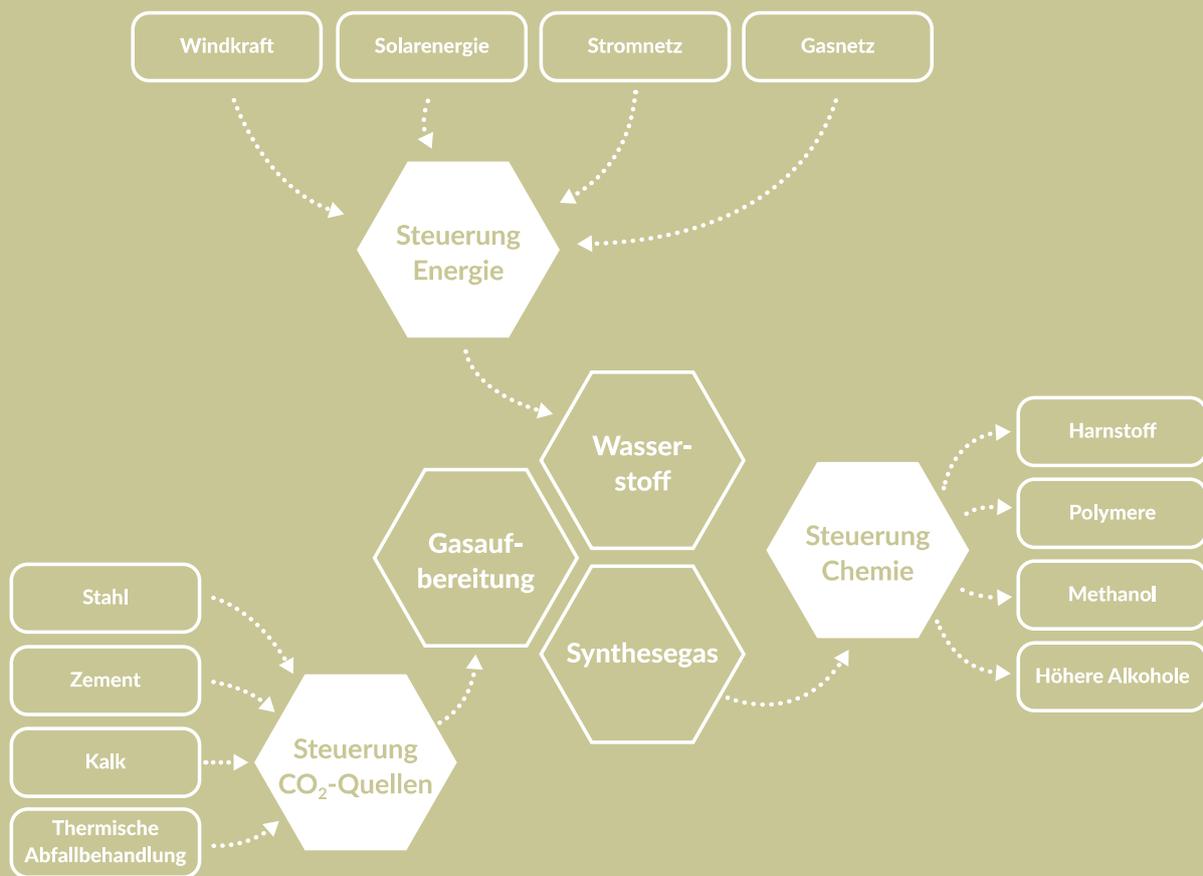


Carbon2Chem®

**CARBON2CHEM®**

**BAUSTEIN FÜR DEN  
KLIMASCHUTZ**





## Liebe Leserinnen und Leser,

Klimaneutralität ist unser festes Ziel. Erreichen können wir es in naher Zukunft nur mit innovativen Technologien. Und am besten setzen wir da an, wo unser Handeln am meisten bewirkt. Zum Beispiel in der Stahlproduktion. Denn noch sind die Emissionen in der Schwerindustrie besonders hoch. Gleichzeitig ist sie aber auch ein Standbein unseres Wohlstands.

Carbon2Chem® ist so eine innovative Lösung. Das Projekt zeigt, wie ein Umsteuern in der Stahlbranche funktionieren kann: nämlich indem wir CO<sub>2</sub> aus den Abgasen der Hochöfen auch im großindustriellen Maßstab auffangen und mithilfe von grünem Wasserstoff in Grund- und Kraftstoffe umwandeln. Als ich das erste Mal davon gehört habe, war ich sofort begeistert. Vor allem: Diese Innovationen lassen sich sogar auf andere energieintensive Betriebe, wie Kalkbrennereien und Müllverbrennungsanlagen, übertragen. Das nenne ich echten Fortschritt.

**Bettina Stark-Watzinger**  
Mitglied des Deutschen Bundestages  
Bundesministerin für Bildung und  
Forschung

Und noch etwas gefällt mir: Bei Carbon2Chem® verknüpft der interdisziplinäre Verbund aus Technologieführern und Forschungsinstitutionen die Forschung eng mit dem Transfer. Das Projekt eröffnet dadurch neue Perspektiven für den Klimaschutz und zugleich vielversprechende Chancen für den Technologieexport. Carbon2Chem® ist für mich ein herausragendes Beispiel dafür, wie wir mit Forschung und Innovationen unsere Zukunft nachhaltig gestalten können.

Mit Projekten wie Carbon2Chem® schaffen wir den klimaneutralen Wohlstand der Zukunft.  
Ich wünsche Ihnen eine informative Lektüre!

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium  
für Bildung  
und Forschung

# Motivation

Die Erderwärmung auf 1,5 Grad Celsius im Vergleich zur vorindustriellen Zeit zu begrenzen – so lautet die Zielsetzung des Pariser Klimaabkommens. Die Verringerung des Ausstoßes an Treibhausgasen bildet dabei ein zentrales Element. Für die Europäische Union heißt das: eine Reduktion der Emission an Kohlendioxid (CO<sub>2</sub>) um 55 Prozent bis 2030 sowie Klimaneutralität bis 2050.

Auf dem Weg zur Klimaneutralität steht allerdings gerade die Grundstoffindustrie vor großen Herausforderungen. Kohlendioxid entsteht nicht nur bei der Bereitstellung der erforderlichen Energie, sondern entsteht auch im Zuge der Produktionsprozesse. Eine Dekarbonisierung der Prozesse wird im Zuge der Energiewende daher nicht in allen Bereichen gelingen. Auch in Zukunft werden industrielle Prozesse Kohlendioxid ausstoßen – z. B. die Herstellung von Stahl, Zement oder Kalk sowie die thermische Abfallbehandlung. Auf der anderen Seite ergibt sich ein großer Bedarf an nicht fossilem Kohlenstoff bei der Herstellung chemischer Produkte. Die Frage, wie sich das unvermeidbare CO<sub>2</sub> industrieller Punktquellen auffangen und für die chemische Industrie nutzen lässt, steht im Zentrum des Verbundvorhabens Carbon2Chem®.

Die Antwort lautet: über Carbon Dioxide Capture and Utilization (CCU). Zentrales Element für das Gelingen ist eine Defossilisierung der Prozesse durch die Transformation der industriellen Produktionsprozesse im Zuge der Energiewende. Das Konsortium im Vorhaben Carbon2Chem® arbeitet an cross-industriellen Produktionsnetzwerken, deren modularer Aufbau die Abscheidung und Nutzung prozessbedingten Kohlendioxids in verknüpften Strukturen an vorhandenen Industriestandorten ermöglicht. Die Produkte dienen als Ausgangsstoffe bei der Produktion synthetischer Kraftstoffe, Kunststoffe oder weiterer Basischemikalien.

Neben der technischen Entwicklung ist die Verbindung von Klimaschutz und Wettbewerbsfähigkeit sowie der Dialog mit Fachwelt und Gesellschaft fester Bestandteil des Vorhabens. Vor 2030 sollen die Ergebnisse des Vorhabens einen spürbaren Beitrag zur Verringerung des Ausstoßes an Treibhausgasen sowie des Einsatzes fossiler Rohstoffe in der Industrie leisten. Die Machbarkeit der technischen Lösungen und ihre positive Wirkung konnten in der ersten Projektphase vom Projektkonsortium gezeigt werden.

Das Konsortium ist überzeugt: **Carbon2Chem® ist ein zentraler Baustein für den Klimaschutz.**

## Gesamtziel des Vorhabens



**Bereitstellung von technischen Lösungen zur Umsetzung des Transformationsprozesses in der Industrie im Rahmen der Energiewende zur Erreichung der Klimaziele**

# Carbon2Chem® auf einen Blick

## Lösungen

- Beitrag zur Defossilisierung und Dekarbonisierung der Produktionsprozesse mithilfe der Integration erneuerbarer Energien
- Eine durchgängige Systembetrachtung und -bewertung zur Gegenüberstellung der Lösungsansätze nach technischen, ökologischen und ökonomischen Kriterien
- Nutzen von unvermeidbarem CO<sub>2</sub> der Industrie, z. B. aus der Herstellung von Stahl, Zement und Kalk sowie der thermischen Abfallbehandlung, zur Deckung des Kohlenstoffbedarfs in der chemischen Industrie
- Entwurf adaptiver Schnittstellen zwischen den Prozessen unter Beachtung der Dynamik der verschiedenen Prozesse mit dem Ziel einer gleichbleibenden Produktqualität
- Schließen von Kreisläufen zum Erreichen der Treibhausgasneutralität
- Entwurf von cross-industriellen Netzwerken zur optimierten energetischen und stofflichen Kopplung der unterschiedlichen Produktionsprozesse und der Schaffung einer branchenübergreifenden Wertschöpfung
- Bereitstellung einer modularen Lösung mit Möglichkeiten zur Übertragung auf andere Anwendungen



## Förderung

Das Vorhaben wird durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) gefördert. Die Förderung beträgt insgesamt ca. 135 Millionen Euro. Ungefähr 60 Millionen Euro für Phase 1 (2016 bis 2020) und ungefähr 75 Millionen Euro für die Phase 2 (2020 bis 2024).

## Dialog

Das Vorhaben unterstützt aktiv den Dialog zur Umsetzung der Energiewende. Neben der projekteigenen Konferenzreihe zur nachhaltigen chemischen Konversion organisiert das Konsortium themenbezogene Workshops zum Austausch mit der Fachwelt und der Gesellschaft. Neben Fachvorträgen und -artikeln sowie einer Vielzahl wissenschaftlicher Arbeiten wurden bisher drei Themenhefte in der Fachzeitschrift Chemie Ingenieur Technik (CIT) herausgeben.



# Struktur als Erfolgsfaktor

Das Vorhaben Carbon2Chem® gliedert sich prozessbedingt in fünf Teilbereiche:

→ Die **Systemintegration** verknüpft die Ergebnisse aller Partner zu einem Gesamtkonzept. Mithilfe von verschiedenen Werkzeugen zur Modellierung und Simulation evaluiert und optimiert die Systemintegration die erarbeiteten Lösungsansätze.

1

→ Die potenziellen **CO<sub>2</sub>-Quellen** sowie die zugehörige **Infrastruktur** – aktueller Stand und perspektivische Entwicklung – bilden den Ausgangspunkt.

2

→ Zentrales Element ist die **Gasaufbereitung**, die neben der Gasreinigung auch die Gaskonditionierung beinhaltet.

3

→ Auf Basis von CO<sub>2</sub> ist eine Vielzahl von Produkten denkbar. Mit Blick auf eine zeitnahe Umsetzung und die mögliche Hebelwirkung wird in Carbon2Chem® an Lösungen für die **Synthese** von Methanol, Harnstoff, höheren Alkoholen und Polymeren gearbeitet.

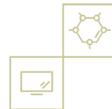
4

→ Die Form und die Anforderungen der **Anwendung** hinsichtlich Qualität, Menge und Verfügbarkeit der Produkte bestimmen maßgeblich die vorgelagerten Prozessschritte und die Gesamtbilanz, daher ist sie Bestandteil der Vorhabensstruktur.

5

Ein Konsortium aus Wissenschaft und Industrie bearbeitet das Vorhaben partnerschaftlich in mehreren Teilprojekten. Wesentlicher Punkt hierbei ist die klare Ausrichtung auf eine großtechnische Umsetzung der technischen Lösungen vor 2030. Entsprechend werden alle Teilprojekte durch Fachleute aus der Industrie geleitet. Die Berücksichtigung von Aspekten der betrieblichen Praxis erfolgt so wesentlich direkter.

Der Austausch zwischen den Teilprojekten wird durch die Gesamtkoordination sichergestellt. Daneben existieren Fach-Communitys innerhalb des Projekts zu übergreifenden Themen wie Prozessdesign, Simulation, Nachhaltigkeitsbetrachtung sowie Labor und Technikum. Der vielschichtige Dialog der Fachleute unterschiedlicher Disziplinen aus Wissenschaft und Industrie hat sich im Laufe des Projekts etabliert und stellt nun einen Erfolgsfaktor des Vorhabens bei der Entwicklung cross-industrieller Lösungen dar.



# Gesamtkoordination

Ein weiteres Merkmal des Vorhabens ist die Zusammenarbeit von Grundlagenforschung, angewandter Forschung und Industrie, deren Abstimmung die Gesamtkoordination sicherstellt. Nur auf diese Weise lässt sich der Weg von der Idee bis zur Umsetzung in den drei gesetzten Phasen des Vorhabens erreichen. Die drei Bereiche werden wie folgt vertreten:

## Angewandte Forschung

Als Institut, dessen Leitsatz „Produzieren ohne Rohstoffe“ ist, passen wir hervorragend in dieses Projekt. Das **Fraunhofer-Institut für Umwelt-, Sicherheits- und Energietechnik UMSICHT** forscht bereits seit einigen Jahren in Projekten, die sich zum Ziel gesetzt haben, sowohl den CO<sub>2</sub>-Ausstoß als auch den Abbau fossiler Rohstoffe weiter zu reduzieren und stattdessen „Abfallprodukte“ wie Hüttengase, die bei der Stahlproduktion zwangsläufig entstehen, zu nutzen, um sie für die Produktion von Chemikalien wie Methanol zu verwenden. Deshalb wollen wir mit Carbon2Chem® den Kohlenstoff im Kreislauf führen, sodass er nicht freigesetzt, sondern nach der Entstehung vor Ort nachhaltig weiter verwertet wird.

Prof. Dr. Görgе Deenberg  
Projektkoordinator

## Industrie

**thyssenkrupp** leistet hier als erstes Industrieunternehmen, zusammen mit der Wissenschaft und anderen Partnern aus der Industrie, Pionierarbeit. Es geht uns hierbei nicht um eine einzelne Lösung, sondern um einen Baukasten von Lösungen, die auch von anderen Hütten und Branchen genutzt werden können. Am Ende sollen alle Technologiemodule miteinander verknüpfbar sein. Die erste Anwendung im industriellen Maßstab nehmen wir im Stahlbereich – einem sehr CO<sub>2</sub>-intensiven Industriezweig – vor. Damit leisten wir im industriellen Umfeld eine Vorarbeit, um die Module auch auf andere Industriezweige ausweiten zu können. Was uns als diversifiziertem Konzern wieder zugutekommt.

Dr. Markus Oles  
Projektkoordinator

## Grundlagenforschung

Am **Max-Planck-Institut für Chemische Energiekonversion** finden wir Wege, Energie effizient in speicherbare und nutzbare Formen umzuwandeln. Hier suchen wir dabei vor allem nach geeigneten Katalysatoren für die dazu notwendigen chemischen Reaktionen. In aller Regel versucht die Industrie, CO<sub>2</sub> durch Vermeidung einzusparen, und hierzulande arbeitet die Industrie bereits mit dem minimalen Einsatz von Kohlenstoff. Eine komplette Vermeidung ist jedoch nicht möglich. Mit Carbon2Chem® entwickeln wir für diese Industrien ein Baukastenprinzip, aus dem sich Module zur Umsetzung der Energiewende generieren lassen.

Prof. Dr. Robert Schlögl  
Projektkoordinator



## Unsere Vertreter der Forschung

*„Grundlagenforschung ist die Basis jedweder zukünftigen Realisierbarkeit. Die Untersuchung des Einflusses sich ständig wechselnder Parameter der Hüttenabgase ist essenzielle Voraussetzung, bevor großtechnische Anlagen in Carbon2Chem® errichtet werden können.“*

Julian Schittkowski  
Max-Planck-Institut für  
Chemische Energiekonversion

*„Die besondere Herausforderung im Projekt liegt darin, das Methanol mit Gasgemischen herzustellen, die heute so nicht verwendet werden.“*

Andreas Menne  
Fraunhofer UMSICHT

Im wissenschaftlichen Bereich ist das Konsortium mit den beteiligten Forschungspartnern und ihren Kompetenzen breit aufgestellt. Die direkte Zusammenarbeit der Grundlagenforschung und der angewandten Forschung in diesem Umfang ist dabei ein wesentliches Merkmal von Carbon2Chem®. Gemeinsam wurden schrittweise im Laufe des Vorhabens Methoden, Werkzeuge und Kompetenzen der Partner miteinander verknüpft. Die Grundlagenforschung lieferte in der Phase 1 des Vorhabens wichtige Erkenntnisse für die Technologieauswahl und Konzepterstellung. Ein wesentliches Element waren hierbei die analytischen Fähigkeiten, die im Rahmen des Projekts bedarfsgerecht entwickelt wurden.

Obwohl mit der Methanol- und Harnstoffsynthese bekannte Technologien ausgewählt wurden, bestand und besteht noch Forschungs- und Entwicklungsbedarf. Ein Grund hierfür sind bis zu mehrere hundert verschiedene Spurenstoffe, die sich in den Prozessgasen der Industrie finden. Auch die unterschiedliche Dynamik der Prozesse ist bei der Kopplung grundsätzlich und unter wirtschaftlichen Gesichtspunkten zu berücksichtigen. Dies ist ein Aspekt, der durch die Zusammenarbeit von Grundlagenforschung und angewandter Forschung gemeinsam gelöst werden kann.

Durch den Verzicht auf die fossilen Rohstoffe im Zuge der Defossilisierung der industriellen Prozesse besteht auch ein Bedarf an neuen Prozessen, die eine Verwendung des Kohlendioxids ermöglichen. Insbesondere zum Aufbau einer zirkulären Kohlendioxidwirtschaft ist eine innovative Kombination der Prozessbausteine erforderlich. Die Partner der beteiligten Hochschulen und Institute bündeln hierfür ihre Kompetenzen aus unterschiedlichen Fachbereichen.

 **Fraunhofer**  
ISE

  
MAX-PLANCK-INSTITUT  
FÜR CHEMISCHE ENERGIEKONVERSION



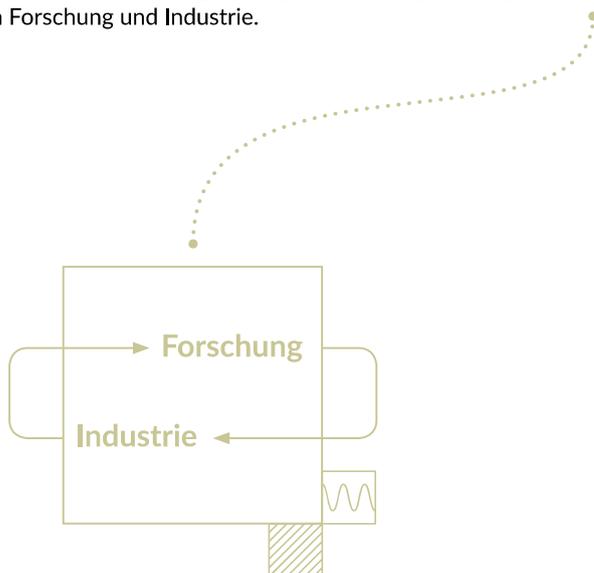
 **Fraunhofer**  
UMSICHT

  
Max-Planck-Institut  
für Kohlenforschung

RUHR  
UNIVERSITÄT  
BOCHUM **RUB**

Mit ihren verfahrenstechnischen und mathematischen Kompetenzen entwickelten die Forschungspartner in Zusammenarbeit mit der Industrie die notwendigen Modelle zur Beschreibung der Prozesse und ihrer technischen Komponenten. Die unterschiedlichen Detailgrade der Modelle erlauben eine bedarfsgerechte Simulation und Optimierung. In Kombination mit den experimentellen Untersuchungen sind Aussagen zum langfristigen Verhalten verschiedener Komponenten und Aggregate möglich.

Neben dem Transfer bekannter Technologien und Prozesse für die Anwendung im Vorhaben arbeiten die Forschungspartner auch an der Entwicklung neuer Prozesse und Komponenten, um weitere Optionen für CCU-Anwendungen in der Industrie zu schaffen. Die erfolgreich evaluierten Technologien der Phase 1 werden in Phase 2 des Vorhabens weiter für eine industrielle Umsetzung skaliert. Der Übergang vom Labor zum Technikum ist dabei ein wesentlicher Schritt. Bei der Bewertung der Ergebnisse erfolgt ein enger Austausch zwischen Forschung und Industrie.



*„Modelle und Simulationen sind Werkzeuge, die es ermöglichen, komplexe Zusammenhänge zu durchschauen. Langfristiges Verhalten wird im Handumdrehen betrachtet und kritische Vorgänge werden sicher untersucht. So lassen sich Szenarien vergleichen und Optima identifizieren.“*

Christian Geitner  
Fraunhofer UMSICHT

*„Bei der Umgestaltung der Grundstoffindustrie hin zu einer treibhausgasneutralen Produktion werden Kohlendioxid und Wasserstoff zwei Schlüsselkomponenten sein, die es sicher und rechtskonform zu transportieren, zu speichern und zu verarbeiten gilt.“*

Ulrich Seifert  
Fraunhofer UMSICHT



## Unsere Vertreter der Industrie

*„Unser Produktportfolio leistet in unterschiedlichen Anwendungen bereits wesentliche Beiträge zu Nachhaltigkeit und Umweltschutz. Nun ist es an der Zeit, auch den Produktionsprozess der Kalkherstellung im Sinne der Klimaneutralität zu denken.“*

Thomas Perterer  
Lhoist Germany

*„Es gibt sehr viele Projekte und Initiativen für Klimaschutz und eine nachhaltige Zukunft der Chemie- und Stahlindustrie mit vielen interessanten Ideen, Konzepten und Ambitionen. Bei Carbon2Chem® werden die Visionen konkret umgesetzt und deren Machbarkeit direkt im industriellen Umfeld nachgewiesen.“*

Matthias Krüger  
thyssenkrupp  
Industrial Solutions

Die Struktur der industriellen Vertreter des Konsortiums steht für die zentralen Branchen der geplanten cross-industriellen Produktionsnetzwerke. Die Unternehmen bringen ihre Kompetenzen als führende Vertreter ihrer jeweiligen Märkte aktiv in die tägliche Projektarbeit ein. Anhand ihrer Expertise erfolgt die Bewertung der technischen, ökonomischen und ökologischen Machbarkeit der Lösungen im Projekt Carbon2Chem®. Nach der Evaluation der Machbarkeit von CCU-Lösungen am Beispiel der Hütte in Duisburg am Ende der Phase 1 konnten Vertreter weiterer Branchen, aus der Kalkindustrie und aus der Kreislaufwirtschaft, als Partner gewonnen werden.

Seit dem Beginn des Projekts hat die Planung und Umsetzung von Maßnahmen zur Umsetzung des Klimaschutzes in der Industrie deutlich an Dynamik gewonnen. Bestehende integrative Systeme wie z. B. die integrierte Hütte müssen neu gedacht werden. Die Unternehmen bringen aktuelle Entwicklungen und strategische Ausrichtung der tangierten Branchen in die Projektarbeit ein. Arbeitspläne und Entwicklungsansätze können somit immer wieder an die Entwicklungen im Umfeld des Projekts angepasst werden. Die perspektivische Realisierung der Lösungskonzepte erfordert die Bereitstellung modularer Bausteine, um später eine Umsetzung in Form cross-industrieller Produktionsnetzwerke an unterschiedliche Produktionsanlagen adaptieren zu können.

Die Entwicklung neuer Prozesssysteme ist in der Kombination des Konsortiums aus Forschung und Industrie umfänglich möglich. Die Expertise der Partner aus der Industrie liefert dabei immer wieder den notwendigen Benchmark für die Entwicklungstätigkeiten. Durch die enge Kooperation kann nicht nur die Entwicklung der Prozesse, sondern auch ihre Erprobung in unterschiedlichen Maßstäben sichergestellt werden.

**CLARIANT**

**EVONIK**  
Leading Beyond Chemistry

**Linde**  
Making our world more productive

**covestro**

**Lhoist**

**NOBIAN**  
A Nouryon company

Wesentlich für das Gelingen der CCU-Lösungen sind zwei Elemente. Zum einen die Bereitstellung eines geeigneten Synthesegases für die Synthese der Zielprodukte. Hierzu sind im Vergleich zu heute üblichen Verfahren zusätzliche Schritte zur Abscheidung, Reinigung und Konditionierung des CO<sub>2</sub> erforderlich. Zum anderen wird eine nachhaltige Wirkung der Konzepte nur mit der Einbindung erneuerbarer Energien möglich sein. Der effiziente Einsatz von Energie und Ressourcen ist beim Prozessdesign wesentlich, weshalb Möglichkeiten zur Sektorkopplung im Projekt untersucht werden.

Die Entwicklungen im Vorhaben eröffnen der chemischen Industrie eine Option zur Defossilisierung ihrer Prozesse. Technische, ökonomische und ökologische Kriterien müssen dabei im Einklang gedacht werden. CCU-Lösungen müssen dynamisch gestaltet werden, damit eine gleichbleibende Produktqualität bei schwankenden Einsatzgasen gewährleistet werden kann.

Mit Blick auf die Phase 3 des Vorhabens werden noch weitere Partner erforderlich sein, die mit ihrer Expertise die Entwicklung cross-industrieller Netzwerke unterstützen und zur Umsetzung bringen.



*„Wasserstoff – unabhängig davon, ob regenerativ erzeugt oder aus industriellen Prozessen zurückgewonnen – wird eine zentrale Rolle in der zukünftigen Energielandschaft einnehmen. Regenerativ erzeugte Energie kann mithilfe von Wasserstoff transportiert und gespeichert werden. Des Weiteren sind Sektorkopplungen wie beispielsweise zwischen Stahlproduktion und petrochemischen Prozessen denkbar. Diese sind für die Umsetzung der Energiewende unabdingbar.“*

Jürgen Nowicki  
Linde Engineering

*„In diesem Projekt wurden Voraussetzungen geschaffen, um sowohl CO als auch CO<sub>2</sub> aus dem Konvertergas in die Polymerherstellung einbauen zu können.“*

Stefanie Eiden  
Covestro Deutschland GmbH

**OBRIST**  
DE

**SIEMENS**  
energy

**THYSSEN VERMÖGENSVERWALTUNG**  
GESELLSCHAFT MIT BESCHRÄNKTER HAFTUNG

**REMONDIS**  
IM AUFTRAG DER ZUKUNFT

**SIEMENS**

**thyssenkrupp**

# Systembetrachtung

## Beschreibung

Ein zentrales Merkmal und Ergebnis des Vorhabens ist die Systembetrachtung. Sie ist ein wesentlicher Teil der übergeordneten Arbeiten im Vorhaben. Die Systembetrachtung führt die einzelnen Ergebnisse aus den Teilprojekten von Carbon2Chem® zusammen und liefert die Grundlage für weitere Detailuntersuchungen in den Teilprojekten. Mithilfe der Systembetrachtung werden die verschiedenen Prozesskonzepte anhand von technischen, ökologischen und ökonomischen Kriterien evaluiert.

## Technische Entwicklungen

Regelmäßig werden Begleitstudien zum Stand des Wissens im Projekt durchgeführt. Anhand der Ergebnisse werden die Arbeiten im Projekt bewertet und der Arbeitsplan angepasst. Die aktuellen Entwicklungen der verschiedenen Branchen in Richtung Treibhausgasneutralität fließen dabei ebenfalls in die Systembetrachtung ein.

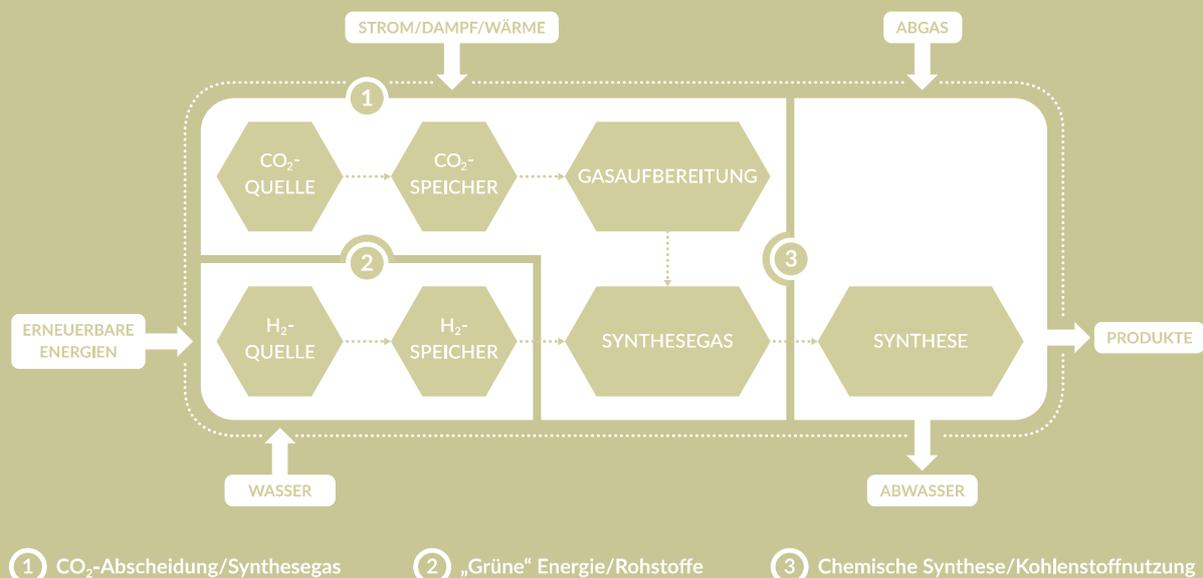
## Modellierung und Simulation

Ein Kernelement der Systembetrachtung bildet die Modellierung und Simulation, um das Zusammenwirken unterschiedlicher Anlagenteile in einem cross-industriellen Netzwerk anhand einer Gesamtsimulation abbilden und analysieren zu können. Die ausgearbeiteten Konzepte zum Verbund werden mittels der Simulationen der Prozesse in Hinblick auf ihr stationäres und instationäres Verhalten untersucht. Diese Simulationen liefern einen wichtigen Beitrag für eine zielgerichtete Auslegung des Netzwerkverbundes sowohl in technischer als auch wirtschaftlicher Hinsicht.

Im Rahmen des Vorhabens wurde eine werkzeugübergreifende Simulationsplattform geschaffen, die eine Verknüpfung von verfahrenstechnischer und energietechnischer Betrachtung mit der Nachhaltigkeitsbetrachtung ermöglicht. Die Grundlage bildete eine umfangreiche Modellbibliothek.

Die Simulationen dienen für ausgewählte Konzepte zur Entwicklung von Steuerungs- und Regelungskonzepten für eine sichere und effiziente Betriebsweise des Anlagenverbundes. Teilmodelle der Simulation ergänzen die Daten der Experimente in Labor und Technikum bzw. liefern die Vorgaben für die Experimente.

## Verfahrenstechnische Simulation



### Verfahrenstechnische Simulation

Die Planung der verfahrenstechnischen Simulation erfolgt in den Fach-Communitys. Je nach Simulationsszenario und Anforderung können bestimmte Betriebspunkte in hochdetaillierten verfahrenstechnischen Modellen verifiziert und genauer überprüft werden. Ein solcher Simulationsfall kann dabei Zeiträume bis zu einem Jahr umfassen, um saisonale Effekte zu berücksichtigen.

Abhängig von der Fragestellung einer bestimmten Simulationsaufgabe sind Modelle mit unterschiedlichen Detaillierungsgraden notwendig, um eine angemessene Antwort zu bekommen. Dementsprechend enthält die Modellbibliothek jeweils mehrere Implementierungen für ein Modul, um dann das am besten geeignete Modell innerhalb eines gegebenen Simulationskontextes auszuwählen. Die Prozesssimulation beruht auf der mathematischen Modellbildung physikalischer Vorgänge.

Die simulierten Prozesskonzepte unterscheiden sich hinsichtlich des synthetisierten Produkts, der genutzten Hüttengase (Art und Menge) sowie der genutzten technischen Komponenten (z. B. Gaskonditionierung, Gasspeicherung). Jeder Simulationsfall bezieht sich auf eine spezifische Kombination dieser Punkte und liefert eine Aussage über die zeitlich verarbeiteten Massen- und Energieströme. Die Simulationsergebnisse dienen der ökologischen und wirtschaftlichen Analyse als Grundlage.

### Prozesslogistische Simulation

Mit einem prozesslogistischen Optimierungsmodell werden Szenarienrechnungen durchgeführt, um den optimalen Betriebsfahrplan für den zukünftigen gesamten Anlagenverbund zu erhalten. Der optimale Fahrplan kann in Abhängigkeit von dem jeweiligen Kriterium in der Zielfunktion (Strom-, Speicher-, Wasserstoffszenarien usw.) berechnet werden.

Beim energetischen Vergleich der Prozesskonzepte sind Aspekte wie die Bereitstellung von Wasserstoff über eine Elektrolyseanlage, die Verwendung von Puffern und Speichern oder die Aufbereitung der Prozessgase usw. zu beachten. Hierzu gehören auch Integrationsrouten für Stoff- und Wärmeströme sowie Aussagen zum zugrunde liegenden Energiesystem. Neben den denkbaren Systemkonzepten ist die zukünftige Entwicklung beteiligter Märkte für Edukte, Produkte, Strom und CO<sub>2</sub>-Zertifikate für eine Investitionsentscheidung ausschlaggebend. Diese Marktentwicklungen werden in Form von Szenarien bei der Simulation berücksichtigt.

Die Ergebnisse aus der prozesslogistischen Simulation sind die Datengrundlage für die weiteren Berechnungen der Ökobilanz.

### Ökobilanz

Mit Ökobilanzen (Life Cycle Assessment) werden die potenziellen ökologischen Wirkungen der verschiedenen Prozesskonzepte evaluiert. Ausgangspunkt für den Vergleich der Prozesskonzepte bildet in jedem Fall der heutige Produktionsprozess, der als Benchmark für die weiteren

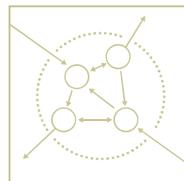
Konzepte dient. Für die cross-industriellen Netzwerke in Carbon2Chem® wurde eine normierte Methode für die vergleichende Ökobilanzierung auf Basis der ISO 14040/44 entwickelt.

### Regulatorische Rahmenbedingungen

Die Systembetrachtung berücksichtigt auch die regulatorischen Rahmenbedingungen, da sie die Entwicklung und spätere Umsetzung maßgeblich beeinflussen. Die Rahmenbedingungen können sich dabei auf Produktvorgaben, Sicherheitsaspekte, formale oder wirtschaftliche Aspekte beziehen.

### Fach-Communitys

Der Austausch der Fachleute der einzelnen Teilprojekte über Fortschritt, Anpassungen und Ergebnisse erfolgt regelmäßig. Die Fach-Communitys für Prozessdesign, Simulation und Nachhaltigkeitsbetrachtung stimmen die Simulationsfälle sowie das Vorgehen gemeinsam ab. Die Ergebnisse der Systembetrachtung stehen allen Partnern für Detailbetrachtungen zur Verfügung.



# Carbon2Chem<sup>®</sup>-Labor

Ein weiteres zentrales Element des Vorhabens ist das Carbon2Chem<sup>®</sup>-Labor. Es liegt auf dem Campus des Fraunhofer UMSICHT in Oberhausen und umfasst ca. 500 m<sup>2</sup> Fläche und ca. 30 Büroarbeitsplätze. Es dient der Grundlagenforschung in den Bereichen katalytische Herstellung von Methanol und höheren Alkoholen, der Gasreinigung und der Entwicklung von Analyseprozessen. Die Fläche steht dem Konsortium zur gemeinsamen Forschung und Entwicklung im Labormaßstab zur Verfügung.

Im Fokus der Forschenden: das Verhalten verschiedener Katalysatoren und die dynamische Fahrweise der Prozesse. Die Ergebnisse dienen als Grundlage für die Arbeiten im Technikum. Konkret werden u. a. das Scale-up von Komponenten und Prozessen realisiert sowie optimale Betriebspunkte, Regelstrategien und Fahrweisen ermittelt.

## Analytik und Gasgenerator

Die geeignete Analytik für die Erfassung der wichtigen Leitkomponenten und identifizierter Spurenstoffe musste zu Beginn des Vorhabens erst entwickelt werden. Ergänzend wurde ein Gasgenerator-System im Carbon2Chem<sup>®</sup>-Labor aufgebaut, um Gasmischungen (z. B. Hüttengase) zur Abstimmung der Analytik simulieren zu können.

Die erreichten Analytikfähigkeiten erlauben die Identifizierung potenzieller Verunreinigungen (Katalysatorgifte etc.) auch in komplexen Strukturen im ppb- bis ppt-Bereich sowie die Quantifizierung und Analyse (z. B.

Fragmentierungsmuster) von kritischen Komponenten. Spurenverbindungen können sowohl in den unbehandelten und behandelten Hüttengasen als auch in Flüssigproben identifiziert und quantifiziert werden. Mittels der entwickelten Analytik ist auch eine Unterstützung der Parameteroptimierung (Verdünnungsfaktor, Kollisionsenergie, Druck, Temperatur etc.) im Labor möglich.

## Katalysatortests

Das Labor dient u. a. dem Katalysatorscreening im Rahmen der Katalysatorentwicklung für die Synthese höherer Alkohole. Das eingesetzte „Spider“-Testsystem ist darauf ausgelegt, acht Katalysatoren parallel zu testen. Es stellt eine Zwischenstufe zwischen klassischer Einzeluntersuchung und High-Throughput Screening dar. Zielsetzung ist die Betrachtung des Einflusses wichtiger Reaktionsparameter und der Vergleich unterschiedlicher Katalysatorgenerationen unter identischen Bedingungen. Die Optimierung der Betriebsparameter ist die Variation der Verweilzeiten und die Parameteroptimierung (Reaktionstemperatur, Reaktionsdruck, Gaszusammensetzung etc.).

## Test von Spurenstoffen

Teil der Grundlagenforschung ist es, den Langzeiteffekt verschiedener in den Realgasen enthaltener Spurenstoffe auf die Katalysatoren zu untersuchen. Auch die Wirkung der Spurenstoffe auf die Produktqualität ist Teil der Laboruntersuchungen. Dies liefert wichtige Erkenntnisse für die Auslegung der Gasreinigung, die wiederum maßgeblich die Wirtschaftlichkeit der Prozesskonzepte bestimmt.



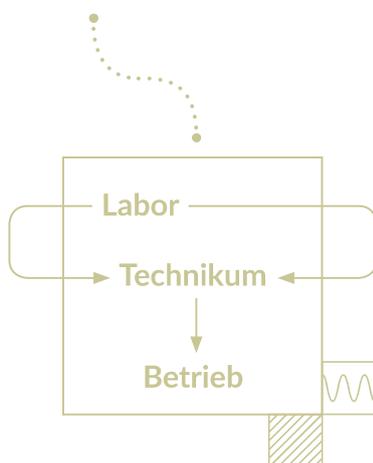
# Carbon2Chem<sup>®</sup>-Demonstrationsanlage

Im September 2018 wurde erstmals Methanol aus realen Hüttengasen im Carbon2Chem<sup>®</sup>-Technikum am Stahlwerk Duisburg erzeugt. Seit Juli 2019 ist am Carbon2Chem<sup>®</sup>-Labor in Oberhausen die Carbon2Chem<sup>®</sup>-Demonstrationsanlage in Betrieb. Mit der Demonstrationsanlage wird ein weiterer Skalierungsschritt bei der Entwicklung der Methanolsynthese durchlaufen. Ab 2022 produziert die Anlage im Carbon2Chem<sup>®</sup>-Technikum in Duisburg bis zu 75 Liter Rohmethanol (Gemisch aus Methanol und Wasser) am Tag aus Realgasen des Stahlwerks.



Trotz der geringen Produktionskapazität weist die Anlage alle wesentlichen Konstruktionsmerkmale einer großskaligen Anlage auf. Das Reaktorrohr besitzt einen Durchmesser von 42 Millimetern bei einer Länge von 6 Metern, nicht reagiertes Synthesegas wird nach Abtrennung der flüssigen Produkte in den Reaktor zurückgeführt. Die verbauten Gasanalysatoren sowie die Temperaturmessung entlang der Reaktorachse mit 36 Messstellen liefern einen genauen Einblick in den Prozess und erlauben eine detaillierte Auswertung der Katalysatoraktivität über die gesamte Reaktorhöhe.

Die Anlage ermöglicht in Kombination mit der verfahrenstechnischen Simulation die Produktion von Methanol aus Synthesegas mit einem beliebigen Verhältnis zwischen Kohlendioxid und Kohlenmonoxid. Bekannte Schwankungen in der Zusammensetzung bei realen Prozessgasen können so nachgebildet werden. Die Anlage steht stellvertretend für die fortschreitende Skalierung im Projekt vom Labor zum Technikum hin zur Anwendung.



# Carbon2Chem®-Technikum

Das Carbon2Chem®-Technikum umfasst eine Fläche von 3700 m<sup>2</sup>. Durch seine Lage – angrenzend an das thyssenkrupp-Gelände in Duisburg, eingebunden in das Leitungsnetzwerk – ermöglicht es den Zugang zu Hüttengasen und damit die technische Umsetzung bisher entwickelter Konzepte unter realen Bedingungen. Seit seiner Inbetriebnahme im September 2018 dient das Technikum als erste Demonstration eines cross-industriellen Verbundes mit der kompletten Prozesskette und realisiert die Sektorenkopplung zwischen Stahl und Chemie.

Schwerpunkte der Forschungsarbeit: Reinigung und Konditionierung der realen Hüttengase sowie die Wasserelektrolyse, um zusätzlichen Wasserstoff für die chemische Synthese bereitzustellen. Diese Gase werden in Pilotanlagen zu Methanol, Ammoniak sowie höheren Alkoholen umgesetzt.

Die Untersuchungen im Technikum dienen dem Nachweis der Katalysatorperformance und Stabilität mit Synthesegasen aus realen Hüttengasen. Der Aufbau ermöglicht die Validierung des Gasreinigungskonzeptes zur Synthesegaserzeugung mittels des Vergleichs zwischen den Versuchen mit realen und synthetischen Synthesegasen.

Wie beim Carbon2Chem®-Labor bietet das Technikum den Projektpartnern eine einzigartige Möglichkeit, an einem zentralen Ort unter einheitlichen Bedingungen zusammenzuarbeiten. Die Kompetenzen werden vernetzt und die Verknüpfung der unterschiedlichen Disziplinen schafft die Grundlage für die großindustriellen Lösungen.



→ 240  
m<sup>3</sup>  
Hüttengas/  
Stunde



②

### Gasreinigung

Die Gasreinigung ist eine der Schlüsseltechnologien von CCU-Anwendungen und damit auch der Prozesskette im Technikum. Sie kann ca. 240 Kubikmeter Hüttengas pro Stunde verarbeiten. Dabei muss das Gas von Verunreinigungen befreit werden, sodass es den hohen Reinheitsanforderungen an Synthesegas entspricht. Die Grundlage für die Betriebsführung bilden die Ergebnisse der Analytik zu den Verunreinigungen sowie den Laborergebnissen potenzieller Katalysatorgifte.

Im Laborgebäude werden ergänzende Verfahren zur Entfernung von Spurenstoffen erprobt. Die ausgewählten Verfahren wurden in Phase 1 des Vorhabens unter Laborbedingungen positiv validiert. Das Technikum bietet die Möglichkeit, die Verfahren zu skalieren und mit realen Gasen zu erproben.

### Laboranlagen

Im Laborgebäude des Technikums erfolgt die vergleichende Untersuchung der Synthesen mit realen und synthetischen Synthesegasen aus dem Carbon2Chem®-Labor. Im Falle des Methanols und des Ammoniaks dienen kommerziell verfügbare Katalysatoren als Grundlage.

Die gemessene Katalysatorperformance und Stabilität wird dabei mit konventionellen Prozessen verglichen. Der Einfluss von Verunreinigungen in den Hüttengasen sowie von Anpassungen der Katalysatoren dienen der Validierung des Gasreinigungskonzeptes zur Synthesegaserzeugung.

Mit den im Labor entwickelten Analytikmethoden wird im Carbon2Chem®-Technikum die Funktionsweise der Gasreinigung hinsichtlich der Spurenstoffe kontrolliert und überwacht. Die aufgebaute Infrastruktur zeichnet sich durch eine kontinuierliche Online-Messung der gereinigten Gase und Identifizierung aller Haupt- (%-Bereich), Neben- (‰- bis ppm-Bereich) und Spurenverbindungen (ppb- bis ppt-Bereich) aus. Die Analytik hilft dadurch bei der Durchführung von Langzeitkampagnen und der Optimierung der Prozessparameter (Druck, Temperatur etc.).

### Elektrolyse

Die Einbindung erneuerbarer Energien in Form von grünem Wasserstoff für die chemische Synthese ist das zweite zentrale Element für die Umsetzung von CCU-Anwendungen. Die Kerntechnologie ist die Wasserelektrolyse, bei der mithilfe erneuerbarer Energien aus Wasser Wasserstoff hergestellt wird. Im Technikum wurde im Vorhaben eine zwei Megawatt Wasserelektrolyse-Anlage gebaut.

Für die positive Klimabilanz des Carbon2Chem®-Vorhabens ist es entscheidend, dass die Elektrizität für die Wasserelektrolyse nicht aus fossilen, sondern aus erneuerbaren Quellen stammt, die durch ihre Volatilität gekennzeichnet sind. Entsprechend ist ein Schwerpunkt der Entwicklungsarbeit bei der Wasserelektrolyse, das Verhalten der Anlage bei schwankender Energieversorgung zu untersuchen. Die Ergebnisse liefern wichtige Erkenntnisse für die Planung der Wasserstoffversorgung einer späteren großtechnischen Umsetzung.



# Vom Technikum zur Anwendung

## Gesamtsicht

Für die Entwicklung der notwendigen Prozesse und Technologien ist die spätere Anwendung der Produkte wesentlich. Der Markt für die Produkte von CCU-Prozessen entwickelt sich und das Konsortium arbeitet mit potenziellen Anwendern der entwickelten Technologien zusammen. Zudem beeinflussen die Anforderungen an die Produkte aus Anwendersicht die Auslegung und Optimierung der Produktrouten.

Zentrale Produktrouten im Vorhaben sind Methanol, Harnstoff, höhere Alkohole und Polymere. Sie dienen im Weiteren als Basisprodukte für die chemische Industrie bzw. als Grundstoff für die Bereitstellung synthetischer Kraftstoffe.

## Skalierung

Schrittweise nähert sich das Projekt wie geplant dem Industriemaßstab. Mit der Demonstrationsanlage vollzieht das Konsortium den nächsten Skalierungsschritt bei der Herstellung des Methanols. Aus einigen Millilitern im Labor werden einige Liter am Tag.

Ging es am Anfang des Projekts nur um die Gestaltung des Prozesses an sich, steht nun auch die Frage der Optimierung und der Steuerung der Prozesse im Fokus. Die Dynamik an der CO<sub>2</sub>-Punktquelle muss im Weiteren berücksichtigt werden. Die Zusammensetzung und Menge der Gase aus der Produktion schwankt je nach Quelle und Produktionszyklus.

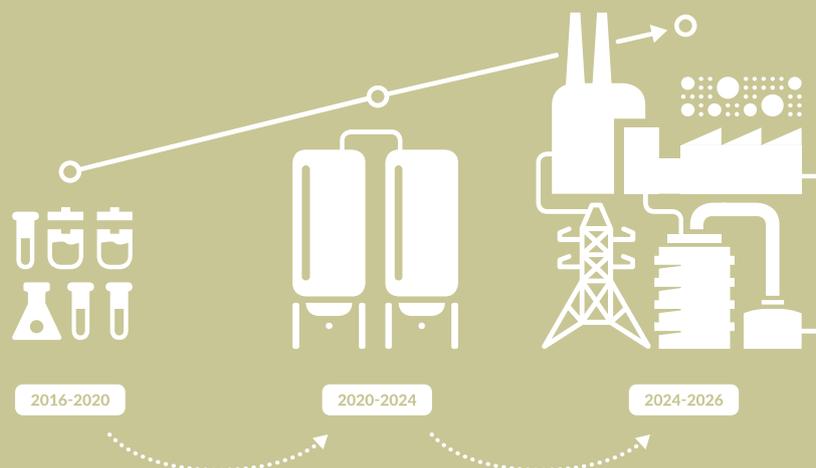
Die Bereitstellung der erneuerbaren Energien ist dabei das zentrale Element. Die Versorgung mit grünem Wasserstoff ist bei jedem weiteren Skalierungsschritt Bestandteil der Systembetrachtung. Der Import und die Speicherung des Wasserstoffs in ausreichenden Mengen sind ein fester Bestandteil der Planungen im Vorhaben.

## Anwendung Transport

Eine Anwendung ist die direkte Nutzung des erzeugten Methanols für den Transportbereich. Die Obrist GmbH arbeitet an einem seriellen Hybridantrieb, der in Verbindung mit einem Elektroantrieb die erneuerbaren Energien in Form des erzeugten Methanols bereitstellt. Im Rahmen von Carbon2Chem® entwickelt das Team im entsprechenden Teilvorhaben das Konzept, erarbeitet die Vorgaben für das Methanol und erprobt erste Fahrzeuge in der Praxis.

## Zirkuläre Wirtschaft

Rohstoff- und Energieeffizienz sind wesentlich für eine positive Gesamtbilanz bei der Umsetzung der geplanten cross-industriellen Netzwerke. Zirkuläres Denken ist in diesem Rahmen integraler Bestandteil für die industrielle Transformation im Zuge der Energiewende. Mit den nächsten Entwicklungsschritten wird das Vorhaben die Umsetzung einer zirkulären Wirtschaft unterstützen. Carbon2Chem® wird hierbei ein zentraler Baustein für den Klimaschutz in der Industrie sein.



## IMPRESSUM

Geschäftsstelle Carbon2Chem®  
geschaefsstelle@c2c-cluster.de  
[www.c2c-cluster.de/kohlenstoffkreislauf.html](http://www.c2c-cluster.de/kohlenstoffkreislauf.html)

#Carbon2Chem

### Bildquellen

Seite 3: Bundesministerium für Bildung und Forschung  
Seite 7, 14, 15: Fraunhofer UMSICHT/Mike Henning  
Seite 16, 17: thyssenkrupp

Design: manx.de

