bislang nur im Labor zum Einsatz kommen konnten, z.B. Elektrophorese, auch technisch erschließen. Die Kristallisation unter definierten Bedingungen könnte zu deutlichen Vorteilen bei der Produktformulierung und Reinheit führen, auch wenn einige Herausforderungen bezüglich Feststoffhandling noch zu lösen sind. Die Handhabung von Umsetzungen mit Feststoffanteilen ist problematisch und nicht prinzipiell gelöst.

Für die industrielle Implementierung sind grundlegende Konzepte des Scale up mittels numbering (equaling) up zu erarbeiten und modellmäßig zu erfassen, Designlösungen zur Fluidgleichverteilung und Mikro-Makro-Verbindung sind erforderlich. Erfahrung im Langzeitbetrieb und damit einhergehende Strategien der Wartung, Austausch von Elementen, Katalysatoren etc. sind zu erarbeiten.

4.2.2 Tropfen als chemischer Reaktor

Nicht als apparative Miniaturisierung aber definitiv als Miniaturisierung des Reaktionsraums sind Konzepte zur Reaktion in einzelnen Tropfen zu sehen. Dies umfasst Reaktionen in Miniemulsionen, wie die emulsionsgestützte Synthese nanoskaliger Feststoffpartikel. Beispiel ist die Miniemulsionspolymerisation, die das Ziel verfolgt, nanoskalige Monomertropfen unabhängig voneinander zu polymerisieren, wobei die Monomertropfen vor der Polymerisation und die Polymerpartikel nach der Polymerisation ungefähr die gleiche Größe haben.

4.3 Prozessausrüstung zur Intensivierung des Stofftransports und der Wärmeübertragung

Eine Vielzahl von Apparaten wurde entwickelt, um den Stofftransport oder die Wärmeübertragung zu intensivieren. Neben den bereits erläuterten mikrostrukturierten Apparaten soll in diesem Zusammenhang noch die **HIGEE Technologie** erwähnt werden, die auf der Anwendung hoher Zentrifugalkräfte im rotierenden Festbett basiert. Diese "Rotating Packed Beds" sind hauptsächlich für die Trenntechnik (Absorption, Extraktion, Destillation) entwickelt worden, das Prinzip kann aber auf Reaktionen, insbesondere bei Stofftransportlimitierungen, vorteilhaft übertragen werden.

Die Zahl der für die Prozessintensivierung potentiell einsetzbaren Apparate und deren Funktionsprinzipien ist hoch, ihre Aufzählung und Beschreibung würde den Rahmen dieses Positionspapiers sprengen. Im Rahmen der European Roadmap for Process Intensification der niederländischen Action Group PI wurden insgesamt über 60 PI Technologien identifiziert, von denen bisher 43 von Experten aus aller Welt ausführlich in „Technology Reports“ beschrieben und bewertet wurden. Es sei auf diese Übersicht verwiesen.

4.4 Neuartige Lösungsmittel

Die richtige Wahl des Reaktions- bzw. Trennmediums ist für die Effizienz chemischer und biotechnologischer Verfahren, aber auch für die Gestaltung von Produkten von großer Bedeutung. Der Ersatz organischer Lösungsmittel (volatile organic chemicals VOCs) durch umweltverträgliche Alternativen bietet neben ökologischen Vorteilen auch das Potential zur Entwicklung neuer, ökonomisch wettbewerbsfähiger Prozesse.

Alternative Lösungsmittel eröffnen das Potential zu neuen Synthesestrategien, da Reaktionswege in überkritischen oder ionischen Fluiden völlig anders als in herkömmlichen Medien verlaufen können.

Weiterhin unterscheidet sich das Lösevermögen solcher nichtkonventioneller Medien drastisch von demjenigen gängiger organischer Lösungsmittel, wodurch sich eine ganze Reihe neuer Perspektiven, beispielsweise bei der Katalysatorrückgewinnung, ergeben. Neue

reaktionstechnische Konzepte zur Integration von Stoffumwandlung und Stofftrennung, sowie die Realisierung von Reaktionskaskaden und kontinuierlichen Prozessen sind möglich. Ökologische Vorteile wie Rezyklierbarkeit und Reduzierung von Abfallströmen durch z.B. Vereinfachungen in der Produktaufarbeitung führen gleichzeitig auch zur Reduktion von Betriebskosten. Zu den verschiedenen alternativen Lösungsmitteln sei auf das Positionspapier „Advanced Fluids – neue Lösungsmittelkonzepte für die Prozess- und Produktoptimierung“ des DECHEMA-Arbeitskreises „Alternative Lösungsmittelsysteme für technische Anwendungen“ verwiesen, das die Basis für die nachfolgenden Bemerkungen bildet.

Ionische Flüssigkeiten sind Salze mit Schmelzpunkten von unter 100°C. Sie zeichnen sich durch ihre ionische Natur und insbesondere durch ihre extrem geringe Flüchtigkeit aus. Zahlreiche ionische Flüssigkeiten besitzen einzigartige Eigenschaftsprofile, die sich in neuen, effizienteren Verfahren gezielt nutzen lassen. Prozessanwendungen reichen von der Nutzung als Reaktionsmedium über die Mehrphasenkatalyse, bis hin zur Extraktivdestillation. Ein prominentes technisch realisiertes Prozessintensivierungsbeispiel ist z.B. der BASIL Prozess der BASF, in dem 1-Methylimidazol als Säurefänger fungiert, die als separate Phase anfallende ionische Flüssigkeit kann leicht abgetrennt und wieder der Reaktion zugeführt werden.

Überkritische Fluide vereinen die Eigenschaften von Gas- und Flüssigphase. Sie sind in der Lage Stoffe zu lösen, wobei die Lösungsmittleigenschaften durch geringe Änderungen von Druck und Temperatur variiert werden können.

Die technische Anwendung dieses Prinzips ist beispielsweise in der Naturstoffextraktion mit überkritischem Kohlendioxid (scCO₂) Stand der Technik. In jüngster Zeit wird das Potenzial von scCO₂ als ökologisch unbedenkliches und innovatives Lösungsmittel auch in einer Vielzahl von anderen technischen Prozessen erforscht und teilweise bereits genutzt. Überkritisches Kohlendioxid besitzt aufgrund seiner besonderen physikalisch-chemischen Eigenschaften ein faszinierendes Potenzial als Reaktionsmedium für eine nachhaltige Synthesechemie und insbesondere für katalytische Prozesse. Ein weiteres Anwendungsfeld sind Polymere, sowohl die eigentliche Polymerisation in allen ihren Facetten wie auch die Partikelgenerierung. Hier ist das Potenzial einen Prozess vollständig in scCO₂ durchzuführen gegeben - von der Reaktion über die Abtrennung von unreaktierten Stoffen, Nebenprodukten und Hilfsstoffen bis zur Produktkonfektionierung.

Überkritisches Wasser (scH₂O) ist ein weiteres faszinierendes Medium mit großem Anwendungspotenzial. Es kann nicht nur für die rückstandsfreie Zersetzung toxischer Abfälle (supercritical water oxidation, SCWO) eingesetzt werden, sondern findet zunehmend Anwendung und wissenschaftliches Interesse auch für selektive chemische Transformationen und in den Materialwissenschaften.

Polyethylenglykole (PEG) sind in unterschiedlichen Molekulargewichten kostengünstig kommerziell verfügbar, sind toxikologisch und öko-toxikologisch unbedenklich und biologisch vollständig abbaubar. Sie sind andererseits für viele Anwendungen chemisch inert und mit unterschiedlichsten Anforderungen kompatibel. Sie können in unterschiedlichen Prozessen als Lösungsmittel avisiert werden, ein besonders interessantes Potenzial weisen sie beispielsweise in Mehrphasensystemen zur integrierten Synthese und Stofftrennung auf.

Hyperbranched Polymers stellen ebenfalls eine neue Klasse von Flüssigkeiten dar, die sich durch einen extrem niedrigen Dampfdruck auszeichnen. Die Materialien sind mittlerweile in technischen Mengen zu attraktiven Preisen verfügbar und wurden bereits erfolgreich in der thermischen Trenntechnik als Entrainerflüssigkeiten eingesetzt.

Thermomorphe Lösungsmittelsysteme oder temperaturgesteuerte Lösungsmittelsysteme bestehen aus einer Mischung einer polaren Komponente L1 und einer unpolaren Komponente L2, die nicht oder nur sehr wenig miteinander mischbar sind. Eine mittelpolare, mit L1 und L2 mischbare Komponente dient als Lösungsvermittler. Die Mischungslücke zwischen L1 und L2 wird durch Temperaturerhöhung verkleinert, so dass Reaktionen bei hoher Temperatur im einphasigen System (ohne Stofftransportlimitierung) ablaufen können und eine Stofftrennung (z.B. Katalysator und Reaktionsprodukte) bei niedriger Temperatur in getrennten Flüssigphasen möglich wird. Diese Lösungsmittelsysteme werden erfolgreich bei homogenkatalysierten Reaktionen eingesetzt, bei denen die Rückführung des Katalysators in vielen Fällen essentiell für die Wirtschaftlichkeit des Verfahrens ist.

4.5 Strukturierte Katalysatoren und Trägermaterialien

Die Katalyse stellt ohne Zweifel eine Schlüsseltechnologie zur energie- und ressourceneffizienten chemischen Synthese dar und ist damit im Kontext der Prozessintensivierung unverzichtbar. Einhergehend mit multifunktionalen und strukturierten Reaktoren und reaktiven Trennverfahren ist die Entwicklung von multifunktionalen und strukturierten Katalysatorsystemen.

Auf der Ebene des Katalysatorkornes kann man verschiedene Funktionalitäten integrieren und strukturieren. Die zeolithische Katalyse, die formselektive Diffusion und Reaktion kombiniert, kann hier als Beispiel angesehen werden, auch wenn dieses meist nicht als solches wahrgenommen wird. Der diffusive Schutz aktiver katalytischer Materie vor Desaktivierung durch sogenannte Eiweißstrukturen dient als Instanz des strukturierten Katalysatordesigns. Zwischen den Grenzfällen der Vollintegration und der Segregation der Funktionalitäten kann sich eine Teilintegration als vorteilhaft erweisen. Auch in der homogenen Katalyse findet man Beispiele für hybride Katalysatorfunktionalitäten, z.B. die Wasserlöslichkeit der Zweiphasenkatalyse im Rhone-Poulenc-Hydroformylierungsverfahren.

Weitere Ansätze zur Katalysatorstrukturierung werden mit geschäumten Katalysatoren, katalytischen Durchflussmembranen und monolithischen Katalysatoren verfolgt. Sie können als Prozessintensivierungsmaßnahme im Sinne der Strukturierung bei mehrphasigen Reaktionen verstanden werden [Moulijn].

Monolithische Katalysatorstrukturen [vgl. ConNeCat-Roadmap, 2. Auflage, Kap. 6.4] sind eine moderne Alternative zu herkömmlichen Katalysatorgeometrien. Sie sind aus keramischen Materialien oder strukturierten Metallfolien aufgebaut und weisen eine Vielzahl von parallelen Mikrokanälen auf, auf deren Wänden eine katalytisch aktive Schicht aufgebracht ist (metallische Beschichtung durch Aufdampfen, Nanopartikel durch wash-coat). Sie eignen sich insbesondere für die Durchführung mehrphasiger Reaktionen, da sich bei geeigneten Reaktionsbedingungen eine Pfropfenströmung mit günstiger Stofftransportcharakteristik einstellt. Monolithe zeichnen sich durch hohe Oberfläche, geringe

Massentransportwiderstände und einen geringen Druckabfall aus, so dass Monolithreaktoren mit geringeren Druckverlusten als herkömmliche Festbettreaktoren betrieben werden. (1-2 Größenordnungen geringer als Trickle-Bed Reaktoren). Bei Prozessen, welche mit der Umwälzung großer Gasmengen (beispielsweise Hydrierungen) einhergehen, kann sich die Druckverlustsenkung in deutlich niedrigeren Investitions- und Betriebskosten für den Kompressor niederschlagen. Im Vergleich zu Slurry-Reaktoren wird die aufwändige Katalysatortrennung vermieden. Im Vergleich zu Rieselbettreaktoren kann durch die in Monolithen realisierbare Gas-Flüssig-Pfropfenströmung eine einheitliche Benetzung des Katalysators sichergestellt und die Ausbildung von Totzonen vermieden werden. Dies erhöht die Katalysatorstandzeit. Experimentelle Untersuchungen und rechnerische Modellierung zeigen ein besseres Verhalten in Bezug auf Stofftransport, Selektivität und Umsatz. Die Leistungssteigerung ist im Wesentlichen auf den intensiven Kontakt der Phasen in der Monolithstruktur und die kurzen Diffusionswege aufgrund des dünnen Flüssigkeitsfilms zurückzuführen. Da sich in Monolithreaktoren sehr dünne Katalysatorschichten realisieren lassen, ist eine Selektivitätssteigerung durch die Vermeidung von Folgereaktionen möglich. Bei schnell ablaufenden Reaktionen sinken dadurch außerdem die Kosten für die teilweise sehr teuren Edelmetall-Katalysatoren. Limitierend ist die geringe radiale Wärmeübertragung, durch die fehlende radiale Durchmischung. Hierdurch kann sich eine effiziente Wärmeabfuhr bei stark exothermen Reaktionen als problematisch erweisen.

Neben dem Einsatz von katalytisch aktiven Monolithen gibt es eine Reihe interessanter Arbeiten zur Verwendung von **schaumartigen Katalysatorstrukturen** oder katalytisch aktiven Fasern und Geweben. Keramische oder metallische Schäume als Trägermaterialien bieten im Vergleich zu monolithischen Katalysatoren eine verbesserte radiale Mischung, was auch zu verbesserter Wärmeabfuhr führt. Der Druckabfall solcher schaumartiger Strukturen ist allerdings höher als der von Monolithen.

In neuer Zeit werden vermehrt **Kohlenstoff-Nanotubes (CNT)** als Katalysatorträger und als Katalysator selbst untersucht [siehe ConNeCat-Roadmap, 2. Auflage, Kap. 6.4]. Im Gegensatz zu herkömmlichen Kohlenstoffträgern wie z.B. Aktivkohle, können Nanotubes reproduzierbar in den textuellen und chemischen Eigenschaften hergestellt und getunt werden. Dank ihres fullerenartigen Aufbaus weisen CNT eine besondere elektronische Struktur auf, die über Metall-Träger-Wechselwirkungen Einfluß auf die aufgetragene katalytische Komponente nimmt. Auch weisen CNT eine höhere Abriebstabilität auf. Kohlenstoff-Nanotubes können auch selbst katalytisch aktiv sein, z.B. in der oxidativen Dehydrierung von Ethylbenzol zu Styrol. Es finden zahlreiche Untersuchungen statt, Leitrüß als Polymerfüllstoff durch CNT zu substituieren, da erwartet wird, daß die Perkolationsschwelle aufgrund der graphitähnlichen Struktur bei niedrigeren Gewichtsanteilen erreicht werden kann, was zusätzlich die mechanischen Eigenschaften des Komposits verbessert. Für die hierzu notwendige großtechnische Produktion gewinnt die katalytische Herstellung immer mehr an Bedeutung, da im Gegensatz z.B. zur Laserablation als alternative Herstellmethode, wesentlich höhere Selektivitäten und Raumzeitausbeuten erreicht werden.

In den näheren Focus rücken zunehmend auch anorganische Nanotubes beispielsweise aus SiC, die durch Behandlung von CNT mit SiO-Dampf erhalten werden können. Diese zeigen als Träger für NiS₂ bei der katalytischen Oxidation von H₂S zu Schwefel eine vergrößerte

Schwefeltoleranz und katalytische Leistung gegenüber konventionell geträgerten Katalysatoren.

Aufgrund intensiver Forschungsarbeiten rücken **metallorganische Gerüstsubstanzen** (metal organic frameworks = MOFs) als mögliche Katalysatoren oder Trägermaterialien verstärkt in den Blickpunkt [siehe ConNeCat-Roadmap, 2. Auflage, Kap. 6.4]. Diese hochporösen kristallinen Materialien mit zum Teil extrem hohen Oberflächen (bis zu einigen 1000 m²/g) weisen eine breite Variationsmöglichkeit von Porosität und Oberfläche auf. Durch Variation von Metallion und verbrückendem organischen Molekül ist es prinzipiell möglich, eine Vielfalt von katalytisch aktiven Zentren zu generieren. Bislang ist aber über katalytische Eigenschaften hinaus - z. B. Stabilität unter Reaktionsbedingungen - der MOFs noch relativ wenig bekannt.

4.6 Gezielter Energieeintrag und unkonventionelle Energieformen

Der selektive und gezielte Eintrag von Energie in verfahrenstechnischen Grundoperationen (z.B. Reaktoren), auch unter Anwendung unkonventioneller Energieformen (z.B. Elektronen, Mikrowellen, Plasma, Licht, Ultraschall) stellt dabei eine elegante Methode zur Erreichung höchster Energieeffizienz in Prozessen dar. Dies ermöglicht gleichsam Zugang zu neuen Produkten mit neuen Funktionalitäten, die durch konventionelle Prozesse schwierig zu erhalten sind. Der gezielte Eintrag alternativer Energieformen ermöglicht die präzise Kontrolle von chemischen Umsetzungen und Reaktionswegen, und somit Zugang zu neuen Reaktionsstrategien mit überlegener Umsetzungsgeschwindigkeit, Ausbeute, und Selektivität. Auf diese Weise können Produkte mit definierter Morphologie und hoher Wertschöpfung entstehen.

Der volumetrische Wärmeeintrag durch Mikrowellen oder Scherkräfte durch rotierende Scheiben gestattet eine schonende Behandlung thermolabiler Stoffe.

Der Einsatz von UV Licht anstelle von chemischen Initiatoren gestattet einen kontrollierbaren Ablauf von Polymerisationsreaktionen unter Verzicht auf Hilfsstoffe, die die Produktqualität beeinträchtigen können. Obwohl der Energieeintrag sich für Ultraschall und Plasma sich nur bei einzelnen Spezialverfahren behaupten konnte, z.B. bei der Herstellung von Grignard Verbindungen und Acetylen, ist der energetische Wirkungsgrad solcher Verfahren noch steigerungsfähig. Durch den modularen Aufbau und die relativ milden Reaktionsbedingungen sind elektrochemische Verfahren für die Prozessintensivierung durchaus relevant. Obwohl die Elektrochemie eine Schlüsselrolle in der heutigen Chemischen Industrie einnimmt, blieb sie bislang auf einige wenige Anwendungen beschränkt. Durch die Entwicklung von neuen Membran Elektrolyseverfahren ergeben sich interessante Ansätze auf dem Gebiet der Elektrokatalyse, die zur Erschließung neuer elektrochemischer Synthesewege beitragen können.

5 Ausblick: Produktion der Zukunft

Künftige Produktion ist vor allem charakterisiert durch Nachhaltigkeit, d.h. den sorgsam und verantwortlichen Umgang mit Ressourcen. Dies bedeutet gezielten und effektiven Energieeinsatz, klimaneutrale Prozessgestaltung und vor allem auch minimierten Einsatz und bestenfalls reversible Belastung des immer wichtigeren Rohstoffs Wasser. Daraus resultiert in vielen Fällen eine dislozierte Produktion in die Nähe der Anwendung, um Logistikaufwand zu minimieren. Die Verkleinerung von Anlagen u.a. durch konsequenten Einsatz der Mikrosystemtechnik ist ein wichtiger Schritt auf diesem Weg ohne auf Prozessqualität zu verzichten.

Die Zielsetzungen der Fachsektion haben direkten Bezug hierzu und leisten ferner wesentliche Beiträge zu den Aktivitäten der Technologieplattform SusChem im Rahmen des FP7 der EU. Deshalb ist eine intensive Beteiligung an diesen Bemühungen erforderlich.

Wesentliche Forschungsfelder, die Innovationspotentiale auch für die Prozessintensivierung generieren, resultieren aus den Zielsetzungen und Technologiefeldern der diversen Processnet-Fachgemeinschaften und der Fachgemeinschaft Biotechnologie im Abgleich mit den Bedürfnisfeldern.

6 Literatur

- 1 A. I. Stankiewicz, J. A. Moulijn, *Chem. Eng. Prog.* **2000**, 1, 22
- 2 A. Hüther, A. Geißelmann, H. Hahn, *Chem. Ing. Tech.* **2005**, 77 (11), 1829
- 3 R. Franke, in *Modelling of Process Intensification* (Ed: F. J. Keil), Wiley-VCH, Weinheim **2007**
- 4 S. Becht, R. Franke, A. Geißelmann, H. Hahn, *Chem. Eng. Technol.* **2007**, 30 (3), 295