



**Abfallvermeidung bei
Produktionen für organische
Spezialchemikalien durch
den Einsatz
weiterentwickelter
Katalysatoren**

**Fachgespräch zum UBA-Forschungsprojekt
(FKZ 201 94 313)**

Diese TEXTE-Veröffentlichung kann bezogen werden bei
Vorauszahlung von 7,50 Euro
durch Post- bzw. Banküberweisung,
Verrechnungsscheck oder Zahlkarte auf das

Konto Nummer 4327 65 - 104 bei der
Postbank Berlin (BLZ 10010010)
Fa. Werbung und Vertrieb,
Ahornstraße 1-2,
10787 Berlin

Parallel zur Überweisung richten Sie bitte
eine schriftliche Bestellung mit Nennung
der **Texte-Nummer** sowie des **Namens**
und der **Anschrift des Bestellers** an die
Firma Werbung und Vertrieb.

Herausgeber: Umweltbundesamt
Postfach 33 00 22
14191 Berlin
Tel.: 030/8903-0
Telex: 183 756
Telefax: 030/8903 2285
Internet: <http://www.umweltbundesamt.de>

Redaktion: Fachgebiet III 2.3
Dr. Steffi Richter

Berlin, April 2003

Inhaltsverzeichnis

1.	Vorwort	2
2.	Programm	4
3.	Eröffnung	6
4.	Diskussion zum Stand und Perspektiven selektiver katalytischer Verfahren	8
4.1.	Präsentation und Diskussion des Forschungsvorhabens	8
4.1.1.	Anmerkungen zur Konzeption und bisherigen Ergebnissen des Forschungsvorhabens	9
4.1.2.	Schlussfolgerungen für die weiteren Untersuchungen	10
4.2.	Maßnahmen für die Förderung selektiver Katalysetechniken....	12
4.3.	Fazit.....	14
5.	Präsentationen	
5.1	Dr. Steffi Richter (Umweltbundesamt)	16
5.2	Dr. Kurt Wagemann (DECHEMA).....	25
5.3.	Prof. Dr. Matthias Beller (Universität Rostock)	43
5.4.	Dr. Frank Marscheider – Weidemann (Fraunhofer – Institut ISI)	61

Teilnehmerliste

1. Vorwort

Rund 90% aller Chemieprodukte durchlaufen während ihrer Herstellung ein katalytisches Verfahren. Somit werden ein Großteil chemischer Produkte überhaupt erst durch den Einsatz von Katalysatoren einer großtechnischen Produktion zugänglich. Ihr Einsatz trägt zur Einsparung von Energie und Ressourcen, sowie ihre Selektivität und Spezifität zur Vermeidung von Abfällen, Nebenprodukten und Hilfsstoffen bei. Die Katalyse kann somit als zukunftsweisende Schlüsseltechnologie eingestuft werden. Katalytische Verfahrenskonzepte sind dazu geeignet, die chemischen Produktionen nachhaltiger gestalten.

Wesentliche Effekte zur Umweltentlastung sind insbesondere im Bereich der Feinchemikalien zu vermuten. Auf Grund deren meist komplexer Synthese über mehrere Reaktionsstufen und der in zunehmenden Maße geforderten Enantiomerenreinheit chiraler, als Racemate anfallender Substanzen entstehen große Mengen an unerwünschten Nebenprodukten, deren Menge durch Katalysatoren deutlich reduziert werden könnte. Als typische Produkte sind Pharmazeutische Chemikalien, Pflanzenschutzmittel, Biozide und organische Pigmente zu nennen.

Bezogen auf den Bereich der Chemieproduktion insgesamt ist in dem Segment der Fein- und Spezialchemikalienproduktion von einer überdurchschnittlichen Wachstumsrate auszugehen. Dies wäre – bei unveränderten Produktionsweisen – mit einer Zunahme des Ressourcenverbrauchs und anfallender Abfallmengen verbunden. Vor diesem Hintergrund stellte sich die Frage, inwieweit fortgeschrittene, hoch selektiv arbeitende Katalysatorsysteme einen Beitrag zur Verbesserung der Umweltverträglichkeit von Prozessen in der chemischen Produktion leisten können.

Das Umweltbundesamt hat daher eine Studie zu

„Abfallvermeidung bei Produktionen für organische Spezialchemikalien durch den Einsatz weiterentwickelter Katalysatoren“

in Auftrag gegeben, die zur Zeit vom Fraunhofer-Institut für Systemtechnik und Innovationsforschung (ISI), Karlsruhe erstellt wird und in deren Rahmen auch mit Fachexperten erste Ergebnisse und das Konzept der Studie diskutiert wurden.

Anhand der die Ergebnisse der Studie soll ein Überblick über den Stand des Wissens und die Entwicklungstrends in einem innovativen Teilbereich der chemischen Industrieproduktion - der selektiven Katalyse - gegeben werden. Es soll analysiert werden, welche hochselektiven und innovativen Katalysatorsysteme in Zukunft in die Großproduktion überführt oder in chemischen Syntheseverfahren eingesetzt werden können. Es ist darzustellen, welche Umweltauswirkungen und -entlastungen - mit dem Schwerpunkt auf dem Abfallbereich - durch die Weiterentwicklung der Selektivität von katalytischen

Verfahrenskonzepten zu erwarten sind und welche Hemmnisse und Möglichkeiten der Förderung es gibt.

In einem Fachgespräch wurde die Thematik mit Vertretern aus Industrie, Behörde und Wissenschaft im September 2002 umfassend diskutiert. Die Ergebnisse sind in den vorliegenden Proceeding – Band zusammen gefasst.

Die vom Umweltbundesamt in Auftrag gegebene Studie sowie die Vorträge und Diskussionsbeiträge des Fachgespräches haben bestätigt, dass katalytische Verfahren Schlüsseltechnologien für die Umsetzung nachhaltiger Produktionsverfahren in der chemischen Industrie sind. Die Selektivität und Reaktionsbedingungen, bei denen möglichst geringe Mengen an Nebenprodukten gebildet werden, sind von besonderer Bedeutung. Bei den Produktionsverfahren für Feinchemikalien ist ein signifikantes Umweltentlastungspotenzial vorhanden, das durch die Förderung selektiver Katalysator-techniken erschlossen werden kann.

2. Programm

Fachgespräch „Abfallvermeidung bei Produktionen für organische Spezialchemikalien durch den Einsatz hochspezifischer Katalysatoren“

am 24. September 2002

im Umweltbundesamt, Berlin, Bismarckplatz 1

Sitzungsleitung: Prof. Jens Weitkamp, Universität Stuttgart

Programm

- 10.00 Begrüßung
(DirProf'in Jutta Penning, Umweltbundesamt, FBL'in III)
- 10.10 Hintergrund und Ziele des Forschungsvorhabens - Element einer nachhaltigen anlagenbezogenen Chemieproduktion
(Dr. Steffi Richter, Umweltbundesamt, FG III 2.3)
- 10.20 Zwischenergebnisse des Projekts und Vorstellung des Konzepts der Bezifferung des Abfallvermeidungs-Potenzials
(Dr. Frank Marscheider – Weidemann, Fraunhofer ISI Karlsruhe)
- 10.40 Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
(Dr. Kurt Wagemann, DECHEMA Frankfurt a.M.)
- 11.00 Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der Forschung
(Prof. Matthias Beller, Universität Rostock)
- 11.20 Diskussion des Standes von Forschung und Entwicklung und mögliche sowie „un“mögliche Perspektiven

Grundlage: Zwischenbericht zum Forschungsvorhaben sowie Thesen
- 13.00 Mittagspause
- 14.00 Zwischenbilanz zur bisherigen Diskussion und Fortsetzung
- ca. Schlussbemerkung, Verabschiedung
15.30 *(Prof. Jens Weitkamp, Dr. Steffi Richter)*

3. Eröffnung

DirProf'in Jutta Penning

Leiterin des Fachbereiches des Umweltbundesamtes

„Umweltverträgliche Techniken, Verfahren und Produkte“ im Umweltbundesamt

Liebe Gäste, liebe Kolleginnen und Kollegen,

ich möchte Sie ganz herzlich im Umweltbundesamt zu unserem Fachgespräch

"Abfallvermeidung bei Produktionen für organische Spezialchemikalien durch den Einsatz weiterentwickelter Katalysatoren"

willkommen heißen.

Ich freue mich, dass wir offensichtlich mit dieser Thematik, die wir hier aufgegriffen haben und mit Ihnen heute diskutieren wollen, ein sehr breites Interesse in verschiedenen Bereichen der Forschung, aber auch in der Industrie finden.

Dieser Workshop ist Teil einer umfassenden Studie, die das Fraunhofer-Institut für Systemtechnik und Innovationsforschung (ISI), Karlsruhe, im Auftrag des Umweltbundesamtes durchführt.

Wir im Umweltbundesamt beschäftigen uns mit der Technik der selektiven Katalyse, aber auch mit anderen innovativen Techniken, natürlich vor allem im Hinblick darauf, welche Beiträge diese Techniken zur Umsetzung nachhaltiger Produktionsweisen und Konsummuster leisten können.

Es gibt, das wissen Sie sicherlich als Expertinnen und Experten besser als ich, eine ganze Reihe von Technikentwicklungen, über die derzeit sowohl in der Fachwelt als auch in der interessierten Öffentlichkeit diskutiert und gesprochen wird. Und auch wenn diese Techniken, wie z. B. die Nanotechnik, die Biotechnik und die Mikrosystemtechnik, denen wir ein Potenzial zur Verminderung von Hilfsstoffen oder Energie zuweisen, als Schlüsseltechnologien bezeichnet werden, ist man sich, so ist zumindest unser Eindruck, in der Fachwelt noch nicht in jeder Hinsicht darüber einig, welche konkreten Risiken und Potenziale damit verbunden sind.

Derzeit ist aus unserer Sicht noch nicht klar erkennbar, ob hier Entwicklungen hochgejubelt und überschätzt werden oder sich auf der anderen Seite gar in einem Umfang durchsetzen werden, die zu konkreten strukturellen Umbrüchen in ganzen Bereichen der Produktion oder aber bei der Anwendung von Produkten führen können.

Welche Bedeutung diese Innovationen speziell für den Umweltschutz haben werden, ist derzeit ebenfalls ein weites Feld für Spekulationen.

Das Umweltbundesamt möchte die Diskussion aufgreifen, um sich Klarheit darüber zu verschaffen, welche Potenziale und Risiken zu erwarten sind. Dazu wollen wir uns einen Wissensstand über den derzeitigen Stand der Technik und die zukünftigen Potenziale bei Techniken und Anwendungen erarbeiten und uns mit den Sichtweisen der Fachöffentlichkeit auseinandersetzen.

Wir hoffen vor allem auch darauf, dass wir auf der Basis dieser Diskussionen Möglichkeiten und Chancen für die Verringerung des Ressourceneinsatzes bei Produktion, Weiterverarbeitung und Anwendung identifizieren und dazu im Rahmen unserer Instrumente fördernd agieren können.

Im Rahmen dieses Projektes wollen wir mit dem Fachgespräch ergründen, inwieweit der Einsatz selektiver katalytischer Verfahren in der Chemie- und Mineralölindustrie zu einer gezielten Vermeidung oder wenigstens Verminderung der Bildung von Nebenprodukten im chemischen Produktionsprozess und damit auch zur Verminderung von Abfällen beitragen wird. So könnte uns die Technik als ein Teilelement dem Ziel der nachhaltigen Produktion näher bringen.

In diesem Sinne darf ich Ihnen für den heutigen Tag eine interessante und spannende und - wo es nötig ist - durchaus auch kontroverse Diskussion wünschen.

4. Diskussion zum Stand und Perspektiven selektiver katalytischer Verfahren

Das Umweltbundesamt leitet ein, indem es Ziel und Anliegen der Untersuchung von innovativen Techniken insgesamt in Hinblick auf ihre Potenziale und Risiken im Rahmen der Förderung von nachhaltigen Produktionsverfahren und Konsummustern erläutert (vgl. Kap. 5.1).

Herr Dr. Kurt Wagemann (DECHEMA) und Herr Prof. Dr. Matthias Beller (Universität Rostock) stellen für das anwesende Fachpublikum in Präsentationen den Stand der Entwicklung katalytischer Verfahrenstechniken dar (vgl. Kap. 5.2 und 5.3).

Die Teilnehmer sind sich einig darüber, dass katalytische Verfahren als Schlüsseltechnologien für die Umsetzung nachhaltiger Produktionsverfahren in der chemischen Industrie anzusehen sind. Die Fachexperten sind sich auch grundsätzlich darüber einig, dass **Selektivität und nebenproduktarme Reaktionsbedingungen** wichtige Randbedingungen sind, vor deren Hintergrund Katalyseverfahren weiterentwickelt werden.

4.1. Präsentation und Diskussion des Forschungsvorhabens

Den Teilnehmern lag ein Zwischenbericht zum Forschungsvorhaben des Umweltbundesamtes vor. Außerdem stellt Herr Dr. Marscheider-Weidemann (ISI, Karlsruhe) in seiner Präsentation die Ziele und den Bearbeitungsstand des Forschungsvorhabens vor (vgl. Kapitel 5.4). Er erläutert das Konzept, mit dem die potentielle Vermeidung von Abfällen durch fortgeschrittene Katalysatorsysteme, ausgehend von den derzeit anfallenden Abfallmengen, abgeschätzt werden soll.

Auf der Grundlage des vorliegenden Berichtes und der Präsentation wurden

- die methodische Herangehensweise,
- die bisherigen Ergebnisse und
- geplante Arbeitsschritte

diskutiert.

Im Vorfeld wird von einigen der anwesenden Experten darauf hingewiesen, dass im Zwischenbericht zum Forschungsvorhaben die Biokatalyse thematisch überrepräsentiert sei. Es ist davon auszugehen, dass alle drei Arten der Katalyse, nämlich die

- heterogene Katalyse,
- homogene Katalyse und
- Biokatalyse

auch in Zukunft mit einer gewissen Dominanz der heterogenen Katalyse für die chemische Synthese gleichrangige Bedeutung haben werden. Die Biokatalyse gewinnt allerdings an Bedeutung. Nach Auffassung der Experten ge-

hört die Zukunft einem Ansatz, in dem a priori keines dieser Gebiete von vornherein bevorzugt, sondern das für die spezifische Synthese leistungsfähigste Verfahrensprinzip angewendet wird.

4.1.1. Anmerkungen zur Konzeption und bisherigen Ergebnissen

Das Konzept zum Forschungsvorhaben, das von derzeit statistisch erhobenen Abfallmengen ausgeht, wird thematisiert. Zur Methodik werden von den Experten folgende Hinweise gegeben:

- Es fehlt eine Definition und trennscharfe Abgrenzung zwischen
 - tatsächlich anfallendem Abfall aus der chemischen Produktion, der für die Bewertung der selektiven Katalyse relevant ist,
 - Nebenprodukten, die nicht in der Abfallstatistik erfasst werden (weil sie z. B. in Produktionsverbundsystemen weiterverwertet werden), und
 - weiterem nicht relevantem Abfall (z. B. Bauschutt etc.).

Dies sind aber wichtige Informationen, die für das Ziel der Abschätzung zukünftiger Einsparpotentiale zu berücksichtigen sind.

- Es ist davon auszugehen, dass die Daten für diese Abgrenzung von Abfall- und Nebenproduktarten mit großen Unsicherheiten behaftet sind, die in die Abschätzung zukünftiger Vermeidungspotenziale eingehen. Somit sind zukünftige Vermeidungspotenziale ausgehend von derzeitigen bekannten Abfallmengen nur mit großen Unsicherheiten zu extrapolieren. Insbesondere bei der Spezial- und Feinchemikalienproduktion kommt es aufgrund der großen Anzahl von Reaktionsstufen zu einem Multiplikatoreffekt in jeder zusätzlichen Prozessstufe, der sich nur schwer mit Faktoren beziffern lässt.
- Ein wichtiger Aspekt zur Vermeidung von Abfällen in der chemischen Produktion sind Produktionsverbundsysteme an und zwischen Produktionsstandorten, in die Nebenprodukte eingespeist und für andere Produktionen weiter verwertet werden. Dieser Aspekt der Abfallvermeidung durch Weiterverarbeitung ist für den Zweck der Untersuchung kaum transparent zu machen.
- Es wird darauf hingewiesen, dass bei einer generellen Betrachtung eines Vermeidungspotenzials in Hinblick auf die anfallende Anfallmenge der Aspekt der Gefährlichkeit der Abfälle vernachlässigt und somit bezüglich des Risikos ggf. eine unvollständige Aussage getroffen wird. So könnte beispielsweise die Vermeidung einer kleinen Menge sehr gefährlichen Abfalls umweltrelevanter sein als die einer großen Menge wenig gefährlichen Abfalls. Im Rahmen des Forschungsvorhabens ist hierzu keine Betrachtung vorgesehen.

- Die statistisch erhobenen Abfallmengen stammen aus einer Vielzahl von Produktionsverfahren, nicht allein aus katalytischen Prozessen. Die Information über den Herkunftsbereich ist aber notwendig für eine genaue Abschätzung von Vermeidungspotenzialen im Rahmen dieses Forschungsvorhabens.
- Es wird darauf hingewiesen, dass der Einsatz von selektiven Katalysatoren in einzelnen Verfahrensstufen nicht grundsätzlich zu einer Reduzierung des Ressourceneinsatzes führen muss. Es ist notwendig, nicht ausschließlich isolierte Reaktionsstufen, sondern auch die Auswirkungen in der gesamten Synthesekette zu betrachten. Insofern ist es für die Optimierung der Feinchemikalienproduktion allein nicht ausreichend, sich ausschließlich auf die Katalysatorentwicklung zu konzentrieren. Verfahrenstechnischen Optimierungen kommt ebenfalls eine sehr große Bedeutung zu, um eine Weiterentwicklung chemischer Produktionsprozesse aus Umweltsicht zu erreichen. Somit ist eine integrierte Optimierung unter Berücksichtigung aller Optionen für die Einsparung von Ressourcen notwendig.
- Es wird insgesamt darauf hingewiesen, dass das Projektziel „Abfallvermeidungspotenzial“ zu kurz greift. Energieeinsparung, Kohlendioxid, Einsparpotenziale beim Rohstoffeinsatz sowie die Vermeidung von Nebenprodukten, auch wenn diese nicht als Abfälle ausgeschleust werden, sollten mit in das Projekt einbezogen werden.
- Grundsätzlich ist auch eine Extrapolation auf Vermeidungspotenziale aus der Vergangenheit heraus möglich, indem retrospektiv untersucht wird, wie sich die Ressourceneinsparung in den letzten Jahren entwickelt hat. Davon ausgehend könnte untersucht werden, inwieweit eine Fortschreibung dieses Trends in die Zukunft möglich und ausreichend erscheint. Auf dieser Grundlage könnten dann zusätzliche Maßnahmen zur Ressourceneinsparung in Betracht gezogen und ihr Beitrag zur weiteren Verringerung der Umweltbelastungen abgeschätzt werden. Dies würde zu wissenschaftlich belastbareren Ergebnissen führen und die Empfehlungen der Studie transparenter machen.
- Da die Verfügbarkeit der Daten für eine Extrapolation auf ein zukünftiges Vermeidungspotenzial im Allgemeinen umso schlechter ist, je näher die betreffenden Prozesse an der industriellen Realisierung sind, muss man sich darauf beschränken, die aktuellen umsetzungsnahen Problembereiche zu identifizieren und das Vermeidungspotenzial ausgehend davon abzuschätzen.
- Die Fachexperten waren sich nicht grundsätzlich einig darüber, inwieweit die Darstellung und Analyse von Fallbeispielen notwendig bzw. ausreichend für die Studie ist. Zum einen könne anhand von Fallbeispielen das Potenzial der fortgeschrittenen Katalyse zur Einsparung von Ressourcen eindrucksvoll demonstriert und damit auch empirisch belegt werden, was ihre Berücksichtigung in der Studie nahe legt. Andererseits könne von einzelnen Fallbeispielen nicht auf das heterogene Gesamtgebiet der Feinchemikalien geschlossen werden, so dass eine Extrapolation ausgehend von Daten aus einzelnen Fallbeispielen nicht zulässig sei.

- Da die generelle Extrapolation der derzeitigen Abfallsituation auf das zukünftige Vermeidungspotenzial kritisch gesehen wird, sollte versucht werden, die Entwicklungsrichtung anhand von Trends aufzuzeigen. Dazu wird vorgeschlagen, von bestimmten **Reaktionstypen** der Spezialitäten- und Feinchemie auszugehen Trends und ihre Auswirkungen auf die Abfallsituation und Vermeidungspotenziale zu identifizieren, die sich durch deren Ersatz ergeben könnten. Als ein Beispiel, das für eine solche Untersuchung besonders geeignet ist, wird der Ersatz der klassischen Friedel–Crafts–Reaktionen genannt.
- Als wesentliche Anforderungen an eine Abschätzung von Abfalleinsparpotenzialen wurden die Transparenz über die zugrunde liegenden Daten und Annahmen und Nachvollziehbarkeit des Abschätzungsprozesses und der Ergebnisse hervorgehoben.

4.1.2. Schlussfolgerungen für die weiteren Untersuchungen

Die Diskussion zur bisher verfolgten Konzeption zum Forschungsvorhaben zeigt, dass eine Abschätzung der anfallenden Mengen für Abfälle und Nebenprodukte bei chemischen Produktionsprozessen insbesondere bei Feinchemikalien auf der Grundlage der bisher statistisch gemeldeten Abfallmengen zu Ergebnissen mit großen Schwankungsbreiten führen würden. Es treten große Unsicherheiten bei den zugrundegelegten Daten und bei der Prognose der Entwicklung zukünftiger Einflussfaktoren auf, die in die Abschätzung des Gesamtpotenzials einfließen.

Trotz zunächst kontroverser Diskussion war man sich einig, dass eine besondere Rolle bei der weiteren Untersuchung Fallbeispielen eingeräumt werden sollte. Man kann zwar auf deren Grundlage nicht auf Umweltentlastungspotenziale für den gesamten Bereich der Feinchemikalienproduktion rückschließen, dennoch kann das Potenzial der fortgeschrittenen Katalyseverfahren zur Einsparung von Ressourcen demonstriert und damit auch empirisch belegt werden. Ausgehend von der Untersuchung von Reaktionstypengruppen kann eine übergreifende Betrachtung vorgenommen werden, die Trends und zu erwartende Entwicklungen sowie deren Probleme transparent macht.

Obwohl eine Quantifizierung von zukünftigen Umweltentlastungspotentialen im ersten Schritt für den gesamten Bereich der Katalysetechnik nur für Teilbereiche und in grober Näherung durchgeführt werden kann, wird es auf der Grundlage der von den Experten vorgeschlagenen Vorgehensweise möglich sein, eine Identifizierung von Chancen und Hemmnissen für die Umsetzung dieser innovativen Technik vorzunehmen. Das Umweltbundesamt wird auf der Grundlage dieser Analyse in der Lage versetzt werden zu entscheiden, welche Teilbereiche ein großes Potenzial zur Umsetzung in die Großtechnik haben und für die Verringerung von Umweltauswirkungen und Ressourceneinsparung von besonderer Bedeutung sind.

Modifiziertes Konzept zum Forschungsvorhaben:

Untersuchung von wichtigen Reaktionstypen

Wie (z. B. Oxidationsreaktionen, Friedel-Crafts-Reaktionen u. a.):

dabei Erhebung von

1. Vergangenheitsentwicklung,
2. Stand der Technik
3. repräsentativen Beispielreaktionen/Beispielen



Aufzeigen von Trends

bei der Abfalleinsparung für die einzelnen Reaktionstypen unter anderem anhand der Beispiele



Identifizierung von Problemen,

die einem Einsatz von fortschrittlichen Katalysatorsystemen für die Reaktionstypen entgegen stehen



Vorschläge für Problemlösungen,

Aussagen zu einem wahrscheinlichen künftigen Einsatz von fortschrittlichen Katalysatorsystemen und zu Auswirkungen auf Abfallmengen

4.2. Maßnahmen für die Förderung selektiver Katalysertechniken

Neben dem Konzept und den bisherigen Ergebnissen des Forschungsvorhabens wurde diskutiert, inwieweit Fördermaßnahmen für selektive Katalysatortechniken erforderlich sind und wie sie auszugestalten sind.

Es bestand Einigkeit darüber, dass bei Feinchemikalien ein signifikantes Umweltentlastungspotenzial vorhanden ist, das durch die Förderung selektiver Katalysatortechniken erschlossen werden kann. Dabei sollten heterogene, homogene und biologische Katalysatorsysteme als gleichwertig angesehen und im Hinblick auf ihren Beitrag zur Lösung eines gegebenen Syntheseproblems ausgewählt werden. Umweltentlastungseffekte durch innovative Katalysatortechniken seien insbesondere dann zu erwarten, wenn entsprechende Verfahren auch im industriellen Maßstab etabliert würden. Somit ist die Überführung der Entwicklungen vom Labor/Technikumsmaßstab in die großtechni-

sche Anwendung von entscheidender Bedeutung, um eine breite industrielle Umsetzung sicherzustellen.

Das Investitionsprogramm des Umweltbundesamtes ist ein Förderprogramm, das die Überführung von innovativen Techniken und Verfahren in die Großtechnik durch Demonstrationsprojekte unterstützt.

Dieses Förderinstrument des Umweltbundesamtes wird von den Teilnehmern des Fachgesprächs jedoch als nur bedingt geeignet für die Situation in der Katalysatorforschung eingeschätzt. So weisen Industrievertreter darauf hin, dass das bestehende Optimierungspotenzial für die im Unternehmen installierten Verfahren durchaus bekannt sei und im Rahmen kontinuierlicher Verbesserungen der Prozesse sukzessive, unter anderem unter Nutzung fortschrittlicher Katalysatortechniken, realisiert werde. In diesem kontinuierlichen Optimierungsprozess der Unternehmen werde eher kein Bedarf für eine öffentlich finanzierte Förderung gesehen, u. a., weil die Unternehmen die damit verbundene Pflicht zur Offenlegung technischer Details nicht zu erfüllen bereit sind.

Zudem unterstützt das Investitionsprogramm des Umweltbundesamtes vor allem die Überführung von Pilot- zu großtechnischen Anlagen. Diese Überführung ist für Feinchemikalien in der Regel aber nicht relevant, da sie überwiegend in Batchprozessen in Multi-Purpose-Anlagen produziert werden. Dies schließt jedoch nicht aus, dass für einige kleinere, technologieorientierte Unternehmen eine öffentliche Förderung wichtig und sinnvoll ist, um diese bei der Überführung ihrer ressourcenschonenden Verfahren vom Technikums- in den Industriemaßstab zu unterstützen. Es müsse aber geprüft werden, inwieweit die meist sehr spezifischen Produktionsverfahren für Feinchemikalien einen nach den Förderkriterien des Investitionsprogramms anzustrebenden Demonstrationscharakter aufweisen, so dass sie auch auf andere Produkte übertragbar seien.

Vielmehr sehen die anwesenden Experten einen großen Förderbedarf in früheren, vorwettbewerblichen Phasen der Technologieentwicklung, die durch das Investitionsprogramm nicht abgedeckt werden. Zum einen wird Förderbedarf für sehr innovative Felder innerhalb der Katalysatorforschung gesehen. Zum anderen gibt es wesentliche Unterschiede im Hinblick auf die Zielsetzungen und Rahmenbedingungen, unter denen Katalysatorforschung in Hochschuleinrichtungen einerseits und Industrieunternehmen andererseits betrieben wird. Daraus resultiert, dass zwar vielfältige interessante und vielversprechende Ansätze in der Hochschulforschung bearbeitet und entwickelt werden, oft aber nicht unmittelbar von der Industrieforschung aufgegriffen und genutzt werden können, weil beispielsweise die sehr kurze time-to-market in der Industrie eine Anpassung der Methoden und Katalysatoren an die eigenen Prozesse verhindert. Ein vielversprechender Förderungsschwerpunkt wäre es demzufolge, prinzipiell bereits existierende Methoden, Katalysatoren oder Verfahren vorwettbewerblich so weiterzuentwickeln, dass sie unmittelbar in den industriellen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zum Einsatz kommen können (anwendungsorientiertes „Toolkit“).

Eine andere Möglichkeit wird darin gesehen, sich bei der Vorgehensweise am Umweltproblem zu orientieren. Es könnten beispielsweise Verfahren oder Produktionsbereiche identifiziert werden, bei denen ein großes, bislang noch

nicht realisiertes Umweltentlastungspotenzial zu vermuten ist. In einem Forschungsförderungsprogramm könnte dann gezielt nach Problemlösungen gesucht werden, wobei homogene, heterogene und biologische Katalysatoren untersucht werden sollten. Eine solche anwendungsorientierte Forschung könnte bis zum „proof of concept“ der technischen Umsetzung gehen; dann sollte es von interessierten Firmen übernommen werden.

Es wird auf die bereits bestehenden Programme der Deutschen Bundesstiftung Umwelt (DBU) hingewiesen.

Die Fachexperten weisen auf die Entwicklungsansätze, die Gegenstand einer Förderung des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) im Rahmen der interdisziplinären Initiative "Leuchtturmprojekte" zum Thema "Nachhaltigkeit in der Chemie" waren hin, die aber nicht in Anwendungen überführt wurden und für die weitere zielorientierte Betrachtungen und Vertiefungen durch das Umweltbundesamt lohnend sein könnten.

Vertreter der Industrie weisen auch darauf hin, dass aus ihrer Sicht ein Defizit bei der universitären Ausbildung besteht und die Lehre im Hinblick auf die *Anwendung* von Katalysatoren der Verbesserung und Vertiefung bedarf.

4.3. Fazit

Katalytische Verfahren sind Schlüsseltechnologien für die Umsetzung nachhaltiger Produktionsverfahren in der chemischen Industrie. Die Selektivität und Reaktionsbedingungen, bei denen möglichst geringe Mengen an Nebenprodukten gebildet werden, sind von besonderer Bedeutung. Bei den Produktionsverfahren für Spezial- und Feinchemikalien ist ein signifikantes Umweltentlastungspotenzial vorhanden, das durch die Förderung selektiver Katalysatortekniken erschlossen werden kann.

Die verringerte Bildung von Nebenprodukten und Abfällen ist nur ein Teilaspekt, den selektive katalytische Reaktionen zur Verbesserung der Nachhaltigkeit von chemischen Produktionsverfahren beitragen können. Für deren Bewertung ist eine integrierte Betrachtung unter Analyse und Berücksichtigung des gesamten Ressourceneinsatzes vorzunehmen, da durch die verringerte Nebenproduktbildung auch Auswirkungen auf den Energiebedarf, den Bedarf an Einsatz- und Hilfsstoffen und Emissionen insgesamt zu erwarten sind.

Es ist davon auszugehen, dass alle drei Arten der katalytischen Verfahren:

- heterogene Katalyse,
- homogene Katalyse und
- Biokatalyse

in Zukunft nebeneinander etwa gleich große Bedeutung haben werden.

Es wurde ausführlich erörtert, auf welcher Grundlage die Abschätzung zukünftiger Umweltentlastungspotenziale vorgenommen werden kann. Die Identifizierung und Quantifizierung von Risiken und Chancen ist notwendig, um Entscheidungen für die weitere Förderung innovativer Verfahrenskonzepte

treffen zu können. Die Experten waren sich einig, dass die zukünftigen Potenziale nicht vollständig, nur im Einzelfall und für Gruppen von Reaktionstypen quantifiziert werden können. Es wird jedoch möglich sein, Entwicklungsrichtungen und Probleme für die Umsetzung von vielversprechenden Techniken und damit Ansatzpunkte für Förderinstrumente aufzuzeigen.

Die Grundlage von Entscheidungen der Unternehmen zur Installation eines bestimmten katalytischen Verfahrens sind fast ausschließlich ökonomische Kenngrößen. Als wichtigste Einflussgröße wird der Zeitraum benannt, innerhalb dessen eine Entwicklung in die Großtechnik überführt oder die Einführung der Produkte in den Markt möglich ist. Die Reduzierung von Kosten durch reduzierten Ressourcenbedarf im Vergleich zu anderen alternativen Verfahren ist zwar auch eine relevante Einflussgröße für eine Entscheidung zur Überführung in die Großtechnik, kommt jedoch nur zum Tragen, wenn die damit verbundenen Vorentwicklungen, z.B. von Katalysatoren, weit genug fortgeschritten sind, um sofort darauf zurückgreifen zu können.

Förderkonzepte sind demzufolge für den Bereich der selektiven Katalyse besonders wirksam, wenn durch sie die Umsetzung der Verfahren in den großtechnischen Maßstab oder die Markteinführung der Produkte beschleunigt werden. Defizite auf dem Wege zu dieser Umsetzung werden insbesondere bei der Überführung von Verfahrensentwicklungen aus der Forschungs- in die Pilotphase gesehen, wobei im Falle der Katalysatorforschung der Verfügbarkeit von anwendungsorientierten Toolkits mit charakterisierten und auf ihre Wirksamkeit getesteten Katalysatormaterialien eine besondere Bedeutung für deren schnelle Anwendbarkeit zugemessen wird.

Das Umweltbundesamt verfügt mit dem vorhandenen Förderprogramm des Bundesumweltministeriums (BMU) zur Unterstützung von Investitionen zur Verminderung von Umweltbelastungen über ein Instrument, das die Überführung von Techniken aus der Pilotphase in die Großtechnik unterstützt. Es wird in Zukunft notwendig sein zu prüfen, ob die bisherigen Kriterien dieses vorhandenen Förderinstrument in Hinblick auf die Förderung innovativer Verfahrenskonzeptionen einer Erweiterung bedürfen. Um Entwicklungen zum bestverfügbaren Stand der Produktions- und Verfahrenstechniken mit deutlich verringertem Bedarf des Ressourceneinsatzes und demzufolge auch Umweltauswirkungen auf sehr hohem Niveau anstoßen zu können, wird man zielgerichtet auch den Bereich der Überleitung in die Pilotphase ansprechen müssen, damit die Industrie bei Bedarf schnell auf vorhandene Entwicklungen zurückgreifen kann.

**Hintergrund und Ziele des Forschungsvorhabens –
Element einer nachhaltigen anlagenbezogenen Chemieproduktion**

Dr. Steffi Richter

(Umweltbundesamt, Berlin)

The slide features a white background with a large, light gray, curved graphic element on the right side. The text is centered and includes the title, speaker information, and workshop details. A small logo of the Umweltbundesamt is in the top right corner.

**Hintergrund und Ziele des
Forschungsvorhabens –
Element einer nachhaltigen
anlagenbezogenen Chemieproduktion**

Umwelt
Bundes
Amt

Dr. Steffi Richter
Umweltbundesamt

Workshop
"Abfallvermeidung bei Produktionen für organische Spezialchemikalien
durch den Einsatz weiterentwickelter Katalysatoren"
im Umweltbundesamt am 24.09.2002

1

Meine sehr verehrten Damen und Herren, lassen Sie mich in einer einleitenden Präsentation darstellen, welche Ziele das Umweltbundesamt (UBA) mit der Initiierung des Forschungsvorhabens verfolgt und wozu die Ergebnisse der Studie und auch dieses Fachgespräches dienen sollen.

Wie Sie sehen, begreifen wir dieses Vorhaben als einen Beitrag zur Verifizierung von innovativen Techniken in Hinblick auf die Chancen und Risiken, die diese für die Gestaltung einer nachhaltigen anlagenbezogenen Chemieproduktion leisten können. So ordnet sich die Themenstellung auch in den Kontext zur Diskussion des Begriffes Nachhaltigkeit ein.

Da die Frage, wo innovative Entwicklung hingeht, untrennbar mit allen Fragen der Forschungs- und Entwicklungsförderung verbunden ist, wollen wir Ihnen auch einen Einblick dazu geben, über welches Instrument zur Förderung von Verfahrenstechniken, das Umweltbundesamt verfügt.

UBA und innovative Techniken

Was will UBA ?
Wie versuchen wir es ?

- **Gesamtrahmen Nachhaltigkeit**
- **Ziel des Projektes**
- **Instrumente des UBA zur Förderung**
- **Ausblick**

2

Ein wesentlicher Arbeitsschwerpunkt für das Umweltbundesamt ist die Frage, wie die Gestaltung des Begriffes *Nachhaltigkeit*, insbesondere die Gestaltung einer *nachhaltige Chemieproduktion*, zu konkretisieren ist. Dafür ist aus unserer Sicht die Anwendung innovativer Techniken mit höherer Effizienz, geringerem Ressourcenverbrauch und Emissionen (wie Mikrosystemtechnik, biotechnologische Prozesse, Nanotechnologie, Direktoxidation, selektive Katalyse, Energieeintrag durch Mikrowellen oder Ultraschall) ein unverzichtbarer Schlüssel.

Es ist zu berücksichtigen, dass viele der derzeitigen Produktionsverfahren in der Chemie mit der Erzeugung erheblicher Mengen an Nebenprodukten verbunden sind, die - soweit diese als Abfall aus dem Prozess ausgeschleust oder in Wasser und Luft emittiert werden - zum Teil wenig charakterisiert sind. Im Kontext des Ressourcenverbrauchs sind auch die Möglichkeiten zur Änderung der Rohstoffbasis von der Petrochemie hin zu nachwachsenden Rohstoffen zu beurteilen.

Zur Vermeidung von Umweltbelastungen gehört auch die Vermeidung des Eintrags von persistenten und akkumulierenden Stoffen in die Umwelt.

In diesem Sinne ist für das Umweltbundesamt die Frage zu beantworten, wie der Nachhaltigkeitsanspruch in der chemischen Industrie operationalisiert werden kann. Die Diskussion dazu kann nur gemeinsam mit der chemischen Industrie durchgeführt werden und ein Ziel nachhaltiger Chemiepolitik ist auch eine Stärkung der Innovationsfähigkeit der Chemie. So gehen ökologische Vorteile unter Einsparung von Ressourcen oft auch einher mit ökonomischen Vorteilen. Die Wirkung dieses Zusammenhangs demonstriert die chemische Industrie selber bereits seit Jahren durch die Umsetzung konsequenter Verfahrensinnovationen, soweit sie insbesondere auf die Einsparung von Energie gerichtet sind.

Gesamtrahmen - allgemein

Nachhaltigkeit – die Zukunft dauerhaft und umweltgerecht gestalten

- **Schonung der natürlichen Ressourcen,**
- **Vermeidung der dauerhaften Belastung der Umwelt mit persistenten und akkumulierenden Stoffen.**

3

So sehen wir die Umsetzung einer nachhaltigen Chemiepolitik – hier insbesondere durch die Gestaltung innovativer Verfahrenskonzepte und –techniken - als ein gemeinsames Ziel des Umweltbundesamtes als auch der Industrie an.

Gesamtrahmen - speziell

Nachhaltigkeit – die Zukunft dauerhaft und umweltgerecht gestalten

- **Nachhaltigkeitsanspruch in der Chemieproduktion erhöhen und operationalisieren.**
- **Gemeinsames Ziel des Umweltschutzes für UBA und Industrie,**

4

Das Umweltbundesamt hat im Sommer 2002 in einer Veröffentlichung „Nachhaltige Entwicklung in Deutschland – die Zukunft dauerhaft gestalten“ eine bereits im Jahre 1997 veröffentlichte erste Zukunftsstudie zu den Bereichen

- Energie,
- Nahrungsmittelproduktion,
- umweltfreundliche Mobilität,
- Stoffstrommanagement
- und Konsum

vertieft und wendet sich zusätzlich neuen Aufgabenfeldern zu:

- dem Tourismus,
- der industriellen Produktion und der Ressourcenschonung.

Für die Beurteilung verschiedener Entwicklungsrichtungen in diesen Bereichen wurden drei verschiedene Szenarien entworfen:

- o Status quo-Szenario mit der Fortschreibung der gegenwärtigen Trends,
- o Ein Effizienz-Szenario mit der Vorgabe einer deutlichen Verbesserung der technischen Effizienz von Produkten und Produktionsverfahren und
- o Ein Nachhaltigkeits-Szenario mit der Annahme veränderter gesellschaftlicher Rahmenbedingungen und individueller Werthaltungen.

Als wichtigstes Ergebnis der Studie wurde festgestellt, dass die Verbesserung der technischen Effizienz allein nicht ausreichen wird, um eine dauerhaft umweltgerechte Entwicklung bis zum Jahre 2010 zu ermöglichen. Die Gestaltung der gesellschaftlichen Randbedingungen insgesamt sind hier gefragt, um den Umgang mit den natürlichen Ressourcen dauerhaft nachhaltig zu gestalten, da auch eine grundsätzliche Veränderung von Konsummustern erforderlich sein wird.

Für die Bereiche der Produktion und der Verarbeitung erfordert dieser Anspruch eine deutliche Verbesserung der Verfahren und Techniken auf hohem Niveau, der letztendlich nur durch innovative Ansätze zu gewährleisten ist.

Veröffentlichung des UBA: Beiträge zur nachhaltigen Entwicklung



Nachhaltige Entwicklung in Deutschland – die Zukunft dauerhaft und umweltgerecht gestalten mit

Status-quo-Szenario,
Effizienz-Szenario,
Nachhaltigkeitsszenario

für

- **Energienutzung und Klimaschutz,**
- **Nahrungsmittelproduktion,**
- **Mobilität,**
- **Tourismus,**
- **Industrie,**
- **Nachhaltiger Umgang mit natürlichen Ressourcen**

5

Das Umweltbundesamt versuchte in den letzten Jahren diesen Anspruch zu konkretisieren und hat in mehreren Studien den Beitrag und die Chancen innovativer Entwicklungen untersucht und Möglichkeiten der Förderung diskutiert. Dazu sind unter anderem die unten genannten Forschungsberichte zu nennen:

Forschungsberichte des UBA als Beiträge zur nachhaltigen Entwicklung



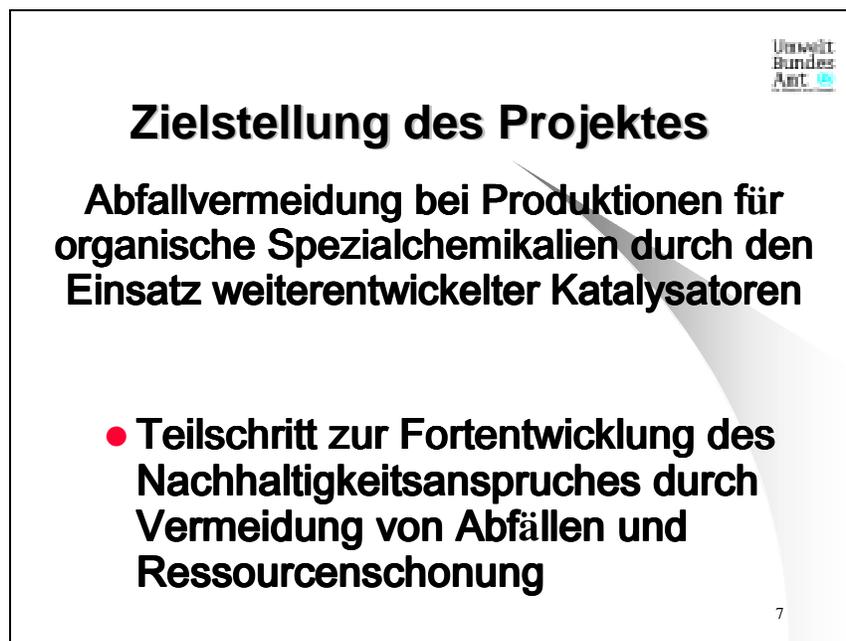
- **„Substitution chemisch-technischer Prozesse durch biotechnische Verfahren am Beispiel ausgewählter Grund- und Feinchemikalien“ (Forschungsbericht UBA-TEXT Nr. 16/01)**
- **„Rohstoffeinsparung durch Kreislaufführung von verbrauchten Katalysatoren aus der chemischen Produktion“ (Forschungsbericht UBA-TEXT Nr.21/01)**
- **Gutachten abzuschließen bis 12/02 „Stand der Verwertung von verbrauchten Katalysatoren aus der chemischen Industrie sowie Einflussfaktoren zur Verbesserung der Kreislaufführung“**

6

In der hier zu diskutierenden Studie

„Abfallvermeidung bei Produktionen für organische Spezialchemikalien durch den Einsatz weiterentwickelter Katalysatoren“

soll ein Überblick über den Stand des Wissens und die Entwicklungstrends in einem innovativen Teilbereich der chemischen Industrieproduktion erarbeiten werden. Es soll analysiert werden, welche hochselektiven und innovative Katalysatorsysteme in Zukunft in die Großproduktion überführt bzw. in chemischen Syntheseverfahren eingesetzt werden können. Der Schwerpunkt soll darauf liegen, darzustellen, welche Umweltauswirkungen und –entlastungen – mit dem Fokus auf dem Abfallbereich – durch die Weiterentwicklung der Selektivität von katalytischen Verfahrenskonzepten zu erwarten sind und wo das Umweltbundesamt fördernd agieren kann. Insofern soll diese Studie einen Teilbereich zur nachhaltigen Chemieproduktion und dessen Entwicklungsrichtung intensiver untersuchen. Es soll dabei insbesondere untersucht werden, wo sich der Stand der spezifischen Entwicklungen in Hinblick auf die Überführung in die großtechnische Anwendung derzeit befindet, welche Hemmnisse und Möglichkeiten der Förderung es gibt.



**Umwelt
Bundes
Amt**

Zielstellung des Projektes

Abfallvermeidung bei Produktionen für organische Spezialchemikalien durch den Einsatz weiterentwickelter Katalysatoren

- **Teilschritt zur Fortentwicklung des Nachhaltigkeitsanspruches durch Vermeidung von Abfällen und Ressourcenschonung**

7

Zielstellung des Projektes

- **Wo stehen wir ?**
- **Welche Beispiele gibt es**
 - In der Entwicklung
 - Im Pilotmaßstab
 - Im großtechnischen Einsatz ?
- **Welche Aussichten sind**
 - wünschenswert (dream-reactions)
 - Realistisch ?

8

Zum Stichwort der Förderung ist hier zu erklären, dass dem Umweltbundesamt zwei Instrumente zur Förderung zur Verfügung stehen:

Im Rahmen des Umweltforschungsplans (UFOPLAN) werden Untersuchungen, Studien und Projekte, die den Bereich der Forschung betreffen, so auch die hier zugrunde liegende Studie, finanziert. Er ist ein Instrument zur Erstellung und Zusammenstellung von Grundsatzwissen in einem Themenbereich.

Instrumente des UBA zur Förderung

- **Umweltforschungsplan (UFOPLAN)**
- **Investitionsprogramm zur Unterstützung von Investitionen zur Verminderung von Umweltbelastungen**

9

Darüber hinaus hat das Bundesumweltministerium (BMU) zur Unterstützung von Investitionen zur Verminderung von Umweltbelastungen ein Programm initiiert, durch das die Überleitung von Verfahrensentwicklungen in die Großtechnik gefördert werden kann.

Das Umweltbundesamt ist für die fachlich/wissenschaftliche Projektbetreuung des Investitionsprogrammes verantwortlich. Die Deutsche Ausgleichsbank (DtA) übernimmt die administrative und finanzielle Abwicklung des Programms. Es werden Projekte gefördert, die durch ihre erstmalige großtechnische Anwendung fortschrittliche Verfahren zur Vermeidung und Verminderung von Umweltbelastungen sowie die Möglichkeiten der Herstellung und Anwendung umweltverträglicherer Produkte und Inhaltsstoffe demonstrieren. Dabei werden Verfahren, die den Ansatz des produkt- und produktionsintegrierten Umweltschutzes verfolgen und somit dazu beitragen, dass Umweltbelastungen gar nicht erst entstehen, bevorzugt.

Durch die Förderung der Demonstrationsvorhaben soll die praktische Eignung und Leistungsfähigkeit neuer Produktionsanlagen, Verfahrenstechniken und Produkte konkret nachgewiesen werden. Ein wichtiges Ziel dieses Förderprogramms ist die Verbreitung und Multiplikation der Projektergebnisse. Dabei sollen die geförderten Technologien bzw. Verfahren als Vorbild dienen und möglichst oft in vergleichbaren Anwendungsbereichen zum Einsatz kommen.

Um der Multiplikatorwirkung, der große umwelt- sowie wirtschaftspolitische Bedeutung beigemessen wird, gerecht zu werden, veröffentlicht das Bundesumweltministerium regelmäßig die wichtigsten Ergebnisse von abgeschlossenen Demonstrationsvorhaben sowie bewilligten Projekten in seiner Zeitschrift "BMU-Umwelt". Die kompletten Abschlußberichte können beim Umweltbundesamt ausgeliehen werden.

Das Investitionsprogramm zur Verminderung von Umweltbelastungen ist ein wesentliches Instrument der deutschen Umweltpolitik für die Gestaltung einer nachhaltigen, umweltgerechten Entwicklung. Es werden zukunftsorientierte Lösungen und innovative Strategien aufgezeigt. Dieser Ansatz zeigt sich insbesondere in der bevorzugten Förderung von Projekten, die die Entwicklung zum produkt- und produktionsintegrierten Umweltschutz verfolgen. Diese begrüßenswerte Entwicklung gewinnt im Rahmen einer vorsorgenden Umweltpolitik zunehmend an Bedeutung.

Ausblick:

Lassen sie mich auf das Thema, zu dem wir hier zusammengekommen sind, zurückkommen. Wir haben eingeladen, um das Konzept und erste Ergebnisse einer Studie zu einem innovativen Verfahrensbereich der chemischen Produktion zu diskutieren. Aus unserer Sicht sind hier insbesondere auch Chancen für die ressourcenschonendere und damit nachhaltigere Gestaltung von Pro-

duktionsverfahren zu erwarten. Ob Sie als Fachexperten diese Einschätzung teilen und welche Richtung die Entwicklungen nehmen können, werden wir heute erfahren. Das Umweltbundesamt möchte anbieten, unser Instrument zur Überleitung von umweltschonenden Produktionsverfahren in die Großtechnik aufzugreifen, um einen Beitrag zu deren Beschleunigung zu leisten.

Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus der Sicht der DECHEMA

Dr. Kurt Wagemann (DECHEMA)

UBA Fachgespräch
Abfallvermeidung bei Produktionen für Organische
Spezialchemikalien durch den Einsatz weiterentwickelter Katalysatoren

Dr. Kurt Wagemann

Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße
aus Sicht der DECHEMA

24. September 2002
Berlin

Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin

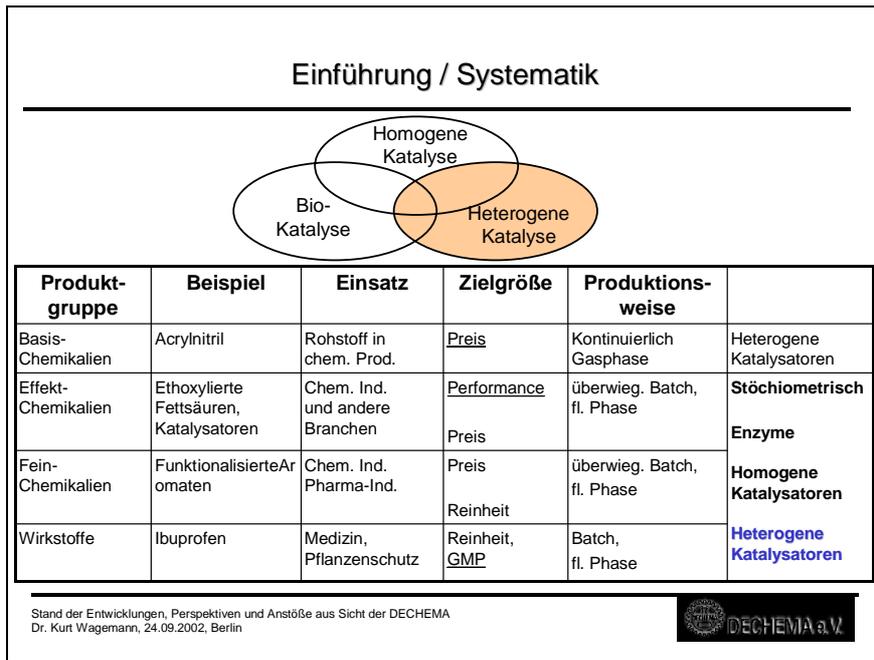


Ich bin gebeten worden, mich heute mit meiner Präsentation speziell auf den Teilbereich der heterogenen Katalyse zu konzentrieren. Ich tue dies natürlich gerne, wenn es auch die DECHEMA als eine interdisziplinäre Gesellschaft über die Jahre und Jahrzehnte hinweg eigentlich gewohnt ist, nie ein enges Segment allein zu betrachten, sondern interdisziplinär zu arbeiten. Das betrifft insbesondere auch den Bereich der Katalyse, die eine unserer Grundaktivitäten seit vielen Jahrzehnten darstellt. Es ist uns über diese Zeit hinweg gelungen, solche Teildisziplinen, wie heterogene, homogene und Biokatalyse zusammenzuführen und zusätzlich die Brücke zwischen den Anwendungsfeldern der Chemie und den Ingenieurwissenschaften zu schlagen.

Auf der ersten Folie sind Überlegungen dazu dargestellt, wie wir uns der Thematik annähern können. Wir wenden uns mit dieser heutigen Veranstaltung ja nicht der Produktion von Basischemikalien und auch nicht der Produktion von Wirkstoffen zu, sondern wir konzentrieren uns auf den mittleren Bereich, den Bereich der Effektchemikalien oder Feinchemikalien. An den Zielgrößen kann man erkennen, welche Randbedingungen für deren Produktion von marktentscheidender Bedeutung sind.

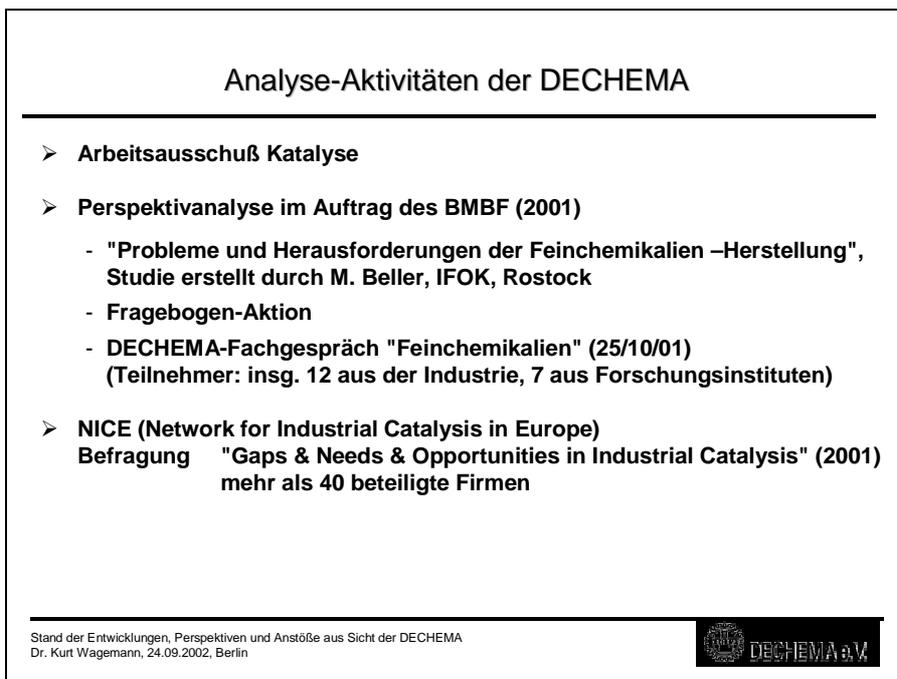
Effektchemikalien sind z. B. Hilfsstoffe und andere Stoffe, die in der Textilherstellung eingesetzt werden, so die ethoxylierten Fettsäuren. Hier werden keine hochreinen Substanzen produziert, sondern Gemische. Es kommt auf die Performance an, d.h. die Leistung eines Gramms Stoff in dem spezifischen Anwendungsprozess bezogen auf den Preis.

Auch für die Feinchemikalien ist der Preis entscheidend, jedoch sind hier gleichzeitig hohe Reinheiten von Bedeutung, da sie für die Produktion von Wirkstoffen eingesetzt werden.



Im Bereich der Basischemikalien, über den wir heute nicht reden, werden, von wenigen Ausnahmen abgesehen, fast ausschließlich heterogene Katalysatoren eingesetzt. Es handelt sich meist um kontinuierliche Prozesse, die in der Gasphase stattfinden.

Heute wird hier primär über Reaktionen die Rede sein, die in der Flüssigphase stattfinden und die nicht, wie im Fall der Grundchemikalien, in über Jahrzehnte hinweg bestens optimierten kontinuierlichen, sondern in



Batchprozessen hergestellt werden. Fein- und Spezialchemikalien werden in den meisten Fällen über die homogene Katalyse produziert. Es handelt sich hier um ein weites Feld, das niemand besser präsentieren könnte, als mein Co-Referent Herr Prof. Beller.

Lassen Sie mich an dieser Stelle die Handlungsfelder der DECHEMA erläutern. Ich bin speziell zuständig für das Forschungsmanagement. Wir sind fortlaufend mit der Analyse der Forschungs- und Entwicklungslandschaft befasst. Unsere Arbeitsausschüsse analysieren für die verschiedenen Bereiche:

- Was sind die aktuellen Themen ?
- Wo gibt es neue Entwicklungen ?
- Wo gibt es Transferprobleme ?

So haben wir bei der DECHEMA u.a. den Arbeitsausschuss „Katalyse“ etabliert.

Wir arbeiten auch schon über viele Jahre hinweg für das BMBF und haben mit diesem Partner neue Entwicklungen im Hinblick auf eine geeignete Förderung durch das BMBF analysiert. So hatten wir durch Herrn Prof. Beller eine Studie zur Anwendung katalytischer Verfahren in der Feinchemikalienherstellung erstellen lassen.

Wir haben in diesem Zusammenhang bei den relevanten Chemiefirmen eine Fragebogenaktion durchgeführt und hatten vor einem Jahr ein Fachgespräch zu den Feinchemikalien, bei dem u. a. auch einige der hier Anwesenden, neben anderen namhaften Firmen, dabei gewesen sind. Ich werde einige der Ergebnisse dieses Fachgespräches präsentieren.

Gleichzeitig bin ich Sekretär des „Network for Industrial Catalysis in Europe“. Dies ist ein lockerer Zusammenschluss von etwa 100 Firmen, die sich mit Katalysatorproduktion und -anwendung in Europa befassen. Im Rahmen dieses Netzwerkes wird in unregelmäßigen Abständen eine Befragung der Mitgliedsfirmen durchgeführt, die aufzeigen soll, wo sich die *Gaps, Needs and Challenges* für die industrielle Katalyse befinden. Auch darüber werde ich vortragen. An der letzten Umfrage haben sich 40 Firmen beteiligt.

Wir hatten im Rahmen dieses Netzwerkes einen spezifischen Workshop zur Fragestellung „Katalysatoren in der Feinchemikalienproduktion“ veranstaltet. Hier wurden folgende Schwerpunkte für Forschungs- und Entwicklungsbedarf genannt:

- An allererster Stelle stehen wie immer die Oxidationsreaktionen. Hier gibt es Aussagen, dass die Oxidationskatalyse 15 bis 20 Jahre hinter dem Entwicklungsstand der Hydrierungskatalyse zurückgeblieben ist.
- Katalysatoren sollen spezifische funktionelle Gruppen transformieren können und zwar für eine ganze Palette von Molekülen, also nicht nur speziell über eine Molekülklasse.
- In den letzten 5 Jahren setzt man sehr stark auf „High-Throughput-Methoden“, mit denen man hofft, schneller gute Katalysatoren für die Prozesse zu finden.

- Immer wieder gewünscht ist die Produktionskontrolle durch in-situ-Analysetechnik.

Was man bei all diesen Diskussionen nie vergessen sollte, ist die Frage der ingenieurtechnischen Verfahrensentwicklung, d. h. die Reaktorentwicklung für die Feinchemikalienproduktion. Hier denkt man über katalytische Membranreaktoren und grundsätzlich über Reaktoren mit kurzen Kontaktzeiten nach, um die Produkt-Moleküle zu schonen, die häufig thermisch instabil sind. Und hier werden neue Verfahrensansätze, z. B. unter Verwendung neuer Lösungsmittel, überkritischer Medien u.ä. entwickelt.

Bei der Befragung der NICE-Mitglieder, wo Forschungsbedarf gesehen wird und wo die Industrie Input von Seiten der Akademie hin zur nachhaltigen Produktion sucht, um voranzukommen, stehen zuoberst Oxidationskatalysatoren für den Feinchemikalienbereich. Es wird auch über Biokatalyse und enzymatische Katalyse diskutiert. Dabei unterscheidet die Industrie selber weniger stark zwischen den Disziplinen; die Funktionalität steht im Vordergrund!

Im Vordergrund steht auch eine hohe Katalysator-Aktivität bei niedrigen Temperaturen, um eine höhere Selektivität zu erreichen und Nebenprodukte oder Abbauprodukte des Ausgangsmaterials zu vermeiden. Ein wichtiger Punkt ist die enantioselektive Katalyse.

NICE Workshop „Catalysts in Fine Chemicals Production“

1. Catalytic oxidation

- Reactors:
 - moving bed processes for oxidation
 - very short contact time reactors
 - catalytic membrane reactors
- Catalysts:
 - specific functional group transformation on a range of organic molecules
 - rapid screening processes are required
 - oxidation is 15-20 years behind hydrogenation
 - new in-situ analysis techniques required

2. Improving catalysis in three phase media, i.e. Redox Zeolites to be studied

3. Multifunctional reactors

4. Requirement for catalyst promoters/modifiers

Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



NICE Survey 2001
„Gaps & Needs & Opportunities in Industrial Catalysis“

**Application of catalysis in the production of fine chemicals
for the food and health sector**

- Solid oxidation catalysts
- Evaluation and use of the potential of biocatalysis and enzymatic catalysis
- High activity at low temp. -> production of thermally unstable fine chemicals
- Availability of improved enantioselective catalysts
- High activity and selectivity in the immobilisation of homogeneous catalysts
- Catalysts for the selective removal of specific chemical functions
- Availability of cheaper chiral ligands
- Increase of lifetime of enantioselective homogeneous catalysts
- Improving selectivity by operating at lower temperatures

Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



Die ursprünglichen Ziele unseres Fachgespräches im Auftrag des BMBF vor einem Jahr waren herauszufinden, wo die Stärken und Schwächen vorhandener Produktionsverfahren gerade im Hinblick auf Nachhaltigkeit liegen, Problemfelder zu identifizieren und über neue Lösungsansätze nachzudenken.

Wir haben nach dem Fachgespräch die Industriekollegen befragt, welches Thema sie für eine Nachfolgeveranstaltung wünschen würden. Hier standen drei Aspekte im Vordergrund:

- Erarbeitung eines Toolkits für
 - Familien von Katalysatoren, die praktisch auf Vorrat verfügbar sein sollen und die man den spezifischen Gegebenheiten der Feinchemikalienproduktion anpassen kann,
 - zusätzliche Promotoren und Modifiers, um die Reaktion in die gewünschte Richtung zu lenken,
 - geeignete Lösemittel (z. B. das sehr aktuelle Beispiel der ionischen Flüssigkeiten).
- Mehrproduktanlagen mit kontinuierlicher Prozessführung, die aber in der Realität dann oft doch nicht Verwendung finden, da der Aufbau einer Batchproduktion schneller umzusetzen ist.
- Entwicklung von Bewertungsverfahren zum Vergleich verschiedener Produktionsalternativen und zur Entscheidung darüber, was im eigentlichen Sinne nachhaltig ist (z. B. könnte im Einzelfall der Einsatz eines chlorierten Lösemittels doch umweltfreundlicher sein als eines wässrigen Mediums, wenn die Reaktion damit zu deutlich höheren Selektivitäten führt). Die Entscheidung über solche Fragestellungen ist nicht trivial und unter Ökoeffizienz Gesichtspunkten sind Tools notwendig, um schon früh-

zeitig bei der Entwicklung des Prozesses eine Bewertung durchführen zu können.

DECHEMA-Fachgespräch Feinchemikalien

Ziele:

- ↓ Analyse von Synthese- und Produktionsverfahren im Feinchemikalienbereich unter Nachhaltigkeitsaspekten
- ↓ Identifikation von Problemfeldern
- ↓ Diskussion und Erarbeitung von Lösungsansätzen

Interessenslage nach Fachgespräch:

- ↓ Erstellung eines Toolkits
- ↓ Mehrproduktanlagen, kontinuierliche Prozeßführung
- ↓ Bewertung von Feinchemikaliensynthesen unter Ökoeffizienz-Gesichtspunkten

Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



Jetzt etwas zu den Randbedingungen:

- Feinchemikalien haben üblicherweise eine sehr komplexe Struktur, was auch häufig dazu führt, dass diese Verbindungen thermisch instabil sind.
- Man muss auf dem Weg zu den gewünschten Produkten häufig einen mehrstufigen Prozess durchführen, bei dem man in jedem Schritt Gesamt-Selektivität und letztlich Ausgangsmaterial verloren hat.
- Nach den einzelnen Produktionsschritten sind dann auch Aufarbeitungsschritte durchzuführen, bei denen dann die Frage des Lösemiteleinsatzes zu klären ist.
- Es gibt eine Tendenz, einmal etablierte Herstellungsverfahren nicht mehr zu ändern. Das hängt nicht zuletzt auch mit den gesetzlichen Rahmenbedingungen zusammen. Dies trifft besonders bei der Wirkstoffproduktion zu, weil dann Probleme mit den strengen Zulassungsrichtlinien zu erwarten sind.

Wenn man über Wirtschaftlichkeit spricht, dann ist sehr entscheidend, dass die Umsetzung in die Produktion möglichst schnell stattfinden kann. Insbesondere im Hinblick auf den zeitlich begrenzten Patentschutz möchte man bei Wirkstoffen keine Zeit verlieren, da dies zu Verlusten hinsichtlich der Profitabilität führen würde. Das heißt dann auch, dass man schnell ins Regal zum gewünschten Katalysator greifen möchte, ohne dass zeitaufwendige Katalysatorentwicklung zu betreiben ist.

DECHEMA-Fachgespräch Feinchemikalien

Randbedingungen (technische):

Feinchemikalien zeichnen sich durch folgende Eigenschaften aus:

- ↓ Komplexe chemische Struktur
- ↓ mehrstufiger Syntheseprozess
- ↓ Beibehalten etablierter Herstellungsprozesse
- ↓ Herstellung überwiegend in Batchproduktion

Randbedingungen (wirtschaftliche, gesetzliche):

- ↓ "time to market" als kritischer Erfolgsfaktor
- ↓ Notwendigkeit der Einhaltung von Qualitätsstandards
- ↓ Aufwendige Zulassungsverfahren bei Wechsel des Herstellungsverfahrens

Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



Hier noch einige Ergebnisse unserer Fragebogenaktion zum Thema Prozessoptimierung:

- Man will bei Einführung bzw. Wechsel von Verfahren nicht nur möglichst kurze Genehmigungs- und Zulassungsverfahren, sondern auch insgesamt geringe Stillstandzeiten erreichen.
- Man möchte die Zahl der Produktionsstufen weitgehend minimieren, nach Möglichkeit in einem einzelnen Schritt das Ausgangsmaterial zum Produkt umsetzen.
- Man denkt über kontinuierliche Produktionsverfahren nach. Dafür gibt es auch einzelne Beispiele.
- Auch neue Reaktortypen sollten hinsichtlich ihrer Eignung für die Feinchemikalienherstellung erprobt werden, wie z. B. Monolithreaktoren, die man in anderen Bereichen (Abgaskatalyse) einsetzt.
- Die Investitionskosten für Anlagen ließen sich eventuell auch dadurch senken, dass man von größeren Reaktoren weggeht hin zu Mikroreaktoren; die Vergrößerung der Produktion ließe sich dann durch eine Erhöhung der Zahl der Reaktormodule erzielen.
- Wenn man über Minimierung von Gefahrenpotentialen nachdenkt, dann geht es immer um die Frage der Lösungsmittel, aber auch um prozesstechnische Ansätze, z. B. dass man bei Hydrierungen nicht mit hohen Drücken arbeiten möchte.

DECHEMA-Fachgespräch Feinchemikalien

Ergebnisse einer Fragebogenaktion: Analyse von Synthese- und Produktionsverfahren für Feinchemikalien unter dem Aspekt Nachhaltigkeit

Notwendige Maßnahmen der Prozeßoptimierung

- ↓ Minimierung von Stillstandszeiten
- ↓ Kopplung von Produktionsstufen
- ↓ Minimierung von Produktionsstufen
- ↓ Einsatz kontinuierlicher Produktionsmethoden
- ↓ Einsatz von Multiphasen- und Monolithreaktoren
- ↓ Verbesserung des Verhältnisses Anlageninvestitionskosten / Produktionsdauer (z.B. durch Mikroreaktoren)
- ↓ Minimierung von Gefahrenpotentialen durch
 - Verwendung unproblematischer Lösungsmittel
 - Reaktionsführung bei niedrigen Drücken

Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



Wir kommen jetzt zu den durch das Umweltbundesamt bereits als „Dream Reactions“ benannten wünschenswerten Entwicklungen. Dies ist ein fester Begriff aus dem Bereich der Grundchemikalien. Das beste Beispiel hierfür ist das aus Methan direkt produzierte Methanol. Es gibt auch noch ein paar andere gute Beispiele, z. B. Benzol direkt zu Phenol umzusetzen. Allerdings ist dies bei den Feinchemikalien nicht so einfach.

Bei der begrenzten Anzahl von Grundchemikalien, die bekannt sind - es sind wohl so um die 200 - ist die Benennung von Handlungsfeldern deutlich einfacher als bei den Feinchemikalien. Bei den Fein- und Spezialchemikalien ist eine große Vielfalt vorhanden und nicht jede Firma macht, wenn sie ihre Problemfelder benennt, auch zugleich Aussagen, über welche Art von Zwischenstufen sie produziert. Hier ist die Konkretisierung von Handlungsfeldern sehr viel schwieriger und ich warne etwas davor, dass wir bei unserem heutigen Gespräch den Anspruch erheben, ganz explizit im Detail all die Probleme auf den Tisch bekommen zu wollen. Trotzdem lassen sich in solch einem Gespräch, und das haben wir auch damals bei unserem Fachgespräch vor einem Jahr bei der DECHEMA feststellen können, dann doch generelle Aussagen von mittlerem Detaillierungsgrad machen, die erläutern, „wo der Schuh drückt“. Aus unserer Sicht sind hier immer wieder zu benennen:

- der Ersatz von stöchiometrisch durchgeführten Oxidationsprozessen,
- Reduktionsprozesse, die zum Teil noch mit komplexen Hydriden (Lithium-Aluminiumhydrid) durchgeführt werden, mit denen man dann im Zuge der Aufarbeitung automatisch einen hohen Anteil von Abfall erzeugt,
- Katalysereaktionen mit starken Säuren und Basen, bei denen häufig klassisch Schwefelsäure, Fluorwasserstoffsäure und ähnliche Reagenzien eingesetzt werden, die man durch feste Katalysatoren ersetzen will,

- C-C-Kopplungen (z. B. Grignard-Reaktionen mit riesigen Mengen von Abfällen bei der Umsetzung im großtechnischen Maßstab),
- der weite Bereich der Funktionalisierung mit Aromaten und von Aromaten (z. B. Nitrierungen, Friedel-Crafts-Synthesen, Diazotierungen). Dies sind Reaktionen mit relativ hohen Abfallanteilen, insbesondere die Friedel-Crafts-Reaktionen.

DECHEMA-Fachgespräch Feinchemikalien

Reaktionstypen mit deutlichem Verbesserungspotential

- ↓ **Stöchiometrisch durchgeführte Oxidationsprozesse**
- ↓ **Reduktion mit komplexen Hydriden**
- ↓ **Katalyse mit starken Säuren und Basen**
- ↓ **C-C Kupplungen**
 - stöchiometrisch (z.B. Grignard, Wittig)
 - Übergangsmetall-katalysiert
- ↓ **Funktionalisierung von Aromaten:**
 - **Friedel-Crafts-Reaktionen**
 - Nitrierungen
 - Halogenierungen
 - Diazotierung
 - Hydroxylierung

Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



Man kann auch in Bezug auf Substanzklassen die Schlüsselbausteine zum Aufbau von Wirkstoffen darstellen und einen Optimierungsbedarf formulieren:

- Ganz besonders und in den letzten Jahren zunehmend wichtig wird die Gewinnung von enantiomerenreinen Verbindungen, z. B. chirale Alkohole, Amine etc.,
- Aufbau von Aromaten, wobei hier nicht die Funktionalisierung eines bestehenden Aromatengerüsts, sondern der Aufbau von Heteroaromaten oder die Erzeugung komplexer Substitutionsmuster gemeint ist,
- Bei einem NICE-Workshop, den wir vor einem Jahr in Brüssel durchführten, wurde von den Industrievertretern insbesondere die Epoxide als eine universell anwendbare Substanzklasse benannt, bei der man darüber nachdenken sollte, wie diese umweltfreundlicher aufgebaut werden kann als bisher.

DECHEMA-Fachgespräch Feinchemikalien

Substanzklassen mit Optimierungsbedarf (Schlüsselbausteine!)
unter Gesichtspunkten der Nachhaltigkeit

- Enantiomerenreine Verbindungen
 - chirale Alkohole
 - Amine
 - Aminoalkohole
- Aufbau von Aromaten
 - Chinoline, Pyridine, etc.
 - Erzeugung komplexer Substitutionsmuster
- Aminosäuren
- Epoxide
- Phenylhydrazine
- Diole

Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



Die Feinchemikalienproduktion ist eigentlich eine Domäne der Biokatalyse und der homogenen Katalyse. Wieso hat die heterogene Katalyse hier gewisse Probleme?

Ich zitiere hier aus einem Catalysis Today-Artikel von Herrn Blaser (Solvias) , der als kritische Faktoren nennt:

- Leistungsfähigkeit des Katalysators (Selektivität, Aktivität, Stabilität etc.). Es fehlten z.T. die entsprechenden Katalysatoren.
- Die Substratspezifität der heterogenen Katalysatoren ist sehr hoch, so dass schon kleine Änderungen des Substrats dazu führen, dass die katalytische Aktivität beeinflusst wird. Man hat häufig nicht die Zeit, die notwendigen Anpassungen vorzunehmen.
- Die Prozessentwicklungszeit (*time to market*) ist kurz und gleichzeitig ist die Menge der eingesetzten Katalysatoren gering, so dass sich eine spezifische Entwicklungsarbeit zum Teil nicht unbedingt lohnt. Einen Ausweg aus diesem Dilemma weisen eventuell *high-throughput technologies*. Hier entstehen neue Firmen, die sich damit befassen, diese Entwicklungsarbeit mit vereinfachten, den Prozeß beschleunigenden Methoden zu übernehmen.
- Die Forderung nach hoher Reinheit des Ausgangsmaterials: Wir haben bei der heterogenen Katalyse immer das Risiko, dass die aktiven Zentren, die nicht in allzu großer Zahl vorhanden sind, durch Verunreinigungen - teils des Ausgangsmaterials, teils der Lösungsmittel - vergiftet werden. Auch dies kann ein Grund sein, in Verfahren die heterogene Katalyse nicht anzuwenden.
- Eine Rolle spielt auch der erhöhte Bedarf an Prozesskontrolle bei der heterogenen Katalyse.

Heterogene Katalyse für Feinchemikalien-Produktion

Kritische Faktoren

- Leistungsfähigkeit des Katalysators (Selektivität, Aktivität, Produktivität, Stabilität)
- Substrat-Spezifität (↑ schwierige Syntheseplanung)
- Prozeß-Entwicklungszeit (↑ Suche nach kommerziellem Katalysator)
- Forderung nach hoher Reinheit des Ausgangsmaterials
- Anforderungen an Prozeßkontrolle

nach H.U. Blaser, Catalysis Today 2000

Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



Lassen Sie mich nun zu den Beispielen kommen. Die akademische Forschung ist sehr leistungsfähig, aber es sind nur wenige Beispiele vorhanden, bei denen diese Ergebnisse die Umsetzung in den industriellen Maßstab geschafft haben. Im folgenden gehe ich primär auf solche Beispiele aus der industriellen Anwendung ein.

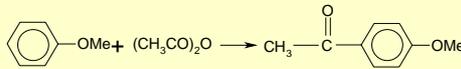
Ich möchte mit dem Bereich der Aromatenchemie beginnen. Aromaten sind sehr wichtige Bausteine der Feinchemikalienproduktion. In der folgenden Abbildung ist die Acetylierung von Anisolen in einem Verfahren von Rhone Poulenc dargestellt, bei dem das Essigsäureanhydrid zusammen mit dem Anisol direkt über einen Zeolith geleitet wird, wodurch das gewünschte Produkt in dem entsprechenden Substitutionsmuster, hier in para-Stellung, erzeugt wird. Auf diese Weise kann man die klassische Friedel-Crafts-Route vermeiden, für die Aluminiumchlorid eingesetzt wird, das dann, da hydrolysiert und verunreinigt, zu entsorgen ist.

Bei dem zweiten Beispiel wird ein Zeolith eingesetzt, der es erlaubt, in einem Reaktionsschritt aus zwei Ausgangssubstanzen bei größtmöglicher Atomeffizienz den Heteroaromaten Thiazol zu erzeugen, den man sonst nur aufwändig über fünf Schritte darstellen kann. Es handelt sich um ein sehr attraktives Verfahren, das von Merck und Co entwickelt wurde.

Aromaten-Chemie

Acetylierung von Anisol

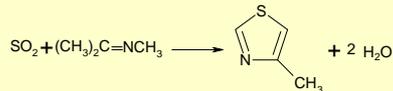
(Rhône Poulenc)



Katalysator HBEA (großporiger Zeolith)

→ Ersatz der klassischen Friedel-Crafts Route

Aromaten-Aufbau



Katalysator: Cs beladener ZSM-5

→ Ersatz der konventionellen 5-Stufen Synthese von substituierten Thiazolen

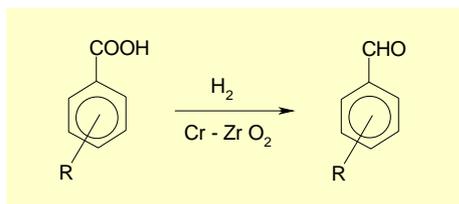
Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



Es folgt ein Beispiel für die Reduktion von aromatischen Säuren: Aromatische Aldehyde sind attraktive Zwischenprodukte. Hier ist die Hydrierung einer aromatischen Säure an einem bifunktionellen Zirkonoxid, das mit Chrom dotiert ist, gezeigt. Diese Hydrierung kann mit sehr hoher Selektivität von üblicherweise über 95 % durchgeführt werden. Die Reaktion läuft in einem Reaktionsschritt als kontinuierliches Verfahren in einem Festbettreaktor bei hohen Temperaturen ab. Bei den klassischen Verfahren erzeugt man das Säurechlorid - unter Entstehung von Abfall - mit anschließender katalytischer Hydrierung (also eine Zwei-Schritt-Reaktion). Die größere Attraktivität des katalytischen Verfahrens ist klar erkennbar.

Hydrierung aromatischer Säuren

Erzeugung von Aldehyden



Reaktionsführung: 300 – 400°C, Festbettreaktor
→ 96% Selektivität bei
98% Umsatz

Konventionelle Route:

- Reduktion mit Li in Ethanamin (direkt); niedrige Ausbeute
- Überführung in Säurechlorid und katalytische Hydrierung mit Pd-Katalysator (Rosenmund-Reaktion)

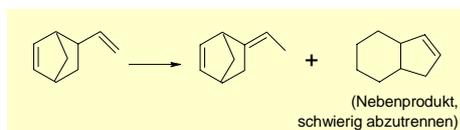
Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



Isomerisierungsreaktionen: hier ist man auf der Suche nach basischen und sauren, festen Katalysatoren, was ein schwieriges Forschungsfeld ist, aber im Erfolgsfall ein sehr lohnendes Geschäft darstellt. Hier sei ein Beispiel von Sumitomo Chemicals vorgestellt, bei dem mit einem superbasischen Katalysator eine Reaktion mit höchster Selektivität mit einer Ausbeute von praktisch 100 % zum gewünschten Produkt führt. Es wird kein Nebenprodukt erzeugt, das durch die Aufspaltung des Bicyklus entstehen könnte. Dieses Verfahren ist hochattraktiv, weil man letztendlich einen Aufarbeitungsschritt und somit Lösungsmittel einspart.

Basische Katalysatoren

Isomerisierungs-Reaktionen



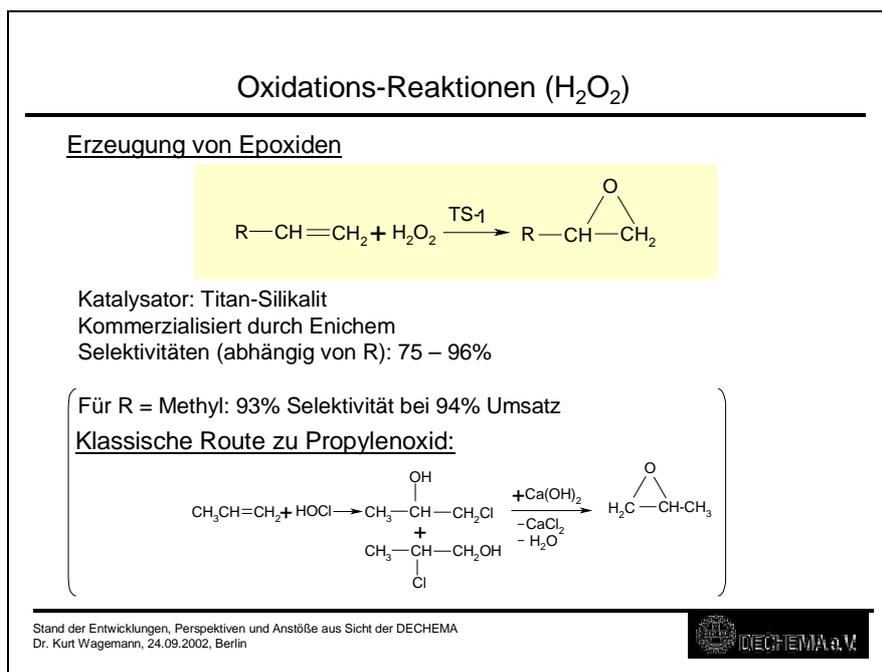
Katalysator: $(\text{MOH})_x / \text{M}_y / \gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ (Sumitomo Chemicals)
M = Li, Na, K, Rb, Cs

→ 99,9% Selektivität bei
99,7% Umsatz (bei 30° C)

Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



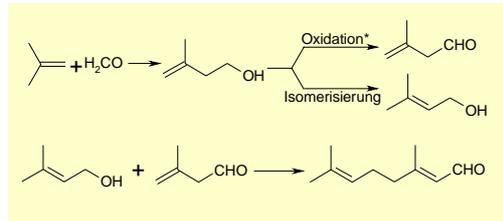
Das spannende Kapitel der Epoxide hat durch eine Entwicklung bei Enichem in Italien einen Anstoß aus der heterogenen Katalyse erhalten: Es wurde ein Titansilikalkatalysator entwickelt, der es erlaubt, unter Einsatz von Wasserstoffperoxid, Epoxide herzustellen. In der Abbildung ist das klassische Verfahren in Klammern gesetzt, die Herstellung von Propylenoxid als Grundchemikalie über die Chlorhydrinroute. Die Salzfracht im Abwasser aus der Erzeugung von Propylenoxid ist beträchtlich. Das alternative Verfahren wurde inzwischen durch Enichem etwa im 10 000 t-Maßstab umgesetzt. Der Syntheseweg ist auch für substituierte Epoxide – um wieder zur Feinchemikalienproduktion zurückzukehren - umsetzbar, bei denen die Gruppe R beliebige organische Reste symbolisiert.



Als ein weiteres Beispiel für eine Oxidationsreaktion, diesmal mit Sauerstoff als idealem Reagenz, das man bei der Einbringung dann vollständig in das Produkt überführt, ist hier der BASF-Citral-Prozess dargestellt. Citral dient zur Herstellung von alpha-Jonon als Veilchenduftstoff bzw. von Vitamin A. Man führt hier einen Oxidationsschritt durch, der an einem silikagelgetragerten Silberkatalysator bei hohen Temperaturen im Festbettreaktor bei extrem niedriger Kontaktzeit zum gewünschten Produkt führt. Man spart sieben Stufen ein. Der Aufwand für die Entwicklung eines solchen Reaktors lohnt sich jedoch nur, wenn man wie hier im Falle von Citral tausende Tonnen eines Produktes produzieren wird.

Oxidations-Reaktionen (O₂)

BASF-Citral Prozeß



*Katalysator: Silica supported Silver
 Prozeßbedingungen: 300 – 600°C
 Festbettreaktor
 Kontaktzeit: 0,001 sec

Konventionelle Totalsynthese aus Aceton \rightarrow 7-stufiger Prozeß

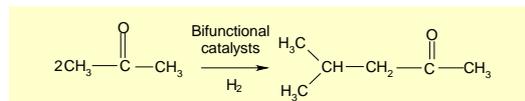
Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
 Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



Die C-C-Knüpfungsreaktionen sind auch ein typischer Fall, bei denen die konventionelle Route über eine mehrstufige Reaktion führt, die abwechselnd mit einer Säure und einer Base durchgeführt wird, wobei anschließend nach der Neutralisierung jeweils eine hohe Salzfracht auftritt. Diese Probleme kann man umgehen, wenn man, wie in diesem Beispiel, das gewünschte Produkt Methylisopropylketon auf katalytischem Weg mit einem Palladium-Zeolith direkt erzeugt.

C-C-Verknüpfung & Hydrierung

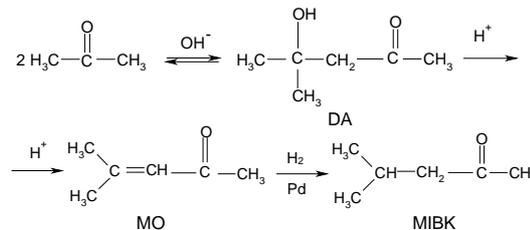
Methylisobutylketon aus Aceton



Katalysator: Pd HMF I

nach R.A. Sheldon

Konventionelle Route: Mehrstufige Reaktion



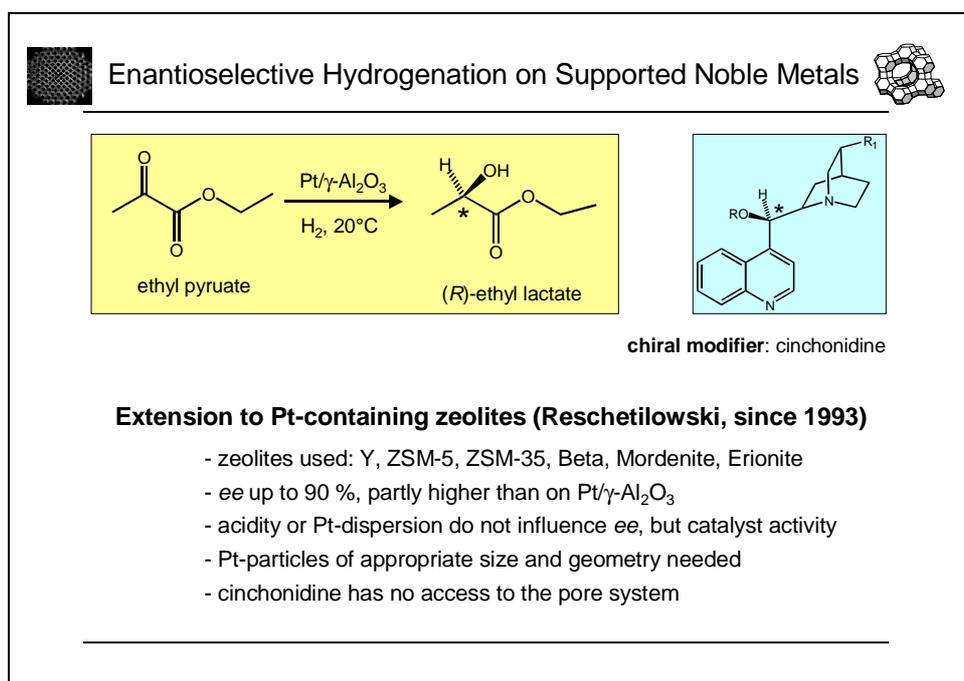
Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
 Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



Damit komme ich zum Ende der Beispiele, mit Fokus auf industriell genutzten katalytischen Prozessen.

Ich möchte aber noch einen Ausblick auf ein wichtiges Entwicklungsfeld in der Feinchemikalienproduktion geben, das viele beschäftigt, die enantioselektiven Prozesse. Ich zitiere hier aus einem hervorragenden Vortrag von Herrn Gläser, Universität Stuttgart, den er dieses Jahr auf der Deutschen Zeolithtagung in Frankfurt gehalten hat:

Er geht auf wegweisende Arbeiten hier von Prof. Reschetilowski, Dresden ein: Zeolithe werden mit chiralen Auxiliaren belegt, wodurch es gelingt, den mehr oder weniger klassischen Hydrierkatalysator so zu modifizieren, dass enantioselektive Umsetzungen möglich werden. Die Überschüsse des gewünschten Enantiomeren liegen bei über 90 %.

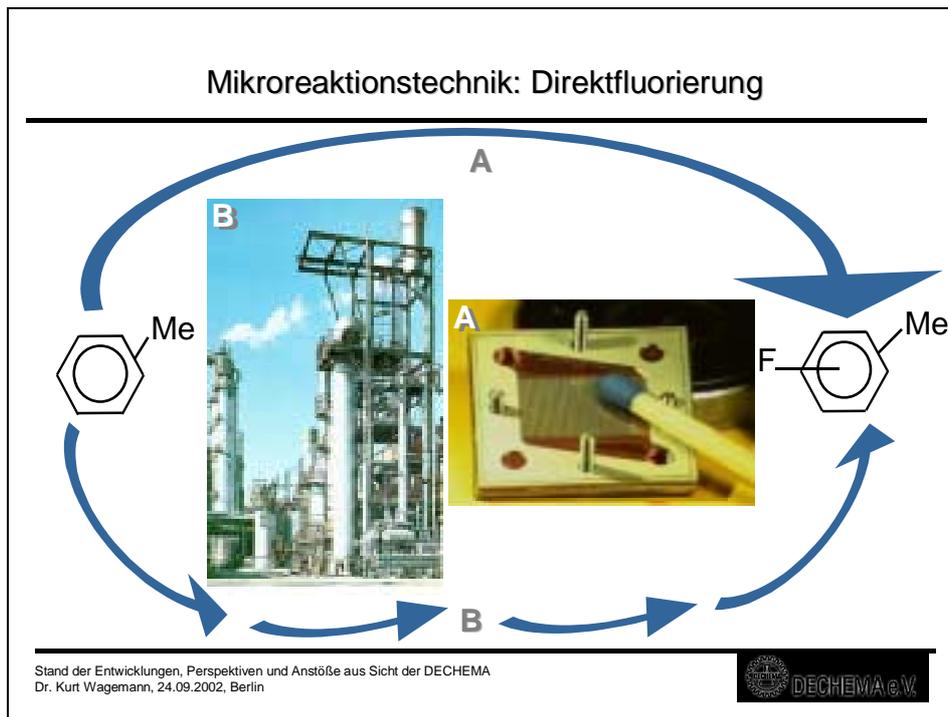


Insgesamt ist auf diesem Gebiet noch viel zu tun, aber auch eventuell viel möglich. Wir reden hier über das Vordringen der heterogenen Katalyse in die Kerndomäne der homogenen Katalyse und Biokatalyse. Bis vor kurzem gab es nur ein paar ganz wenige exotische Beispiele, wo es ansatzweise gelungen war, solche Reaktionen heterogen zu katalysieren.

Nachdem wir aber mit der DECHEMA eine Gesellschaft sind, die sich auch sehr stark mit der Reaktionstechnik beschäftigt, kann ich hier nicht darauf verzichten, neben der Katalyse mit gleicher Berechtigung auf die Reaktionstechnik hinzuweisen.

Mit Herrn Prof. Baerns haben wir einen prominenten Vertreter der Mikroreaktionstechnik am Tisch. Kleinste Strukturen erlauben eine ausgezeichnete Prozesskontrolle u.a. deswegen, weil Wärme sehr effizient abgeführt werden kann. Es können auf diese Weise Reaktionen durchgeführt werden, die vorher nicht vorstellbar waren. So können aus Aromaten durch Umsetzung mit molekularem Fluor fluoridierte Aromaten hergestellt werden. Das war üblicherweise

nur in einem Mehrschrittprozess über Nitrierung, Diazotierung und Umsetzung mit Tetrafluorborat über viele Schritte möglich.



Ich komme jetzt zu meiner letzten Folie, die einige Aspekte für unsere weitere Diskussion darlegen soll:

- die Gleichrangigkeit von heterogener, homogener und Biokatalyse wird sich in Zukunft fortentwickeln.
- High-Throughput-Methoden und solche Firmen, die diese als Service anbieten, werden sich etablieren, so dass es möglich wird, den Aufwand für die Entwicklung von prozeß-spezifischen Katalysatoren zu verringern,
- die Bedeutung der Verfahrenstechnik wird steigen, sei es durch
 - Reaktionsführungskonzepte (z. B. überkritische Medien, mehrphasige Systeme, ionische Flüssigkeiten, Mikroreaktoren),
 - Immobilisierte Reagenzien (bei denen diese an polymeren Trägern in den Prozeß eingebracht werden und die Umsetzung in Lösung durchgeführt wird, wobei die anschließende Abtrennung der Produkte einfach durchzuführen ist),
 - Aufarbeitungstechniken, z. B. Fortschritte der Chromatographie,
 - Elektrochemie als eine nebenproduktarme Technik, deren Einsatz aber heute oft dadurch gehemmt wird, dass man spezifisches Equipment einsetzen muss.

- Methoden für die Nachhaltigkeitsbewertung über die gesamte Prozesskette zum Vergleich von Verfahrensalternativen sind weiterzuentwickeln,
- in der Ausbildung muss das Wissen um die Möglichkeiten der Katalyse vermittelt werden.

Schlußfolgerungen / Diskussionspunkte

- Gleichrangigkeit von Hetero-, Homo-, Bio-Katalyse
- Bedeutung von High-Throughput-Methoden und spezialisierten Start-ups
- Bedeutung der Verfahrenstechnik
 - Reaktionsführung (z.B. in SCF, μ RT)
 - Immobilisierte Reagentien
 - Aufarbeitungstechnik
 - Elektrochemie
- Bewertung über den gesamten Produktionsprozeß
 - Rohstoff
 - Chemische Reaktion
 - Lösungsmittel, Katalysator
 - Reaktor
 - Aufarbeitung
- ⇒ Bewertungs-Tools
- Bedeutung der Ausbildung

Stand der Entwicklungen, Perspektiven und Anstöße aus Sicht der DECHEMA
Dr. Kurt Wagemann, 24.09.2002, Berlin



Ich bedanke mich bei den Herren Dr. Gläser, Universität Stuttgart und Prof. Hölderich, RWTH Aachen für die Unterstützung bei der Vorbereitung.

Abfallvermeidung bei der Produktion von Spezialchemikalien

Prof. Matthias Beller

(Institut für organische Katalysenforschung, Rostock - ifok)



Meine sehr verehrten Damen und Herren, lassen Sie mich Ihnen vorstellen. Ich komme vom Institut für organische Katalysenforschung in Rostock. Wir beschäftigen uns insbesondere mit der homogenen Katalyse auf der Basis von Übergangsmetallkatalysierten Reaktionen. Das Institut ist im Augenblick noch ein Landesinstitut, wird aber ab Beginn kommenden Jahres ein Leibniz-Forschungsinstitut sein.

Catalysis research at the IfOK

ifok
Institut für Organische
Katalysenforschung
Rostock

Main building, Rostock-City

Branch office in Warnemünde

- First Institute for Catalysis Research in Europe; founded 1952.
- 2001: ca. 80 Employees (18 permanent scientists, 18-20 postdocs, 10-12 Ph.D. students).
- Background and main expertise is homogeneous catalysis, based on transition metal complexes
- Transfer of excellent basic research to industrial applications

Allgemeines zu Feinchemikalien: Mehrere Studien haben in den letzten Jahren ein überproportionales Wachstum im Vergleich zu den Bulkchemikalien prognostiziert, je nach der Definition findet man unterschiedliche Produktionsvolumina. Die Produktlebenszeiten sind auch deutlich kürzer als bei den 200 oder 500 Produkten, die in großen Tonnagen produziert werden. Feinchemikalien sind gekennzeichnet durch

komplexere Strukturen, die Produktionsprozesse sind in der Regel Batchproduktionen und bei Neuentwicklungen ist die Zeit für die Verfahrensentwicklungen ein ganz entscheidender Erfolgsfaktor. Das setzt wiederum voraus, dass Technologien bereits vorrätig sein müssen. Ich halte das für einen ganz, ganz wesentlichen Punkt, und möchte ihn deshalb betonen. Eine Firma wird keine Feinchemikalie optimieren, nur weil die Reaktion auf dem Papier per se besser aussieht, sondern nur wenn die Technologien hundertprozentig in kurzer Zeit adaptiert werden können.

Um am Markt zunächst erfolgreich zu sein, muss nicht die beste Technologie für die Herstellung der Produkte eingesetzt werden. Insbesondere wenn man von Pharmaprodukten oder von Wirkstoffen spricht, ist das Verfahren praktisch nicht mehr – jedenfalls nicht bis zum Generika - umzustoßen, wenn das Produkt einmal über die FDA (US-amerikanische Food and Drug Administration) reguliert und zugelassen ist.

Allgemeines zu Feinchemikalien


Institut für Organische
Katalyseforschung
Freiburg

- Überproportionales Wachstum im Vergleich zu Bulkchemikalien.
- Produktionsvolumen: > 10 - 10.000 to/a.
- Produktlebenszeiten: i.a. > 5 - 30 Jahre.
- Komplexere Strukturen, die Mehrstufensequenzen i.a. 3 - 5; zum Teil > 10 notwendig machen.
- Produktionsprozesse oft Batchproduktionen bevorzugt in Multi-Purpose-Anlagen.
- Bei Neuentwicklungen ist die Zeit für die Verfahrensentwicklung ein wesentlicher Erfolgsfaktor.
- Um am Markt erfolgreich zu sein, muss nicht unbedingt die beste Technologie eingesetzt werden.
- Einmal etablierte Verfahrensrouten sind nur schwer ersetzbar; im Wirkstoffbereich praktisch nicht ersetzbar.

Die meisten von Ihnen kennen diese Gegenüberstellung: Industriesegment – Abfallvolumen. Roger Sheldon, aber auch andere haben sich diese Problematik etwas genauer angesehen. Sie sehen hier die Sheldonschen Zahlen, meine Einschätzung ist dahinter dargestellt, wobei ich von etwas geringeren Zahlen ausgehe. Nichtsdestotrotz ist es natürlich so, dass im Bereich Feinchemikalien signifikant größere Abfallmengen produziert werden, als das im Bereich der Erdölverarbeitung oder der Bulkchemikalien üblich ist. Wenn man den Bereich der Feinchemikalien aufsummiert, sieht man, dass man die entstehenden Abfallmengen trotzdem nicht unterschätzen darf, denn diese Menge ist im Gesamtsegment Chemie in der Summe größer als die Summe der Abfälle, die sich aus der Erdölverarbeitung ergibt, obwohl in dem letzteren Bereich die Menge der Produkte sehr viel größer ist.

Anfall an Nebenprodukten: der E-Faktor

$$E = \frac{\text{kg Nebenprodukte}}{\text{kg Wunschprodukt}}$$

R. A. Sheldon, ChemTech 1994, 24, 38.

Industriesegment	Produkt Volumen (t/a)	Anteil (kg) Nebenprodukte
Erdölverarbeitung	10^6 - 10^8	0.1 (< 0.1)
„Bulk Chemikalien“	10^4 - 10^6	< 1-5 (0.1 -1)
Feinchemikalien	10^2 - 10^4	5-50 (0.5 - 50)
Wirkstoffe	10^1 - 10^3	25-100+

➡ Bei 1.5 - 3 Mio to/a Feinchemikalien: 10 - 50 Mio to/a Nebenprodukte

Was ist das Ziel chemischer Methodenforschung oder des Sustainable Development oder der Green Chemistry, wie auch immer man es nennen mag ?

- Es sollen wenig Abfälle entstehen, und
- geringe Mengen an Ausgangsstoffe eingesetzt werden.
- Effizienz spielt eine große Rolle auch in Hinblick auf die Energie. Es ist darauf hinzuweisen, dass insbesondere dieser Punkt bei Hochschulentwicklungen im Labor völlig vernachlässigt wird.
- Aufarbeitungs- und Reinigungsschritte sollten vermieden werden. Um dies zu erreichen, muss der Aufbau komplexer Moleküle in wenigen Schritten ausgehend von einfachen Substraten erfolgen, um unnötige Reaktionsschritte zu vermeiden. Ansätze hierfür sind Multikomponenten- und Domino-Reaktionen, die mehrere bindungsbildende Schritte unter identischen oder nahezu identischen Reaktionsbedingungen in einem Prozeß kombinieren und sich häufig durch große Eleganz, hohe Stereoselektivität und einfache Reaktionsführung auszeichnen.
- Selektivität ist ein ganz wesentlicher Punkt und
- nicht zuletzt wird kein Verfahren realisiert, wenn die ökonomischen Randbedingungen nicht die Marktfähigkeit sicherstellen.

Und wenn man sich dann ansieht, was an chemischen Synthesen in der offenen wissenschaftlichen Literatur publiziert ist, dann kann man klar feststellen, dass die meisten auch heute noch veröffentlichten organischen Synthesen weit davon entfernt sind, diese Kriterien zu erfüllen.

ifok
Institut für Organische
Katalyseforschung
Rostock

Was wollen wir erreichen ..

Umwelt	Minimum an Abfallstoffen, verfügbare Ausgangsmaterialien
Effizienz	Energieeffiziente Prozesse mit hoher Atomökonomie; Domino Reaktionen, MCR's
Selektivität	Hoch selektive (chemo-, regio-, stereoselektive) Reaktionen (100% Ausbeute)
Ökonomie	Standard Ausstattung; Hohe Raum/Zeit Ausbeuten

➔ Die meisten organischen Synthesen verlaufen nicht effizient!

Katalyse ist eine zentrale Technologie, die dazu führen kann, dass chemische Prozesse und Verfahren umweltfreundlicher, entsprechend den eben geforderten Kriterien, ablaufen. Per se ist es natürlich so, dass ein nichtkatalytisches Verfahren eigentlich das ideal anzustrebende Verfahren ist, weil man sich dann nicht mit der Frage des verbrauchten Katalysators, des Katalysatorrecyclings etc. befassen muss. Aber Katalysatoren lassen sich nicht vermeiden, weil sie es erlauben, die Energiebarriere bei Stoffumwandlungsprozessen signifikant zu reduzieren und bestimmte Stoffumwandlungsprozesse so überhaupt erst möglich werden.

ifok
Institut für Organische
Katalyseforschung
Rostock

Katalyse - Forschung für das 21te Jahrhundert

Reaktionskoordinate

Reaktionskoordinate

Höhere Selektivitäten
Höhere Aktivitäten

➔

- Rohstoff- und Energieeinsparung
- Verringerung von Abfallstoffen

➔

Ökonomisch und ökologisch verbesserte Produktionsverfahren

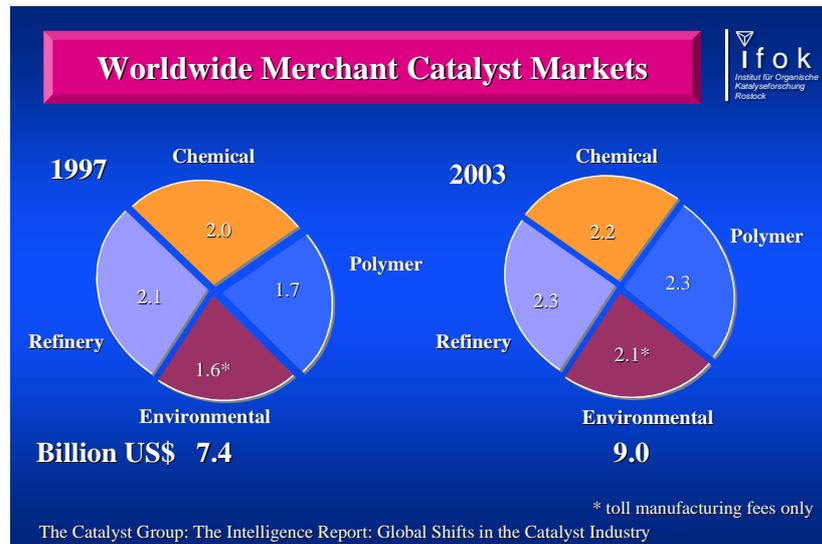
Marktwert der durch katalytische Verfahren hergestellten Produkte > 2.5 x 10⁶ Mio US\$.

Der Marktwert der mit katalytischen Verfahren produzierten Produkte liegt signifikant über dem Bruttosozialprodukt einzelner westlicher Industrienationen. Den meisten von Ihnen ist bekannt, dass 80 bis 90 % aller derzeit hergestellten Produkte über katalytische Verfahren hergestellt werden.

Katalysatoren als solche haben natürlich auch einen signifikanten Marktwert, ich habe dies einmal hier kurz aufgeführt.

Das sind die Zahlen von 1997, die gesichert sind, die Zahlen für 2003 sind Prognosen und stellen ein entsprechendes Wachstum dar, insbesondere auch im Bereich der

Umwelttechnologie, aber auch im Chemiebereich. Katalysatoren spielen für die Chemie eine wichtige Rolle, aber eben nicht allein für die Chemie.



Nun zu der Frage, was die Anforderungen an einen industriell für die Feinchemikalienproduktion genutzten Katalysator sind. Diese Anforderungen unterscheiden sich signifikant von denen für einen Katalysator, der für die Bulkchemikalienproduktion oder für die Erdölverarbeitung eingesetzt wird:

- Grundsätzlich ist natürlich bei allen chemischen Prozessen eine hohe Ausbeute oder Selektivität anzustreben.
- Ein Punkt, der insbesondere bei dem Bereich der Wirkstoffzwischenprodukte eine Rolle spielt, ist die Reinheit der Produkte. Bei sehr vielen homogenkatalytischen Prozessen verwenden wir in der Regel Übergangsmetalle, die Metalle und Liganden können jedoch in Spuren im Produkt vorhanden sein. Ein ansonsten idealer umweltfreundlicher Prozess kann verhindert werden, wenn es z. B. nicht gelingt eine Reinheit von z. B. weniger als 1 ppm Rhodium oder eines anderen Übergangsmetalls zu erreichen.
- In der Regel spielt die Rückgewinnung eines Katalysators bei der homogenen Katalyse eine große Rolle, insbesondere wenn man von teuren Edelmetallkatalysatoren ausgeht.
- Die Katalysatorproduktivität spielt eine große Rolle, aber auch da findet man häufig eine große Diskrepanz zwischen den Arbeiten der universitären Forschungsinstitute und dem, was die Industrie benötigt. Es ist klar, dass die Verfahren umso besser funktionieren, je mehr Katalysator man einsetzt. Häufig gibt man sich an der Universität damit zufrieden, es grundsätzlich gezeigt zu haben, dass Reaktion funktioniert, allerdings klafft eine große Lücke zwischen diesem Schritt und der Anwendung in der industriellen Produktion. Und diese Lücke wird nach meinem Eindruck auch von den Firmen zur Zeit nicht beforscht. Der Fokus in der ist Industrie auf das Tagesgeschäft gesetzt und es wird in dem Sinne eigentlich nicht strategisch Technologievorhaltung betrieben, so wie es bei den großen Firmen etwa bis vor 10 oder 15 Jahren noch üblich war.

- Die Katalysatoraktivität ist noch eine wichtige Zielgröße, die häufig im akademischen Bereich, insbesondere für die organische Chemie, nicht berücksichtigt wird.

Criteria for an Industrial Fine Chemical Catalyst



- ➔ High product yield and selectivity
- ➔ Product purity ⇒ toxicity, cost for purification
 < 1 ppm of metal (and ligand) content in pharmaceutical end products (agro intermediates may be higher)
- ➔ Recycling, catalyst productivity, ton ⇒ catalyst cost
 For late transition metals: >1000 (small scale, high value);
 >20*000 (large scale, low price)
- ➔ Catalyst activity, tof ⇒ production capacity
 >500/h (small scale); >10*000/h (large scale)

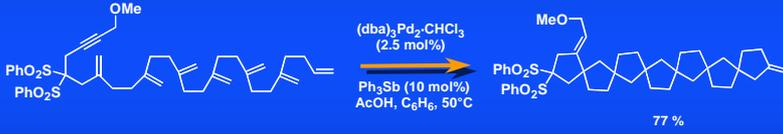
Nach meiner Auffassung ist die Ganzheitlichkeit von Verfahren ein sehr wesentlicher Punkt. Man findet häufig Beispiele wie diese im Folgenden beschriebene Reaktion, bei der in einem Reaktionsschritt eine Vielzahl von Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindungen geknüpft wird. Es handelt sich hier um einen hocheleganten Prozess und ein Beispiel für eine atomeffiziente Synthese. Man betrachtet hier jedoch einen einzelnen Reaktionsschritt und nicht die gesamte Abfolge des Problems, das die Herstellung des Edukts ist. Diese Synthese verläuft nicht ad hoc effizient.

Es werden in der Regel Einzelbetrachtungen gemacht und man muss sich davor hüten, verschiedene Synthesen ohne die ganzheitliche Beurteilung von Vor- und Folgeschritten miteinander zu vergleichen. Auf der anderen Seite ist es jedoch zunehmend schwierig mögliche Synthesen herunterzubrechen und sie tatsächlich ganzheitlich zu analogisieren. Als allgemeine Regel gilt, dass jedoch atomeffiziente Schritte möglichst hundertprozentig in Synthesen eingebaut werden sollten.

Ganzheitliche Betrachtung ist notwendig



Atomeffizienz: $\text{kg Wunschprodukt} / \text{kg alle Produkte}$
 Atomökonomie: $M_w \text{ Wunschprodukt} / \sum M_w \text{ alle Produkte}$



B. M. Trost, Y. Shi, J. Am. Chem. Soc, 1991, 113, 701.

Ökonomische und ökologische Vorteile

➔

Weniger Nebenprodukte und kürzere Synthesewege

Aber: Gesamtbetrachtungen der Synthesen sind notwendig !!

Bevor ich im Folgenden Beispiele für erfolgreich konzipierte Beispiele zeigen werden, lassen sie mich vorher noch einmal methodische Defizite darlegen. Ich trenne dabei in *Reaktionen* und *Technologien*.

Zunächst zu den *Reaktionen*:

- Aromatenfunktionalisierungen sind sehr wichtige Reaktionen. 80 % aller Reaktionen im Wirkstoffbereich und aller Pharmaprodukte haben aromatische oder heteroaromatische Strukturelemente. Wir verwenden heute in der Technik immer noch die Verfahren, die eigentlich schon vor über 100 Jahren entwickelt wurden, weil sie etabliert sind und gut funktionieren, aber mit stöchiometrischen Anfall von Nebenprodukten.
- Aminierungsreaktionen stellen noch ein großes methodisches Defizit dar. Die Knüpfung von C–N-Bindungen ist sehr viel weniger breit entwickelt als Reaktionen zur Knüpfung von C–C- oder C–H-Bindungen.
- Auf die Heteroaromaten- und auch die Oxidationschemie ist mein Vorredner bereits eingegangen, dazu brauche ich nicht noch einmal zu sprechen.
- Ein wichtiger Punkt, der wieder in Richtung der ganzheitlichen Betrachtung geht, ist die Schutzgruppenchemie. Bei einer Vielzahl von Reaktionen, insbesondere auch bei den Aromatentransformationen, werden mitunter funktionelle Gruppen eingeführt, um einfach eine bestimmte funktionelle Gruppe oder Position im Molekül zu schützen. Dabei werden zwei Reaktionsschritte umsonst durchgeführt, da die eingeführte Gruppe am Ende wieder abgespalten wird und nicht mehr im Produkt auftaucht. Dies geht in der Regel mit einem stöchiometrischen Anfall von Nebenprodukten einher. Das heißt, dass direkte selektive Reaktionen an funktionalisierten Verbindungen eine große Herausforderung sind. Häufig werden entsprechende Methoden an den sogenannten "einfachen Modellsubstraten" etabliert. Allerdings fehlt hier dann der Transfer zu einer komplexeren Gesamtreaktion. Wenn man zum Beispiel einen Oxidationskatalysator für Alkoholoxidationen entwickelt, dann kann man Benzylalkohole, auch den einen oder anderen aliphatischen Alkohol, sehr gut zur Reaktion bringen. Möglicherweise wird aber DER Alkohol, der eine Vielzahl von funktionellen Gruppen trägt, beispielsweise Hydroxygruppen wie in Zuckeralkoholen, der für die Technik und für die Wirtschaft interessant wäre und einen besonders schwierigen Fall darstellt, nicht untersucht.
- Selektive C–H-Aktivierungen sind ein sehr wichtiger Punkt, weil wir bei diesen Reaktionen natürlich Reaktionsschritte einsparen können,
- und es besteht noch ein sehr großer Bedarf an verbesserten asymmetrischen Reaktionen.

Zu den *Technologien*:

- Die schnellere Implementierung von neuen Reaktionen und Reagenzien ist wünschenswert.
- Verfügbarkeit und einfacher Einsatz von sogenannten Nischentechnologien (z. B. Elektrochemie).
- Ein ganz wichtiger Punkt für die Katalyse insgesamt ist die Verfügbarkeit von Katalysatoren und Liganden. Wir kennen etwa 5.000 bis 10.000 chirale

Liganden für Hydrierungsreaktionen. Wenn man jedoch sieht, welche Zahl von Liganden dann tatsächlich für technische Anwendungen verfügbar ist, dann ist das ein verschwindend kleiner Anteil. Wenn diese Verfügbarkeit der Liganden nicht gewährleistet ist, so sind sie auch nicht für eine schnelle Implementierung in Prozessen abrufbar, so dass eine technische Realisierung per se nicht durchführbar ist.

- Aufarbeitungskonzepte spielen eine große Rolle und
- bei der high-throughput (HTP)-Katalyse und -analyse ist eine deutliche Entwicklung erkennbar. Dies ist ein Bereich, der sich in der Zukunft weiter entwickeln muss und sollte.

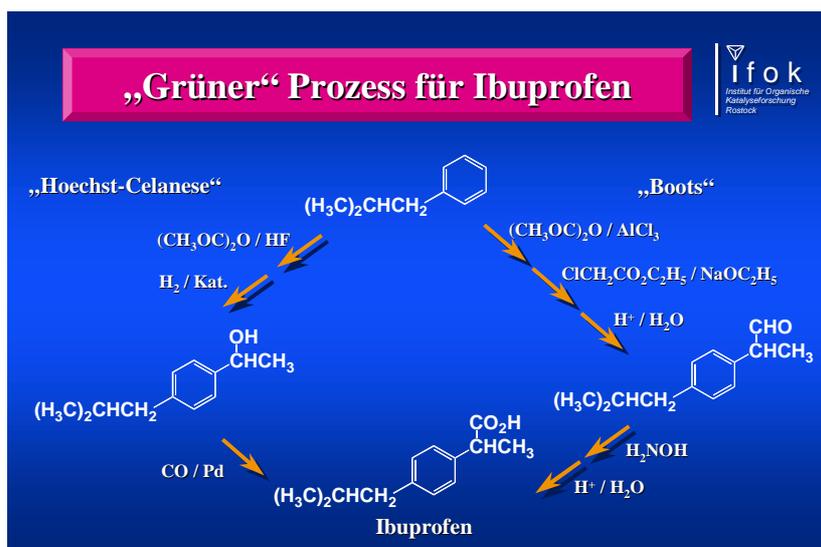
Beispiele für methodische Defizite	
Reaktionen	Technologien
<ul style="list-style-type: none"> • Aromatenfunktionalisierung (Aldehyde, Ketone, alkyl. Derivate) • Aminierungsreaktionen • Heteroaromatensynthesen (Chinoline, Pyridine, ...) • Oxidationschemie • Vermeidung von Schutzgruppenchemie • Selektive CH-Aktivierungen • Ausgewählte asymmetrische Reaktionen 	<ul style="list-style-type: none"> • Schnelle Implementierung von neuen Reaktionen und Reagenzien • Verfügbarkeit und einfacher Einsatz von „Nischentechnologien“ • Verfügbarkeit von Katalysatoren und Liganden • Neue Aufarbeitungskonzepte (Metal- und Ligandenverunreinigungen in Produkten) • HTE-Katalyse und HTE-Analytik

Nun möchte ich zu einigen positiven Beispielen, aber auch Problemfällen kommen.

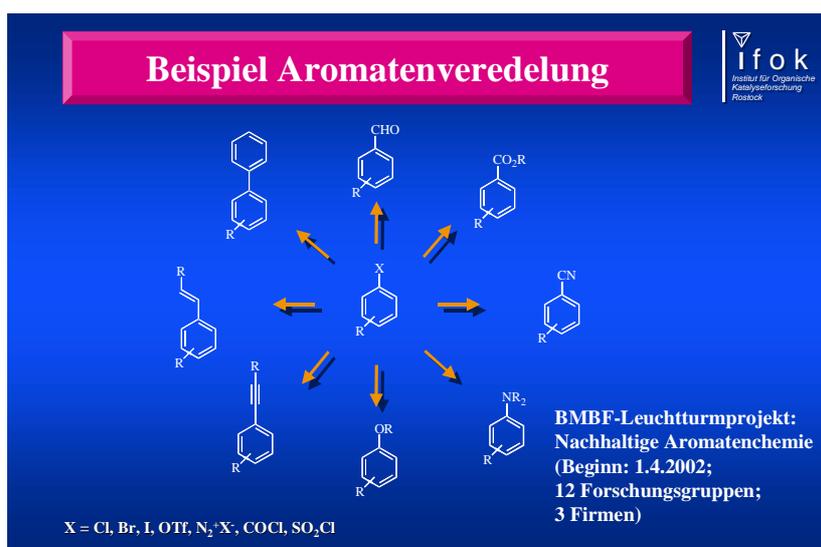
Ein Paradebeispiel, das auch 1997 mit dem Green Chemistry Award des amerikanischen Präsidenten ausgezeichnet wurde, ist dieser Prozess zur Herstellung von Ibuprofen. Ibuprofen ist ein Wirkstoff eines der wichtigsten nichtsteroidalen Entzündungshemmer und in sehr starken Schmerzmitteln enthalten.

Hier ist zunächst der Prozess dargestellt, der in den 1980er Jahren von der amerikanischen Pharmafirma Boots betrieben wurde: er führt zu ca. 30 bis 35 Kilogramm Nebenprodukten pro Kilogramm des Produktes Ibuprofen.

Hier ist der alternative dreistufige katalytische Weg dargestellt, bei dem jeder Einzelschritt katalytisch verläuft. Dies ist auch ein sehr schönes Beispiel für eine ganzheitliche Betrachtung. Es werden pro Kilogramm Ibuprofen deutlich weniger als 5 Kilogramm Nebenprodukte gebildet. Bei Betrachtung eines Reaktionsschrittes alleine, der sicherlich noch am meisten Verbesserungsbedarf aufweist, könnte man an bzgl. der Acylierung mit flüssigem HF eigentlich nicht zu der Aussage kommen, dass es sich hier um einen besonders „grünen“ Reaktionsweg handelt. Die Anwendung von Flusssäure ist keine angenehme Technologie und auch Korrosionsprobleme stellen apparativ einige Anforderungen dar. In der gesamtheitlichen Betrachtung erkennt man jedoch, dass in der Summe bei der Reaktion kein Salz gebildet wird, so dass dieser Reaktionsweg insgesamt in Hinblick auf die entstehenden Abfälle günstiger ist, was sich auf der Kostenseite auch positiv widerspiegelt.



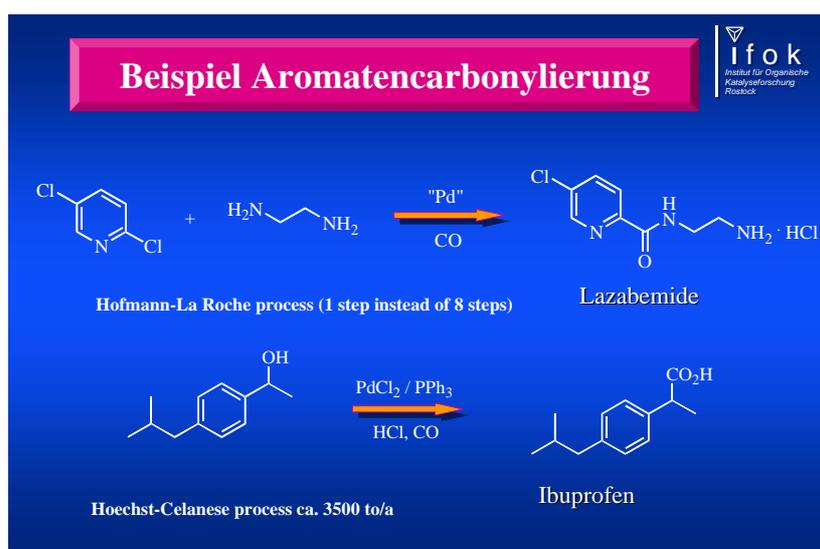
Ein weiteres Beispiel ist der Bereich der Aromatenveredelung. Dies ist ein sehr gutes Beispiel, wie lange Technologien von der Entdeckung im Universitätslabor bis zur Anwendung brauchen. Derartige Reaktionen wurde Ende der 1960er Jahre erstmals in Amerika entdeckt. Parallel dazu gibt es Arbeiten von japanischen Forschern. Dann gab es in den 1970er Jahren weitere methodische Entwicklungen, basierend auf diesen Reaktionen, hinzu. Zur ersten technischen Realisierung kam es dann meines Wissens nach bei der Ciba-Geigy, später Novartis. Heute kann man davon ausgehen, dass mindestens 25 bis 30 dieser Prozesse etabliert sind. Das zeigt aber, dass von der eigentlichen wissenschaftlichen Entdeckung - Ende der 1960er Jahre, Anfang der 1970er Jahre - praktisch 20 Jahre bis zum ersten technischen Einsatz vergangen sind und 25 bis 30 Jahre, bis man jetzt eine Reihe von technischen Anwendungen etabliert hat. Es sollte vielleicht auch nicht unerwähnt bleiben, dass es seit April 2002 zu diesem Prozess auch ein BMBF-Leuchtturmprojekt mit 14 Gruppen gibt, wo auch einige Forschungsgruppen ökotoxikologische Bewertungen durchführen.



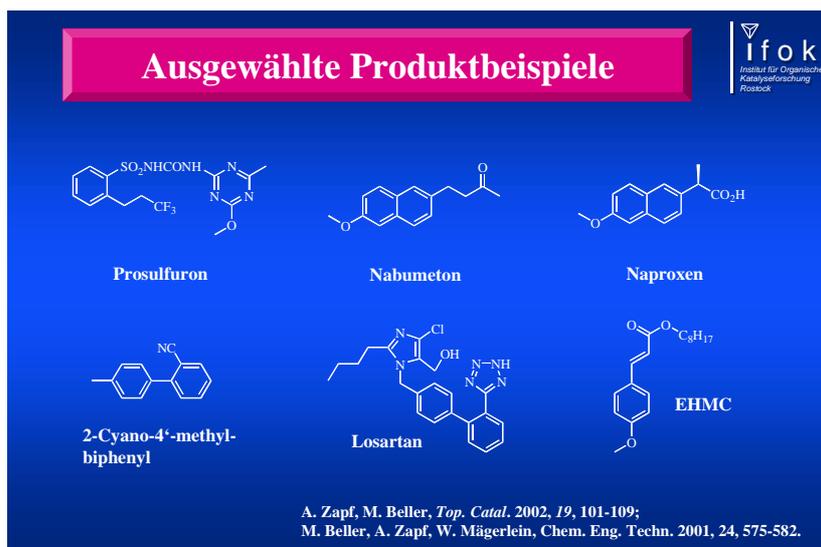
Ich will noch ein Beispiel bringen, das erklärt, warum diese Art von Chemie besondere Vorteile aufweist. Das ist der Hoffmann-La Roche-Prozess zur Herstellung von Lazabemid. Dieser Wirkstoff ist vorher in acht klassisch-organischen Stufen

hergestellt worden. Dazu gehören dann auch sieben Aufarbeitungsstufen mit Lösungsmitteln, siebenmal Energieaufwendungen etc. Man kann durch einen katalytischen Schritt die gesamte Synthese so umstellen, dass man diese sieben Reaktionsstufen einsparen kann. Jede dieser Reaktionsstufen verläuft mit weniger als 100 % iger Ausbeute. Bei dem katalytischen Verfahren hat man natürlich eine deutlich höhere Gesamtausbeute und man spart die Aufwendungen für die Aufarbeitungen. So ist die Produktausbeute am Ende natürlich deutlich höher, als bei dem klassischen Verfahren.

In diesem Fall macht es sich dann auch bezahlt, einen vergleichsweise teuren Edelmetallkatalysator einzusetzen und einen Halogenaromaten direkt zu verwenden, der kommerziell verfügbar ist.



Ausgewählte Produktbeispiele für technisch realisierte Prozesse in diesem Bereich sind im folgenden Bild dargestellt. Der erste Prozess, der hier realisiert wurde, war die Herstellung des Herbizids Prosulfuron. Andere Beispiele, von denen hier nur einige ausgewählt sind, sind im Bereich der AT₂ – Antagonisten im Pharmabereich anzuführen. Da sind zum Beispiel das Naproxen, das von der Firma Albermark hergestellt wird, und ein UV – Absorber zu nennen. Diese Produkte werden mit palladium- oder nickelkatalysierten Reaktionen technisch realisiert.

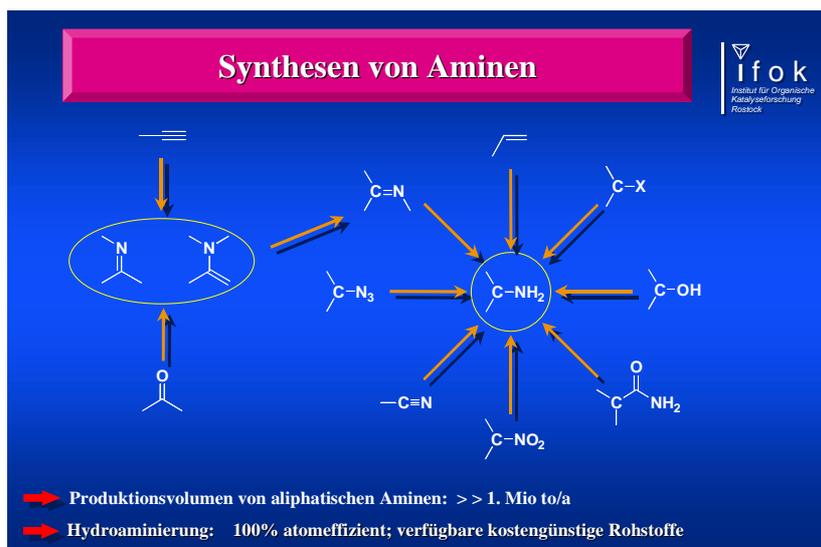


Ein anderes Gebiet sind die Synthesen von Aminen. Im Labor sind eine Vielzahl von Syntheseverfahren realisiert worden. In der folgenden Abbildung sind die gängigen Methoden dargestellt. Die meisten dieser Verfahren jedoch große Probleme und werden praktisch technisch nicht genutzt. Es gibt eigentlich nur wenige Methoden, die technisch häufiger angewendet werden.

Das ist auf der einen Seite die Reduktion der Imine, entweder als reduktive Aminierung direkt oder wenn man chirale Amine herstellt, dann die Hydrierung der entsprechenden Imine, sowie die Aminierung von entsprechenden Alkoholen.

Sie können Imine auch ausgehend von Alkinen herstellen oder den entsprechenden Carbonylverbindungen. Die letztere Reaktion ist der wesentliche technische Prozess für die Darstellung von Aminen.

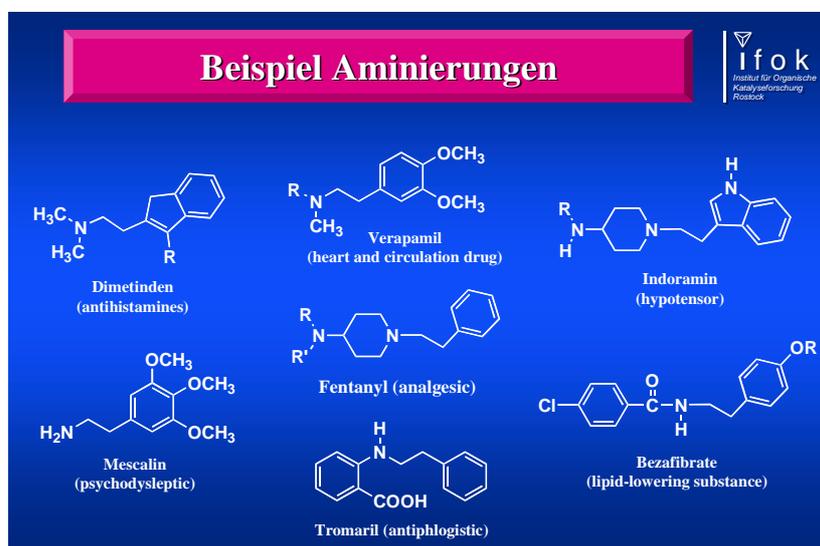
Dies ist aber ein mehrstufiger Prozess und grundsätzlich gibt es Bedarf für die Vereinfachung von Aminsynthesen.



Hier sind einige Beispiele für aliphatische Amine aus dem Pharmabereich gezeigt. Dies stellt nur einen kleinen Ausschnitt aus den tatsächlich eingesetzten

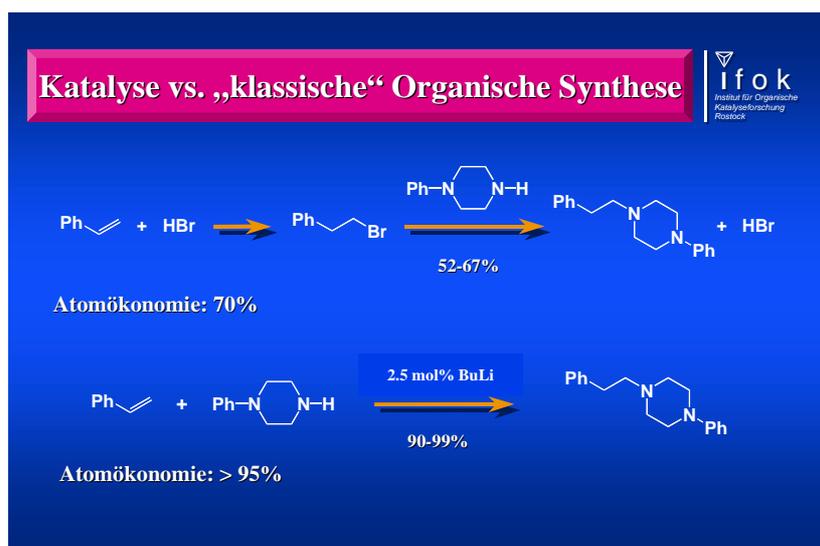
Verbindungen dar. Es sind die jeweiligen Anwendungen und auch einige Naturstoffe aufgezeigt.

Allen Verbindungen gemeinsam ist, dass sie nicht direkt auf einem atomeffizienten Weg hergestellt werden, sondern über mehrere Reaktionsschritte, unter anderem über Schutzgruppen und mit stöchiometrischem Salzanfall.

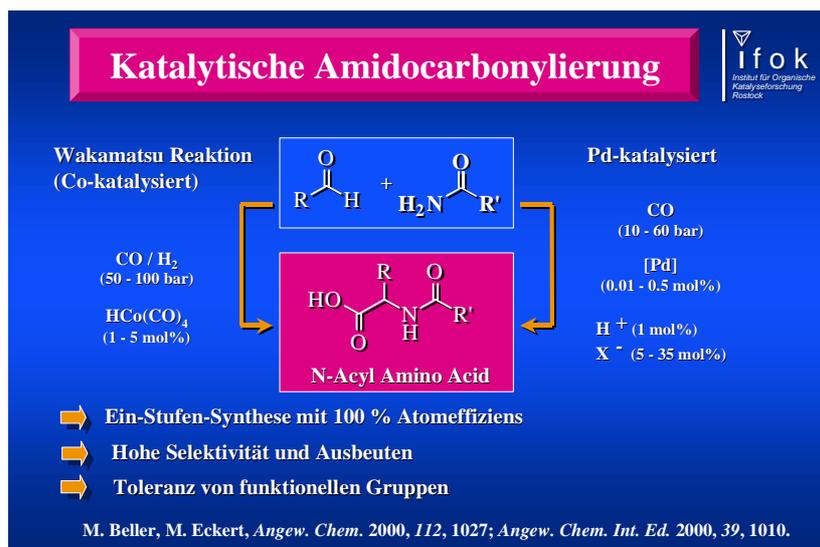


Hier ist einmal ein typisches Beispiel gezeigt für eine entsprechende Reaktion. Zu den Aryl-ethyl-aryl-piperazinen gibt es allein in den 1980er Jahren nahezu 100 Patente, die sich mit Anwendungen von diesen Verbindungen beschäftigen. Alle Synthesen sind durch Mehrstufenprozesse charakterisiert, so dass selbst bei 100 % iger Ausbeute mindestens 30 % Nebenprodukte entstehen.

Man kann die Produkte auch mit basischen Katalysator direkt herstellen. Die Atomeffizienz ist auf diesem Weg sehr viel größer und man hat lediglich einen einstufigen Prozess.



Ein weiterer Bereich, wo meines Erachtens Verbesserungen in der Feinchemikalienproduktion möglich und notwendig sind, ist der Bereich der Aminosäuren.



Ganz zum Schluss meines Vortrages werde ich noch ein wenig auf die Oxidationschemie eingehen. Wenn man über die Oxidationschemie spricht, dann insbesondere auch über Wasser und Luft. Dies sind das Lösungsmittel und das Oxidationsmittel, die bei diesen Reaktionen anzustreben sind.

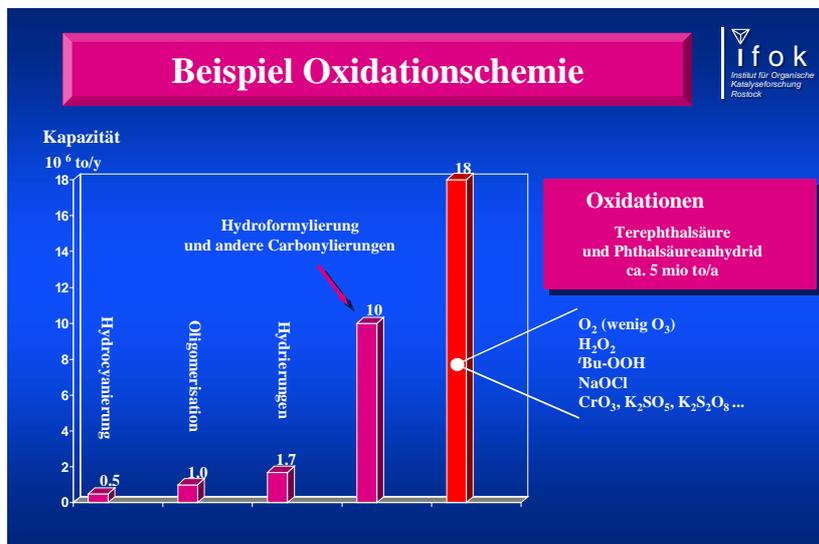
Mit Luft und Wasser...



Die Oxidationschemie hat, was die homogene Katalyse angeht, die größte Bedeutung in Hinblick auf die Produktionsmenge. Das rührt insbesondere daher, dass die Bulkprodukte, über die wir heute nicht reden wollen, Terephthalsäure und Phthalsäureanhydrid, über homogen-katalytische Prozesse produziert werden.

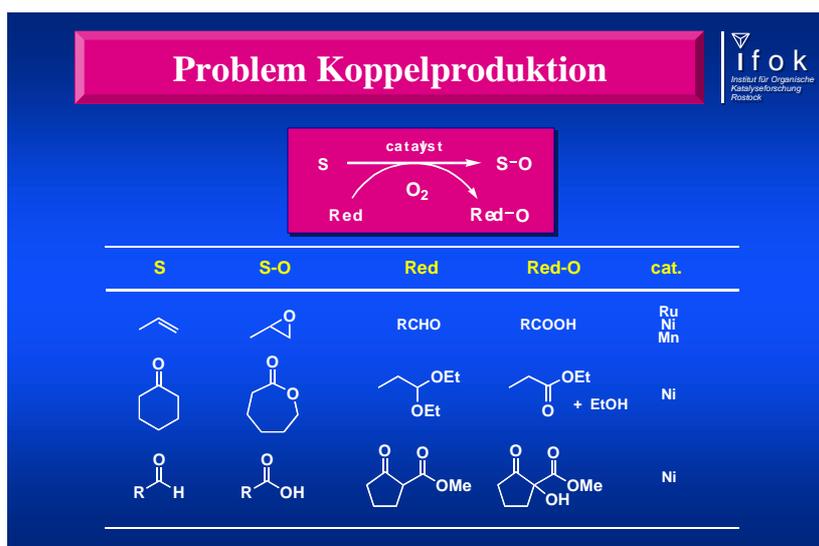
Aber es gibt auch eine ganze Reihe von Feinchemikalien, die über Oxidationskatalyse hergestellt werden. Und da ist heute immer noch richtig, dass häufig Oxidationsmittel in stöchiometrischen Mengen eingesetzt werden. Für Feinchemikalien sollten in der Regel entweder idealerweise Luft, Wasserstoffperoxid oder die Alkylperoxide eingesetzt werden. Auch Bleichlauge hat für die Feinchemikalienproduktion, was die Sicherheitstechnik angeht, einen gewissen Charme. Die entstehenden Natriumchloridabfälle werden in der Regel bei der Feinchemikalienproduktion nicht so drastisch gewertet. Aber es gibt immer noch eine ganze Reihe von

Oxidationsreaktionen, die stöchiometrische Mengen toxischer Übergangsmetalle verwenden und das sollte also nicht sein.



Wenn wir über Oxidationschemie sprechen, und das wird gerne bei Anwendung von Luft oder Sauerstoff vergessen, dann müssen wir auch über Koppelproduktion sprechen. Das betrifft wieder den Punkt der ganzheitlichen Betrachtung.

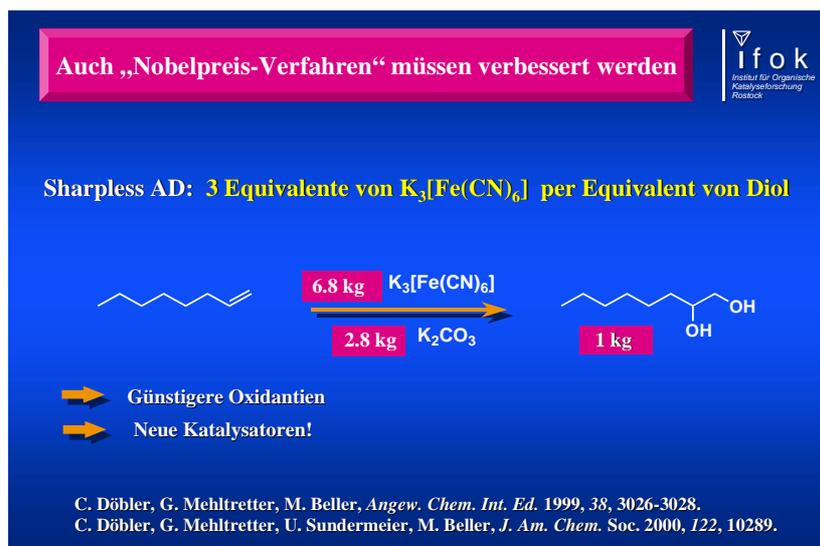
Es ist häufig umweltfreundlicher, an Stelle von Sauerstoff z. B. Bleichlauge oder Wasserstoffperoxid einzusetzen, wenn mit Sauerstoff ein Koppelprodukt entsteht. Die bekannten Oxidationsverfahren, bis auf zwei Ausnahmen, bei denen Sauerstoff eingesetzt wird, benötigen ein zusätzliches Reduktionsäquivalent. In diesem Fall entstehen immer Koppelprodukte. Das ist nicht zielführend. Gerade bei der Feinchemikalienproduktion ist eine Koppelproduktion wirtschaftlich sehr problematisch.



Ganz zum Schluss noch eine ein wenig provokative Darstellung unter dem Motto „Auch Nobelpreisverfahren müssen verbessert werden“.

Eine Reaktion, die von Sharpless und Mitarbeitern entwickelt wurde, die sogenannte asymmetrische Dihydroxylierung von Doppelbindungen, ist, um es ganz deutlich zu sagen, ein phantastisches Verfahren, um chirale Diole herzustellen. Es wurde im letzten Jahr mit dem Nobelpreis bedacht. Aber auch ein solches Verfahren hat seine Probleme. Wenn man sich die Herstellung von größeren Mengen, z. B. in einer Größenordnung von 1 Kilogramm vorstellt, dann erkennt man, dass bei dieser Reaktion im wesentlichen Eisensalze produziert werden und nicht das gewünschte Diol, selbst wenn man von einer 100 %igen Ausbeute ausgeht.

Das zeigt, dass es gerade auch bei asymmetrischen Oxidationsverfahren einen großen Bedarf nach Verbesserung gibt.



Als Einstieg in die nachfolgende Diskussion hier meine letzte Folie, in dem ich auch den Begriff der „Dream reactions“ verwendet habe.

Ich habe diesen Begriff allerdings in Anführungszeichen gesetzt. Es wurde bereits erwähnt, dass es eine allgemein etablierte und anerkannte Aufstellung von Herausforderungen gibt, die man für den Bereich der Bulkchemikalien als wichtig und notwendig ansieht. Überraschenderweise bleiben die Ziele – zumindest seit den 1990er Jahren, seitdem ich dies verfolgt habe – relativ konstant. Das bedeutet, dass man graduelle Fortschritte macht, aber es relativ schwierig ist, kurzfristig Durchbrüche zu erzielen.

Die Wunschreaktionen für die Feinchemie sind vielleicht nicht ganz so hoch anzusiedeln, wie z. B. Methan zu Methanol oder Methan und Kohlendioxid zu Essigsäure umzusetzen, aber ich glaube auch, dass hier noch ein großer Bedarf nach Verbesserungen existieren. Die Wunschreaktionen sind im Einzelnen:

- Allgemein anwendbare hochselektive asymmetrische Hydrierkatalysatoren. Da wird der eine oder andere fragen, warum das noch ein Wunschziel ist. Es gibt doch, wie ich vorhin gesagt habe, einige tausend Liganden und in der entsprechenden Fachliteratur werden jede Woche quasi mehrere Arbeiten zur asymmetrischen Hydrierung publiziert. Das Problem bei diesen Reaktionen und Liganden ist, dass sie relativ speziell und einzigartig für Reaktionen sind. Es gibt keine wirklich allgemein anwendbaren Katalysatorsysteme, die für mehrere Produktklassen und für viele funktionelle Gruppen gleich gut

arbeiten. Daher besteht in diesem Bereich insbesondere nach praktikablen kostengünstigen Katalysatoren weiterhin ein großer Bedarf.

- Schutzgruppenfreie Funktionalisierungen, gerade an komplexeren Verbindungen findet man sie ganz selten und sie werden auch relativ wenig in der Forschung untersucht.
- Der günstigste und einfachste Weg, chirale Amine herzustellen, wäre die asymmetrisch katalytische reduktive Aminierung. Diese Reaktion ist bis auf ganz wenige erste Beispiele heute nicht möglich. Der BASF-Prozess, der im Augenblick für die Aryl- und Ethylamine etabliert über Biokatalyse durchgeführt wird, würde meines Erachtens sofort ökonomisch gegenüber einem solchen Prozess verlieren, wenn man einen einfachen, homogenen, chiralen Katalysator hätte, der diese Verbindung mit einer Ausbeute und Selektivität über 90 % hydrieren würde. Im Augenblick gibt es einen solchen Katalysator nicht. Wenn es ihn gäbe, würde ich eine sofortige Anwendung in der Industrie sehen.
- Direktfunktionalisierungen von Aromaten sind bereits angesprochen worden.
- Katalytische metallorganische Kupplungsreaktionen. Derzeit verwenden fast alle Forschungsgruppen weltweit die teuren Übergangmetallkatalysatoren, Palladium, Nickel, Rhodium, Ruthenium. Für die billigen und toxikologisch nicht problematischen Metalle Eisen oder Mangan gibt es vergleichsweise wenige Anwendungen. Es gibt Ansätze aus dem MPI in Mülheim, aber es ist überraschend, wie wenig auf diesem Gebiet eigentlich geforscht wird, obwohl es einen großen Bedarf gibt. Hätte man einen Eisen- oder Mangan-Katalysator, der eine Aryl-X-Verbindung selektiv breit anwendbar funktionalisieren würde, käme er – so würde ich prognostizieren – zu einer sofortigen oder unmittelbaren Anwendung.

Stichworte sind auch:

- Asymmetrische Epoxidation,
- Direktaminierung von Olefinen und Aromaten,
- Selektive Funktionalisierungen an nachwachsenden Rohstoffen,
- Und ein letzter Punkt, der schon seit mehreren Jahren eine Rolle spielt, sind halogenidfreie Synthesen von Isocyanaten z. B. für die Polyurethane durch Carbonylierung von Nitroverbindungen. Hier hat man bereits viel versucht, ist aber am Ende immer wieder an der Katalysatorproduktivität gescheitert.

Ich hoffe, dass ich einen Einblick in die homogene Katalyse gegeben habe und ich würde mich freuen, wenn es dazu eine interessante Diskussion geben würde.

“Dream Reactions” für die Feinchemie

- ➔ Allgemeiner anwendbare hochselektive asymmetrische Hydrierkatalysatoren
- ➔ Schutzgruppenfreie Funktionalisierungen
- ➔ Chirale reduktive Aminierung
- ➔ Direktfunktionalisierungen von Aromaten
- ➔ Katalytische metallorganische Kupplungsreaktionen mit Fe oder Mn
- ➔ Effiziente asymmetrische Epoxidationen
- ➔ Direktaminierung von Olefinen und Aromaten
- ➔ Selektive Funktionalisierungen von nachwachsenden Rohstoffen
- ➔ Halogenidfreie Synthese von Isocyanaten (Carbonylierung von Nitroverbindungen)

Abfallvermeidung bei Produktionen für organische Spezialchemikalien durch den Einsatz hochspezifischer Katalysatoren

Dr. Frank Marscheider-Weidemann

(Fraunhofer-Institut für Systemtechnik und Innovationsforschung, Karlsruhe)

Fachgespräch 24. September 2002
“Abfallvermeidung bei Produktionen für organische Spezialchemikalien durch den Einsatz hochspezifischer Katalysatoren”

Zwischenergebnisse des Projekts und Vorstellung des Konzepts zur Bezifferung des Abfallvermeidungspotentials

Dr. Frank Marscheider-Weidemann
Fraunhofer-Institut für Systemtechnik und Innovationsforschung, Karlsruhe

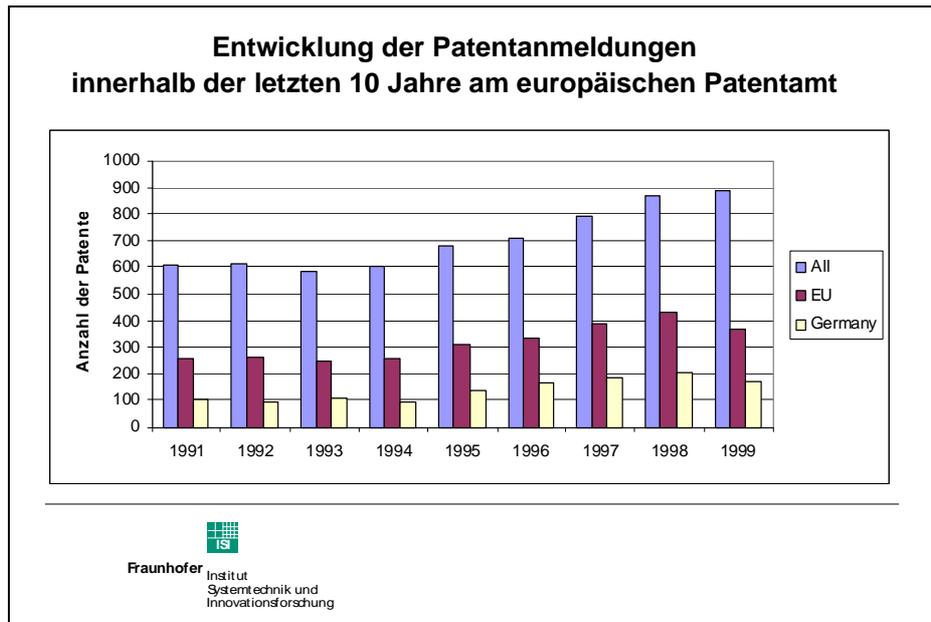

Fraunhofer Institut Systemtechnik und Innovationsforschung

Meine Damen und Herren, lassen Sie mich eingangs etwas über das Fraunhofer-Institut für Systemtechnik und Innovationsforschung in Karlsruhe sagen und Ihnen das Umfeld erläutern, in dem das Projekt durchgeführt wird.

Unser Institut, das mit „ISI“ abgekürzt wird, wurde vor 30 Jahren gegründet. Wir forschen nicht an Hardware, sondern erweitern das naturwissenschaftlich-technisch orientierte Fachspektrum der Fraunhofer-Gesellschaft um wirtschaftliche und gesellschaftspolitische Aspekte. Als interdisziplinäres Institut der Innovationsforschung konzipiert das Fraunhofer ISI neue Anwendungen moderner Techniken, innovative technikbezogene Dienstleistungen und organisiert Pilotvorhaben. Wir sind damit auch auf Forschungsvorhaben eingestellt, deren Fragestellungen, wie beim vorliegenden Vorhaben, etwas „weich“ formuliert sind. Wir haben uns zusammen mit der Universität Stuttgart um das Projekt im Rahmen einer UFOPLAN-Ausschreibung beworben.

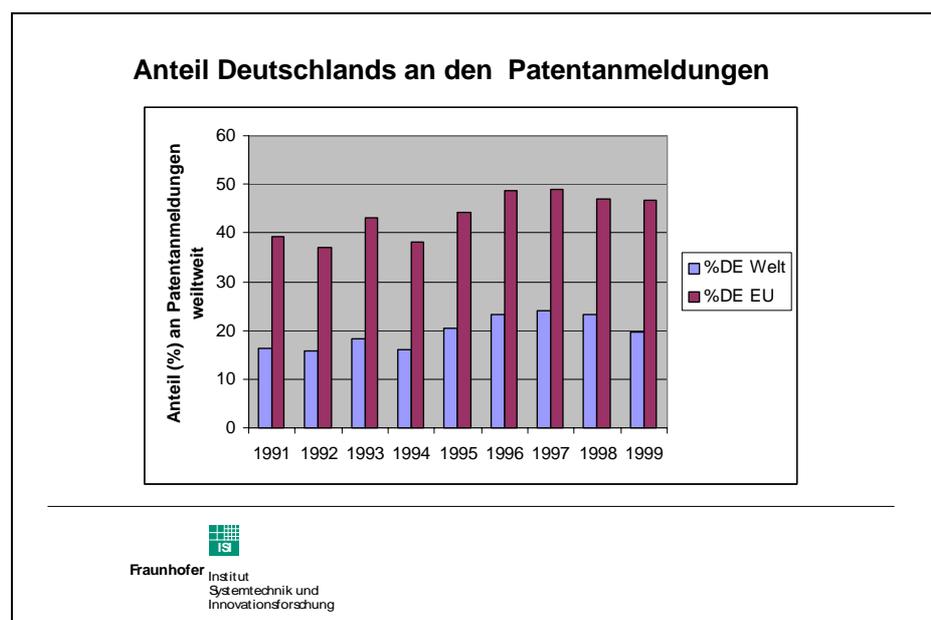
Die Katalyse stellt seit Jahren einen kontinuierlichen und bedeutenden Nachhaltigkeitspfeiler der Chemie dar. Auf dem folgenden Bild sind die katalyserelevanten Patentanmeldungen der letzten 10 Jahre am Europäischen Patentamt dargestellt¹. Nach einer gewissen Stagnation der Anmeldungen Anfang der 1990er Jahre nimmt die Zahl kontinuierlich zu. Im Zeitraum 1991 bis 2001 wurden über 12 000 Patente zum Thema Katalyse identifiziert.

¹ Berücksichtigt wurden Anmeldungen innerhalb der Patentklassen B01J-021 bis B01J-038 sowie C08F-004.



Der Anteil der Patentanmeldungen deutscher Firmen lag bei ca. 20 % aller Patentanmeldungen weltweit und bei knapp 50 % der europäischen Anmeldungen. Unter den 10 Firmen mit den meisten Patentanmeldungen in den Jahren 1998 bis 2000 sind auf den ersten drei Plätzen die BASF, Bayer und die Degussa zu finden. Man sieht, die Katalyse hat nichts von ihrer Attraktivität verloren.

Während die ökonomische Bedeutung der Katalyse weitgehend klar ist, gibt es in der Literatur zu den mit Katalysatoren verbundenen ökologischen Entlastungen wie beispielsweise Abfalleinsparungen keine ganzheitlichen Abschätzungen: Entweder sind es Einzelfalldarstellungen oder sehr breite Einschätzungen, die nur als Diskussionsbasis gedacht sind.



TOP10 der Katalyse-Patentanmelder weltweit

Rang Nr.	Konzern/ Firmengruppe	Anzahl der Patente von 1998-2000
1	BASF Gruppe (inkl. Basell)	184
2	Degussa Konzern	100
3	Bayer Konzern	81
4	Exxon	80
5	Basell (sofern es nicht zur BASF-Gruppe gezählt wird)	63
6	DuPont (Konzern)	52
7	BP (Konzern)	47
8	Atofina	46
9	Dow	34
10	Shokubai	32

Lassen Sie mich kurz auf die Arbeitsschritte innerhalb des laufenden Forschungsvorhabens eingehen, ehe ich Ihnen die Methodik zur geplanten Abschätzung des Potentials der Abfalleinsparung vorstelle. In einem ersten Arbeitsschritt wurden die Verfahren, Produktionsbereiche und Syntheseprozesse identifiziert, in denen fortgeschrittene Katalysatorsysteme eingesetzt werden und zu einer erheblichen Einsparung an Abfällen beitragen können. Hierzu haben wir Literatur- und Patentrecherchen sowie Interviews mit einigen von Ihnen durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Analyse sind in dem Ihnen vorliegenden Hintergrundpapier zusammengefasst.

Auf Grundlage dieses Überblicks haben wir ein Konzept zur Abschätzung zukünftig möglicher Abfalleinsparungen entwickelt, das ich in diesem Fachgespräch zur Diskussion stellen möchte. Die verschiedenen Rahmenannahmen des Konzeptes, die wir verwenden, sind auf Basis der derzeit verfügbaren Quellen gewählt worden. Die Annahmen zu den verschiedenen notwendigen Berechnungsfaktoren sollen im Forschungsvorhaben in einer abschließenden Befragung, ähnlich der Delphi-Befragung, überprüft werden².

² Bei der Delphi-Methode werden Experten zunächst unabhängig voneinander befragt. In einer zweiten Befragungsrunde werden ihnen dieselben Fragen noch einmal vorgelegt, diesmal aber zusammen mit den Ergebnissen der ersten Befragung. Die zweite Antwort erfolgt also in Kenntnis der Einschätzung aller befragten Experten. Ein typisches Einsatzgebiet der Delphi-Methode ist z. B. die Zukunftsforschung.

Arbeitsschritte

- Identifizierung der Verfahren, Produktionsbereiche und Syntheseprozesse, bei denen hochselektive Katalysatorsysteme eingesetzt bzw. entwickelt werden (Hintergrundpapier)
- Erstellung eines Untersuchungskonzepts zur Abschätzung der künftigen wissenschaftlich-technischen Entwicklung, der künftigen Chemieproduktion und des Ressourceneinsparpotenzials durch Einsatz fortgeschrittener Katalysatorsysteme
- Fachgespräch
- „Delphi“-Befragung



Das Problem bei jeder ökonomisch-ökologischen Abschätzung im Bereich der Chemischen Industrie ist die große Inhomogenität ihrer Sparten. In einer für 1990 durchgeführten Betrachtung ist erkennbar, dass die spezifischen Produktionswerte zwischen 350 DM/t für Düngemittel, über 25.000 DM/t für Pflanzenschutzmittel, bis ca. 80.000 DM/t für Pharmazeutika betragen.

Produktionswerte der Chemischen Industrie 1990

Bereich	Produktionswert [Mio. DM]	Produktion [t]	Spez. Produktionswert [DM/t]
Anorg. Grundchemikalien	10.789	12.428.717 ¹	860
Organische Grundchemikalien	23.549	11.753.422 ²	2.000
Kunststoffe	25.877	9.214.299 ³	2.800
Chemiefasern	5.300	1.026.679 ⁴	5.150
Pharmazeutika	25.655		80.000 ⁶
Düngemittel	1.836	5.240.000 ⁵	350
Pflanzenschutzmittel	3.468	136.000 ⁶	25.000
Synthesekautschuk	1.550	523.281	2.960
Chemie, gesamt	154.267	96.957.000 ⁶	1.590

¹ Chlor, Salzsäure (100 % HCl), Schwefelsäure (als SO₃), Ammoniak als N, Natriumhydroxid (als NaOH); ² Ethylen, Propylen, Butadien, Acetylen, BTX, Vinylchlorid, Methanol, Essigsäure; ³ Kondensations- und Polymerisationsprodukte; ⁴ für Zellulosefasern; Wert von 1989; ⁵ für Komplexdünger; Wert von 1989, Düngemittelproduktion auf ein Düngejahr (1. Juli bis 30. Juni) bezogen, ⁶ ISI-Schätzung



Bei dieser Zusammenstellung ist aber auch zu beachten, dass die Zugehörigkeit von verschiedenen chemischen Produkten zu einzelnen Produktionsbereichen nicht ganz klar definiert ist: So wird Salicylsäure im Pharmabereich als Keratolytikum eingesetzt, aber genauso als Vulkanisierverzögerer im Kunststoffbereich oder als Vorprodukt für Farbstoffe.

Der Verband der Chemischen Industrie, der Aussagen und Prognosen zu den verschiedenen Produktionsbereichen machen will, hat dieses Jahr³ eine Übersicht veröffentlicht, wie aus Sicht des VCI die Produktionsbereiche der Chemie mit der Systematik der Produktion des Statistischen Bundesamtes zusammenpassen.

VCI-Abgrenzung	enthält folgende WZ-Nummern
Anorganische Grundchemikalien	
Industriegase	2411
Anorganische Grundstoffe	2413
Petrochemikalien und Derivate	2414
Polymere	
Kunststoffe	2416
Synthetischer Kautschuk	2417
Chemiefasern	247
Fein- und Spezialchemikalien	
Farbstoffe und Pigmente	2412
Anstrichmittel, Druckfarben und Kitte	243
Sonstige chemische Erzeugnisse	246
Pharmazeutika	244
Agrochemikalien	
Düngemittel und Stickstoffverbindungen	2415
Schädlingsbekämpfungs- und Pflanzenschutzmittel	242
Seifen, Wasch und Körperpflegemittel	245



Fraunhofer Institut Systemtechnik und Innovationsforschung

VCI-Abgrenzung (in Klammern: WZ-Nummern)	Tonnage
Anorganische Grundchemikalien	
Industriegase (2411)	19.255.811
Anorganische Grundstoffe (2413)	23.190.848
Petrochemikalien und Derivate (2414)	50.398.712
Polymere	
Kunststoffe (2416)	16.070.994
Synthetischer Kautschuk (2417)	850.719
Chemiefasern (247)	1.059.862
Fein- und Spezialchemikalien	
Farbstoffe und Pigmente (2412)	1.923.541
Anstrichmittel, Druckfarben und Kitte (243)	3.847.086
Sonstige chemische Erzeugnisse (246)	4.434.400
Pharmazeutika (244)	839.143
Agrochemikalien	
Düngemittel und Stickstoffverbindungen (2415)	10.684.440
Schädlingsbekämpfungs- und Pflanzenschutzmittel (242)	84.137
Seifen, Wasch- und Körperpflegemittel (245)	3.207.920



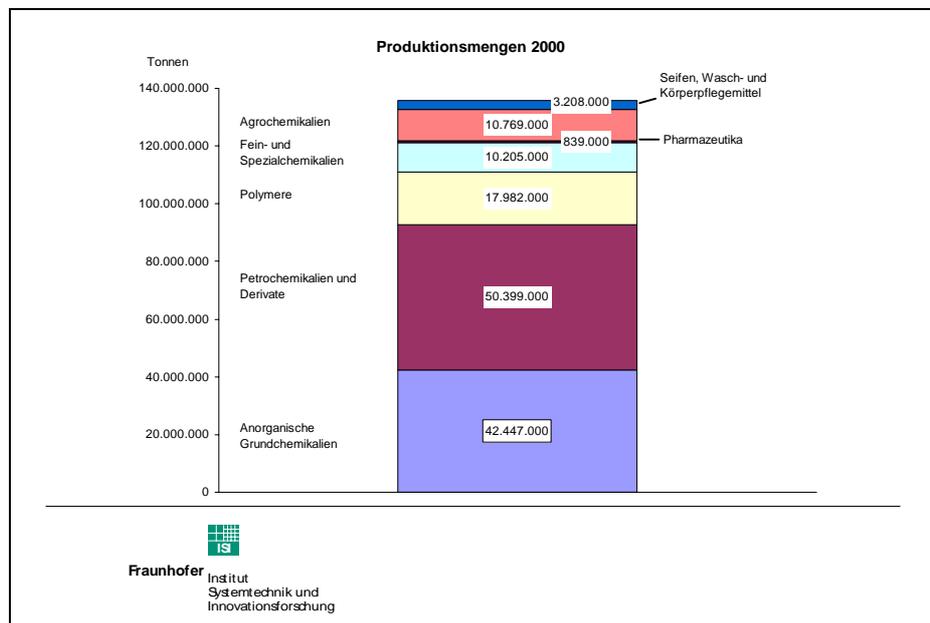
Fraunhofer Institut Systemtechnik und Innovationsforschung

(WZ: Klassifizierung der Wirtschaftszweige der Produktion)

Wenn man dieser Zusammenstellung folgt, ergibt eine Sonderauswertung des Statistischen Bundesamtes für das Jahr 2000, dass die Bereiche Fein- und Spezialchemikalien mit ca. 10 Mio.t sowie Pharma mit 0,8 Mio.t und

³ Chemiewirtschaft in Zahlen 2002, S. 128. VCI, Frankfurt 2002

Pflanzenschutzmittel mit 84.000 t nur ca. 8 % der Gesamtproduktion ausmachen⁴.



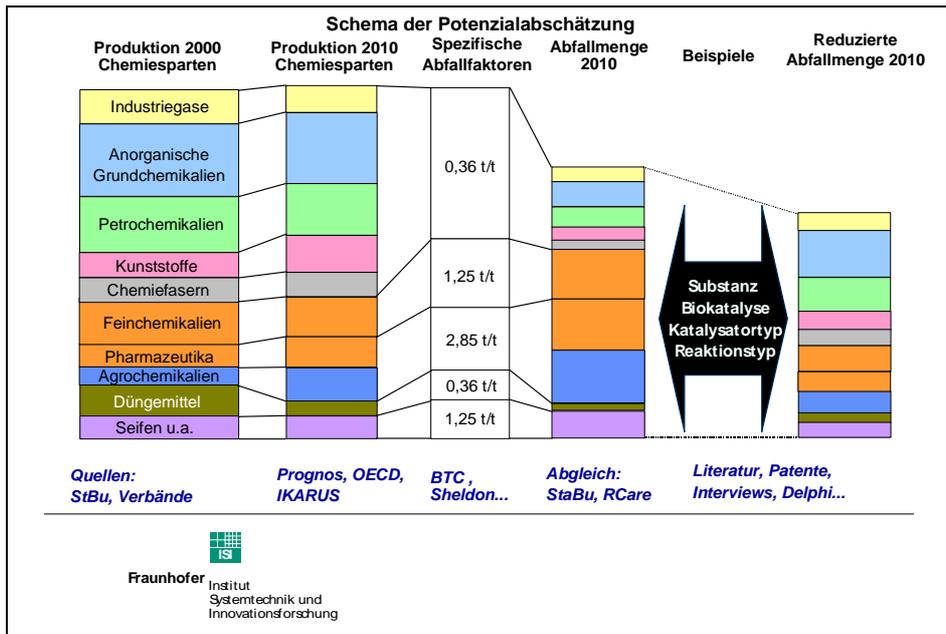
Zur Abschätzung des Abfalleinsparpotentials durch fortgeschrittene Katalysatoren soll nach folgendem Schema verfahren werden: Die Produktion im Jahre 2000 in Deutschland wird über eine Sonderauswertung des Statistischen Bundesamtes und durch ergänzende Angaben der Chemieverbände, soweit wie möglich, für die einzelnen Produktionssparten zusammengestellt.

Im nächsten Schritt sollen dann die prognostizierten prozentualen Zuwächse bzw. Rückgänge in den Sparten bis zum Jahr 2010 betrachtet werden. Als Quellen dienen hierfür Studien von Prognos und der OECD zur wirtschaftlichen Entwicklung sowie Prognosen im Rahmen von Modellen wie IKARUS.

Durch die Nutzung von spezifischen Abfallfaktoren aus der Literatur bzw. von der Fa. BTC, welche auch im Hintergrundpapier geschildert sind, kann die Abfallmenge berechnet werden, die dem derzeitigen Stand der Katalysatortechnik entsprechen, vergleiche die vierte Säule in der Grafik. Diese Abfallmenge kann mit Abfallstatistiken und Publikationen zum Responsible Care verglichen werden.

Im letzten und schwierigsten Schritt wird versucht, durch Beispiele eine denkbare Reduzierte Abfallmenge 2010 zu berechnen. Dies soll durch Nutzen und Verallgemeinerung von Beispielen für Substanzklassen, Katalysatortypen, Reaktionstypen u.a. erfolgen.

⁴ Berücksichtigung aller Tonnagen, die vom Statistischen Bundesamt erhoben wurden.



Zur Quantifizierung sind aber auch noch Detailfragen zu klären und zu definieren. Neben der heute schon diskutierten Frage, was Feinchemikalien eigentlich sind, sei hier nur auf den Abfallbegriff hingewiesen: Während BTC u.a. bei der Betrachtung des Abfalls auch Produktionsabwasser und zu verbrennende Rückstände berücksichtigt, werden beispielsweise im Umweltbericht der BASF für die Berechnung der spezifischen Kennzahlen nur „wasserfremde Stoffe“ und Deponieabfälle berücksichtigt. Entsprechend geringer fallen die Abfallmengen pro Produktionseinheit aus.

Spezifischer Abfallanfall in der chemischen Industrie

	Produkteinheit	Abfallanfall pro Produkteinheit	Verhältnis Abfall zu Produkten	Literatur
Grundchemikalien	1 Tonne	0,5 Tonnen	50 %	Hüsing et al. 2000
	1 Tonne	0,36 Tonnen	36 %	BTC 2002
Spezialprodukte	1 Tonne	1,23 Tonnen	123 %	BTC 2002
Feinchemikalien	100 kg	100 kg	100 %	Hüsing et al. 2000
	100 kg	285 kg	285 %	BTC 2002
Chemikalien	8,5 Mio. t	6,7 kg/t	0,0067 %	BASF Ludwigshafen,2001

BASF Ludwigshafen,2001:
 Chemikalien: 6,7 kg/t 0,0067 % 1,8 kg Luft, 1 kg Wasser, 3,9 kg Abfall
 8,5 Mio. t Verkaufsprodukte,
 Wasser: 120 Mio. cbm Produktionsabwasser, 1.205 Mio. cbm Kühlwasser, 24 Mio. cbm kommunales Abwasser
 Abfall: 33.000 t Betriebsabfälle zur Deponie, 223 Gewerbeabfall, 43.200 t Bauschutt, 133.000 t Rückstandsverbrennung
 Luft: 15.500 t luftfremde Stoffe, 12900 N₂O, 73330000 t CO₂



Fraunhofer Institut Systemtechnik und Innovationsforschung

Neben der Auswertung von Literatur, Patenten und Interviews sollen die Eingangsdaten der Potenzialabschätzung durch eine Breitenerhebung von Experten in Form von Fragebögen abgesichert werden.

Es ist geplant, die Expertenbefragung in Form von Thesen durchzuführen, die relativ einfach zu beantworten und so allgemein gestellt sind, dass sie auch von seitens der Industrie ohne Verletzung der Vertraulichkeit von laufenden Entwicklungsprojekten beantwortet werden können. Im folgenden sind die bisher entwickelten Thesen und Fragen des Hintergrundpapiers nochmals thematisch sortiert zusammengefasst. Die Thesen werden unter anderem auch durch die Erkenntnisse dieses Fachgesprächs ergänzt und dann an Katalysespezialisten gesandt.

Von welchen Katalysatorsystemen sind wesentliche Beiträge zu einer nachhaltigeren Chemieproduktion zu erwarten?

- These 15: Keine Entwicklungssprünge durch neue Lösemittel und Methoden

Bei welchen Reaktionstypen sind wesentliche Beiträge zu einer nachhaltigeren Chemieproduktion zu erwarten?

- Stöchiometrisch durchgeführte Oxidationsprozesse
- Reduktion mit komplexen Hydriden
- Katalyse mit starken Säuren und Basen
- C-C Kupplungen: - stöchiometrisch (z. B. Grignard, Wittig)
- Übergangsmetall-katalysiert
- Funktionalisierung von Aromaten (insbes. auch Heteroverb.):
 - Friedel-Crafts-Reaktionen
 - Hydroxylierung
 - Halogenierung
 - Diazotierung
 - Nitrierung
- Hydrierung mehrfach ungesättigter Olefine
- Aminsynthesen
- weitere?

In welchen Produktionsbereichen/Untergruppen/Sparten der Feinchemikalien sind wesentliche Beiträge der Katalyse zu einer nachhaltigeren Chemieproduktion zu erwarten?

- Pharmaka (insbesondere enantiomerenreine; Generika)
- Agrochemikalien (insbesondere enantiomerenreine)
- Vor- und Zwischenprodukte der organischen Synthese
- Feinchemikalien
- Spezialchemikalien
- weitere, andere?

Welcher Stellenwert kommt der Biokatalyse innerhalb der Katalyse in der industriellen Chemieproduktion zu?

- These 5: Die Chemie öffnet sich zunehmend der Biokatalyse
- These 4: Es überwiegen Einzelfallerwägungen, ob Biokatalysatoren zum Einsatz kommen (sollen)
- These 3: Bei der Laborentwicklung haben chemischen Synthesen zeitliche Vorteile gegenüber biokatalytischen Verfahren
- These 10: Bei Bioprozessen steht der FuE-Aufwand in ungünstigem Verhältnis zu Markterwartungen
- These 7: Bioprozesse lohnen sich nur bei Preisen > 20 - 30 US\$
- These 6: Das größte Optimierungspotenzial liegt in den Biokatalysatoren selbst
- These 13: Die Grenzen zwischen Biokatalyse und chemischer Katalyse verwischen zunehmend (Chemzyme)

Inwieweit bestehen in der Praxis Anreize, Synthesen mit fortgeschrittenen Katalysatorsystemen zu optimieren?

- These 1: Neue katalytische Verfahren werden nur aus ökonomischen Gründen eingeführt
- These 12: Racematspaltung wird zugunsten stereoselektiver Katalyse unwichtiger
- These 8: Es wird nicht immer das beste Verfahren eingesetzt, da die verfügbare Zeit in Mehrverfahrensanlagen stark limitiert ist
- These 2: Die Marktanforderungen an Feinchemikalien wie Pestizide wechseln so rasch, dass sie eine Optimierung der Produktion nicht lohnt
- These 11: Neue Katalysatorsysteme werden nicht eingesetzt, weil die Produktionsanlagen abgeschrieben sind

Welcher Stellenwert kommt beim Einsatz von Katalysatoren Nachhaltigkeitseffekten zu? Mit welcher Methodik werden sie in Unternehmen erhoben?

- These 9: Es werden keine systematischen Analysen von "schlechten Verfahren" bei den Produzenten durchgeführt
- These 14: Für Unternehmen sind nur die Stoffe Abfall, die kostenpflichtig entsorgt werden müssen

Teilnehmerliste zum Fachgespräch

“Abfallvermeidung bei Produktionen für organische Spezialchemikalien durch den Einsatz weiterentwickelter Katalysatoren”

am 24. September 2002 im Umweltbundesamt

Name	Institut/Unternehmen	Telefonnummer/ FAX / E-Mail
Prof. Dr. Manfred Baerns	Institut für Angewandte Chemie Berlin-Adlershof e.V.	Tel: (030) 63924444 E-Mail: baerns@ACA-Berlin.de
Prof. Dr. Matthias Beller	Universität Rostock	Tel: (0381) 466930 FAX: (0381) 4669324 E-Mail: Matthias.Beller@ifok.uni-rostock.de
Dr. Arno Biwer	Universität des Saarlandes	Tel: (0681) 302-3633 FAX: (0681) 302-4572 E-Mail: a.biwer@mx.uni-saarland.de
Prof. Dr. Armin Börner	Universität Rostock	Tel: (0381) 466930 E-Mail: Armin.Boerner@ifok.uni-rostock.de
Prof. Dr. Uwe Bornscheuer	Universität Greifswald	Tel: (03834)86 4367 FAX: (038349 864346 oder 4373 E-Mail: bornsche@uni-greifswald.de
Johannes Drotleff	Umweltbundesamt	Tel: (030) 8903 3625 FAX: (030) 8903 3993 E-Mail: Johannes.drotleff@uba.de
Dr. Wolfgang Dubbert	Umweltbundesamt	Tel: (030) 8903 3261 FAX (030) 8903 3105 E-Mail: wolfgang.dubbert@uba.de
Dr. Hans-Jürgen Eberle	Consortium für elektrochemische Industrie GmbH	Tel: (089) 74844-2 55 E-Mail: Hans-Juergen.Eberle@wacker.com
Dr. Richard Fischer	Südchemie AG	Tel: (08061) 4903 700 E-Mail: Richard.Fischer@sud-chemie.com
Dr. Lukas Goossen	Max-Planck-Institut für Kohlenforschung	Tel: (0208) 306-2392 E-Mail: goossen@mpi-muelheim.mpg.de
Dr. Egbert Gritz	Cognis Deutschland GmbH	Tel: (0211) 7940-2342 FAX: (0211) 797 8955 E-Mail: Egbert.Gritz@cognis.com
Prof. Ali Hassan	TU Berlin	Tel: (030) 31422294 FAX: (030) 31479552 E-Mail: Ali.Hassan@chem.tu-berlin.de
Christiane Heiss	Umweltbundesamt	Tel: (030) 8903 3159 E-Mail: christiane.heiss@uba.de
Dr. Bärbel Hüsing	Fraunhofer ISI	Tel: (0721) 6809 210 FAX: (0721) 6809 476 E-Mail: Baerbel.Huesing@isi.fhg.de
Dr. Thomas Jostmann	Degussa AG	Tel: (069) 218 5447 E-Mail: thomas.jostmann@degussa.com

Prof. Dr. Wilhelm Keim	RWTH Aachen	Tel: (0241) 802 6480 FAX: (0241) 8022 177 E-Mail: Keim@itc.RWTH-Aachen.de
Prof. Dr. Dieter Lenoir	GSF Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH	Tel: (089) 3187 2960 FAX: (089) 3187 3197 E-Mail: lenoir@gsf.de
Prof. Dr. W. Leitner	RWTH Aachen	Tel: (0241) 802 6480 E-Mail: leitner@mpi- muehlheim.mpg.de
Dr. Frank Marschei- der- Weidemann	Fraunhofer ISI	Tel: (0721) 6809-154 E-Mail: mw@isi.fhg.de
Dr. Peter Panster	Degussa AG	Tel: (06181) 59-37 63 E-Mail: peter.panster@degussa.com
DirProfin Jutta Penning	Umweltbundesamt	Tel: (030) 8903 FAX: (030) 8903 E-Mail: maria-jutta.penning@uba.de
Dr. Stefan Pelzer	Combinature Biopharm AG	Tel: (030) 9489 4050 FAX: (030) 3489 4051 E-Mail: pelzer@combinature.com
Dr. G. Prescher	Degusa AG	Tel: (06181) 5735 48 FAX: (06181) 520 171 E-Mail: guenter.prescher@degussa.com
Dr. Ing. Tim Reinhardt	IMTECH GmbH Forschungsstelle "Industrielle Stoffkreisläufe"	Tel: (0611) 7149 810 FAX: (0611) 7149 888 E-Mail: tim.reinhardt@himtech.de
Dr. Steffi Richter	Umweltbundesamt	Tel: (030) 8903 3275 FAX: (030) 8903 3993 E-Mail: steffi.richter@uba.de
Dr. Steffen Seebald	Degussa AG	Tel: (06181) 59-3854 E-Mail: steffen.seebald@degussa.com
Martin Siegfried	Umweltbundesamt	Tel: (030) 8903 FAX: (030) 8903 3993 E-Mail: martin.siegfried@uba.de
Dr. Martin Studer	Solvias AG	Tel: [0041] (61) 686 63 06 E-Mail: martin.studer@solvias.com
Dr. Martin Stürmann	Bayer AG	Tel: (0214) 30-522 85 E-Mail: martin.stuermann.ms@bayer-ag.de
Prof. Dr. Christoph Syldatk	Universität Stuttgart	Tel: (0711)6853192 E-Mail:Syldatk@ibtv.uni-stuttgart.de
Dr. Kurt Wagemann	DECHEMA e.V.	Tel: (069) 7564-290 FAX: (069)7564 117 E-Mail: wagemann@dechema.de
Dr. Peter Wasserscheid	RWTH Aachen,	Tel: (0241) 802 6480 E-Mail:Wasserscheid@itmc.rwth-aachen.de
Prof. Dr.-Ing. Jens Weitkamp	Universität Stuttgart	Tel: (0711) 685-4060 FAX: (0711) 685-4065 W-Mail: jens.weitkamp@po.uni-stuttgart.de
Dr. Dietmar Wunderlich	Umweltbundesamt	Tel: (030) 8903 FAX: (030) 8903 3993 E-Mail: dietmar.wunderlich@uba.de
Brigitte Zietlow	Umweltbundesamt	Tel: (030) 8903 3509 FAX: (030) 8903 3993 E-Mail: brigtte.zietlow@uba.de