

# Was erwartet die Chemische Industrie von der Physikalischen und Technischen Chemie?

Von Wolfgang Jentzsch \*

Verfahrensinnovation – die konsequente Optimierung von Rohstoffeinsatz, Energieverbrauch und Produktausbeute – ist die permanente Herausforderung an den Betreiber von Anlagen zur Herstellung der wichtigen Basis- und Zwischenprodukte. Nicht das Produkt selbst, der Prozeß zu dessen Herstellung unterliegt Lebenszyklen und bestimmt insbesondere auch die Wirtschaftlichkeit der Folgeprodukte. Nicht nur die Entwicklung neuer Verfahrenswege, viel häufiger die Verbesserung einzelner Prozeßschritte ist deshalb beständige Aufgabe für in interdisziplinär zusammengesetzten Teams arbeitende Experten. Aus Veränderungen der Rohstoffpreise und -verfügbarkeiten, ökonomischen und ökologischen Anforderungen und nicht zuletzt durch den technisch-wissenschaftlichen Fortschritt erwachsen die Impulse für diese Innovation. Anhand bereits realisierter Beispiele und offener Probleme sollen Chancen aufgezeigt und Denkanstöße für die Grundlagenforschung vermittelt werden. Dabei werden Fragen der Rohstoffwahl und Verfahrensumstellungen auf katalytische Prozesse diskutiert. Lohnende Aufgaben finden sich auf dem Gebiet großtechnischer Oxidationen, katalytischer wie nichtkatalytischer. Eine weiterentwickelte, systematische und EDV-gestützte Methode zur Optimierung des traditionellen Energieverbundes wird vorgestellt, und neue Meßprinzipien zur effizienten Steuerung von Produktion und Produktqualität werden angesprochen. Eine erfolgreiche Umsetzung derartiger Vorgaben setzt die Fähigkeit und die Bereitschaft voraus, in den Kategorien solcher Problemlösungen zu denken, und gehört insoweit in den Forderungskatalog für eine zukunftsweisende Hochschulausbildung.

## 1. Innovation als unternehmerisches Grundelement

Die unternehmerische Grundidee der Chemischen Industrie bestand von Anfang an darin, chemisch-technologische Innovation zu kommerzialisieren. Wissenschaftliche Fortschritte waren dabei stets Ausgangspunkte und Erfolgsfaktoren für strategische Konzeptionen. Die Frage nach den Erfolgsfaktoren müssen wir uns allerdings immer wieder neu stellen; also auch die Frage, welche Bedeutung Innovation künftig haben und welchen Beitrag hierzu die Grundlagenforschung leisten kann.

Von Anfang an hat sich die Chemische Industrie nicht nur mit der Synthese der gewünschten Endprodukte, sondern auch mit den benötigten Vorstufen beschäftigt; die BASF hat deshalb z. B. nicht nur Fuchsin und Hofmann-Violett, sondern auch Anilin, Schwefelsäure und Soda hergestellt. Den Aufwand niedriger zu halten als die Wertschöpfung, war damals wie heute über eine stärkere Integrationstiefe eher sicherzustellen als über nur eine oder zwei Synthesestufen. Es entstanden die bekannten Stammbäume (Abb. 1), die wir auch als Synonym für einen intelligenten Produktionsverbund mit oft erfolgsentscheidenden Synergien verstehen müssen!

## 2. Produktinnovation und Verfahrensinnovation

In diesen Stammbäumen sind immer wieder unterschiedliche Typen von Innovation gefragt. Die wenigen Verkaufsprodukte der noch jungen industriellen Chemie wurden in-

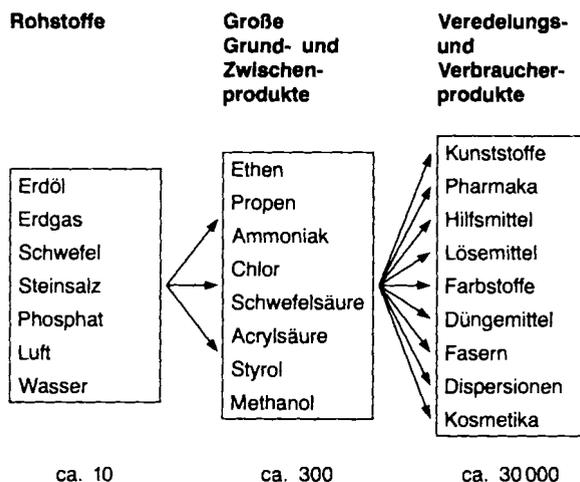


Abb. 1. Vom Rohstoff zum Veredelungs- und Verbraucherprodukt.

zwischen durch mehrere Generationen und insgesamt viele Tausende jeweils neuer Produkte ersetzt und ergänzt. Hier spielt die Produktinnovation die dominierende Rolle, gespeist von den Fortschritten der Syntheseforschung und gefördert durch die Bedürfnisse der Menschen: Ernährung und Gesundheit, Kleidung und Wohnen, Kommunikation, Freizeit und nicht zuletzt Mobilität.

Die damaligen Grundprodukte aber sind geblieben, und ihre Gesamtzahl ist seither nur auf einige Hundert chemischer Individuen gestiegen. Neue Endprodukte basieren – aus welchen Gründen auch immer – fast stets auf vorhandenen Vorstufen; und weil jedes Vorprodukt in Hunderte abgeleiteter Handelsprodukte übergeht, handelt es sich stets um große anorganische und organische Basischemikalien. Diese werden im Maßstab von einigen tausend bis millionen Tonnen jährlich weltweit hergestellt, und ihr Schicksal ist von

[\*] Dr. W. Jentzsch  
stellvertretender Vorsitzender des Vorstands  
BASF Aktiengesellschaft  
D-6700 Ludwigshafen

Einzelveränderungen in der Verkaufspalette nur wenig beeinflusst. Insgesamt sind es kaum mehr als 300 Schlüsselprodukte, die dieser Charakteristik entsprechen. Hier macht es keinen Sinn, in „junge“ oder „reife“ Produkte zu unterteilen; nicht das chemische Individuum, sondern das Herstellungsverfahren hat seine Lebenskurve, wie am Beispiel der Acrylsäure dargestellt ist (Abb. 2).

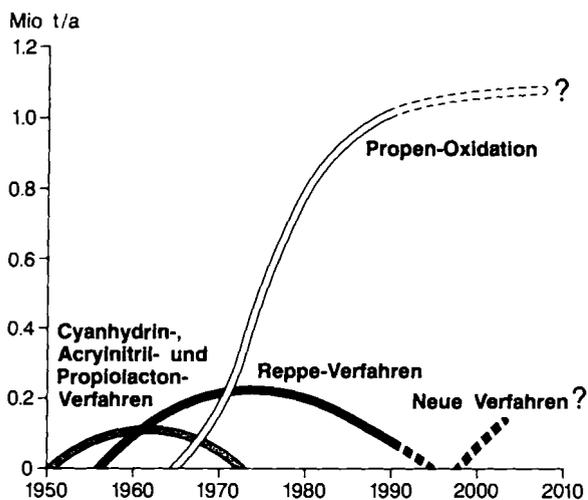


Abb. 2. Lebenszyklen der Acrylsäure-Herstellungsverfahren.

Die ersten drei Verfahren haben ihren Lebenszyklus bereits durchlaufen. Ihr Abstieg wurde mit dem Aufkommen des Reppe-Prozesses eingeleitet. Aber auch dieses Verfahren auf der Basis von Acetylen hat seinen Zenit längst überschritten und wurde durch die Propen-Oxidation abgelöst. Die Frage, ob auch dieser Syntheseweg den Stafettenstab an ein neues Verfahren weitergibt, ist derzeit offen. Ein Grundprinzip bei der Herstellung solcher Basisprodukte wird hier evident: jeder Innovationsschub verbessert die Wirtschaftlichkeit und weitet so das Anwendungsspektrum und damit den Bedarf aus; der Kulminationspunkt (in Tonnen pro Jahr) liegt jeweils wesentlich höher als in der vorangegangenen Generation.

Für Produktinnovation ist hier praktisch kein Raum; Verfahrensinnovation ist in diesem Bereich der entscheidende Erfolgsfaktor. Jeder stoffliche, energetische, verfahrenstechnische oder ökologische Vorteil, der in Großsynthesen erzielt wird, pflanzt sich über eine vielfältig verzweigte Veredelungschemie bis zu den Verkaufsprodukten fort.

Die effiziente Integration des einzelnen Verfahrens in den Produktionsverbund eines Standortes und damit in die gesamte globale Standortstrategie, aber auch die Frage, ob man ein solches Großprodukt nur im eigenen Hause weiterverarbeitet oder auch verkauft und damit am Markterfolg des Kunden, der gleichzeitig Konkurrent sein mag, partizipiert – all dies sind zusätzliche unternehmerische Fragen, die im Zusammenhang mit jeder Verfahrensinnovation beantwortet werden müssen.

### 3. Wechselspiel zwischen Industrie- und Hochschulforschung...

Forschung und Entwicklung zur konsequenten innovativen Optimierung der Herstellverfahren und des Produk-

tionsverbundes erfolgen in der Regel durchgängig in der Industrie; sie ist Besitzer des Kern-Know-hows und Betreiber der Verfahren. Der wirtschaftliche Zwang bestimmt sowohl die Substrate wie die Methoden der Technischen Chemie; er treibt sie zum Einsatz von billigen, einfachen Molekülen als Ausgangsstoffe und zur Nutzung ihrer wirkungsvollsten Einflußparameter: Katalysatoren, Temperatur, Druck.

Andererseits sind die Forschungsergebnisse vieler Fachdisziplinen der Hochschulen unverzichtbares Rüstzeug für die Industrie; oft sind sie der Auslöser der Innovation. Erfolgreiche Verfahrensforschung setzt heute in ganz besonderem Maße ein breites, interdisziplinäres Arbeiten voraus. Der Bedarf an solchen Beiträgen aus der Wissenschaft nimmt eindeutig zu. Wenn ich aber versuchen wollte, dies an konkreten Beispielen zu belegen, müßte ich künftige Forschungsergebnisse antizipieren können. Weil ich das nicht kann, will ich anhand einiger aktueller Beispiele darlegen, daß es auch bei alten Verfahren Verbesserungspotentiale beträchtlicher Größenordnung und somit Innovationsbedarf gibt. An einigen historischen Beispielen möchte ich aufzeigen, wie enorm die faktische Wirkung innovativer Impulse sein kann.

#### 3.1. ...am historischen Beispiel der Ammoniaksynthese

Die interdisziplinäre Verflechtung und den Beitrag der Grundlagenforschung will ich anhand der Ammoniaksynthese und deren Weiterentwicklung exemplifizieren (Abb. 3).

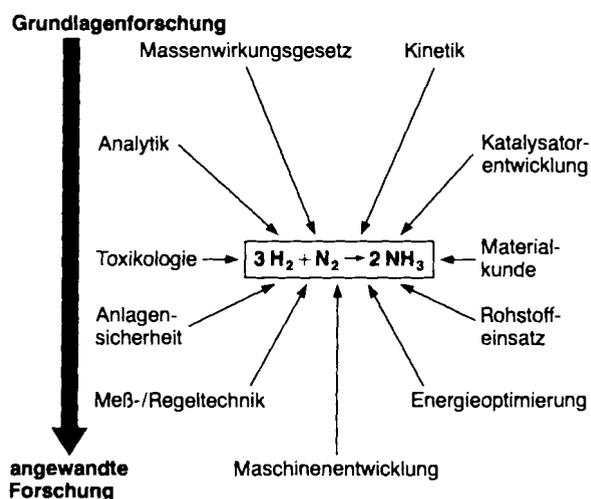


Abb. 3. Entwicklung eines Grundverfahrens am Beispiel der Ammoniaksynthese.

Ausgelöst durch die grundlegenden Arbeiten zum Massenwirkungsgesetz und chemischen Gleichgewicht, gelang Haber in Karlsruhe vor über achtzig Jahren die katalytische Ammoniaksynthese aus den Elementen. Jedoch erst die systematische Katalysatorentwicklung durch Mitasch und die elegante Lösung des Werkstoffproblems durch Bosch – beides Erfolge der BASF-Entwicklung – verhalfen dem Prozeß zur technischen Realisierung.

Die ständige technologische Fortentwicklung durch die Chemische Industrie und durch Ingenieurfirmen ist ein Musterbeispiel für die Verfahrensinnovation eines großen Grundproduktes: der Wechsel der Rohstoffbasis von Kohle

über Naphtha zum Erdgas, somit die Umstellung von einer rein thermischen Rohstoffaufbereitung auf eine nunmehr in sieben katalytischen Stufen erfolgende Erzeugung der Synthesegase, die Fortentwicklung der Maschinen- und Apparatechnik hin zu großen Einstranganlagen, die Entwicklung druckwasserstoffbeständiger Stähle, die Fortschritte der Meß-, Regel- und Prozeßleittechnik, der konsequente Verbund der Energieströme – alle diese Maßnahmen haben den Prozeß heute sehr nahe an den theoretischen Energieverbrauch herangeführt (Abb. 4).

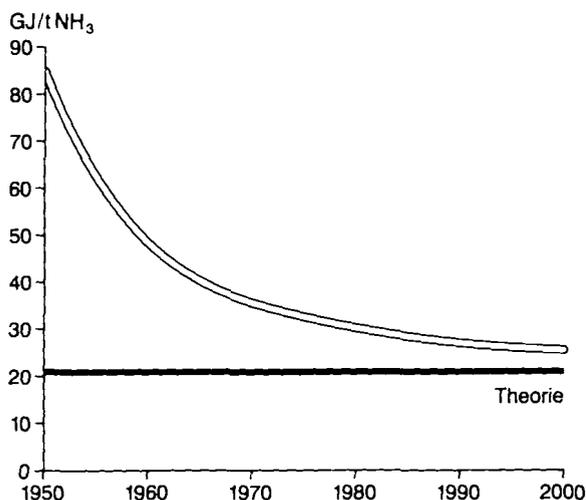


Abb. 4. Spezifischer Energieverbrauch bei Ammoniaksyntheseanlagen.

Das Ausmaß der technologischen Veränderung wird bei einem Vergleich der für beide Synthesewege erforderlichen Ressourcen deutlich (Tabelle 1): im Gegensatz zu modernen

Tabelle 1. Vergleich der Ammoniaksynthesen auf der Basis von Koks (Vielstranganlage) und Methan (Einstranganlage).

	Vielstranganlage der BASF 1940	Einstranganlage 1990
Kapazität [t/d]	800	1800
Grundfläche [m <sup>2</sup> ]	35 000	18 000
Stahlbedarf [t]	30 000	13 000
Mitarbeiter	1800	50
Investition [10 <sup>6</sup> DM] [a]	1000	300
Energieverbrauch [GJ/t NH <sub>3</sub> ]	88	28

[a] Preisbasis 1990

Einstranganlagen waren früher wegen der begrenzten Größe von Maschinen und Apparaten viele parallel geschaltete Batterien von Produktionssträngen erforderlich. Obwohl damit nicht einmal die Hälfte der Kapazität heutiger worldscale-Anlagen erreicht wurde, war der Flächen- und Materialbedarf doppelt so hoch. Ein Vielfaches an Bedienungspersonal war zuständig für eine aufwendige Wartung und die damals noch manuelle Steuerung und Regelung der Anlage.

Farbstoffe und Düngemittel, Synthesefasern und Kunststoffe, Pharma- und Pflanzenschutzwirkstoffe sind die Nutznießer dieser enormen Besserstellung. Bei gleichbleibendem Produkt und gleichbleibender Chemie der eigentlichen Synthesestufe wurde sie induziert durch den technisch-wissenschaftlichen Fortschritt ausschließlich in benachbarten

Fachgebieten der Prozeßtechnik und durch eine Veränderung der Rohstoffbasis.

#### 4. Rohstoffe als Triebfeder für Verfahrensinnovation

Damit ist eine weitere Triebfeder des technologischen Wandels angesprochen, nämlich Veränderungen in Preis und/oder Verfügbarkeit von Rohstoffen. Die Umstellung von der Kohle- auf die Petrochemie nach dem zweiten Weltkrieg im Wechselspiel mit fundamentalen Fortschritten in der Verfahrenstechnik bedeutete einen Innovationsschub sondergleichen; die Ära der Kunststoffe wäre ohne diese Veränderungen nicht möglich geworden. Die Schlüsseltechnologie hierzu, das Steam-Cracking, ist technisch ausgereift und trotzdem noch mit einem grundsätzlichen Mangel behaftet (Abb. 5): während es auf der Input-Seite gelungen ist,

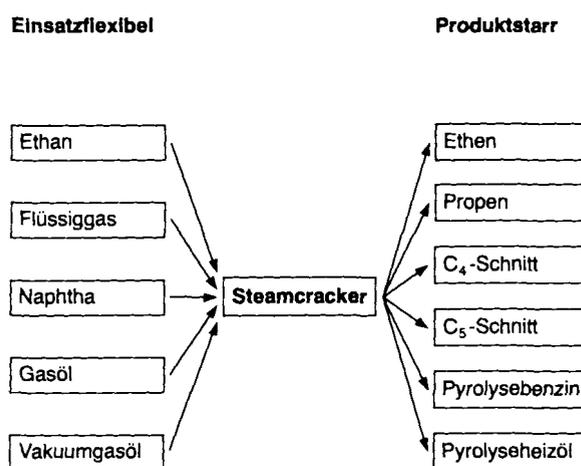


Abb. 5. Herstellung petrochemischer Grundprodukte durch Steam-Cracking.

den Cracker feedstock-flexibel zu konzipieren, was für die Wirtschaftlichkeit sehr wichtig ist, ist der Output-Mix bei gegebenem Einsatzstoff allenfalls in engen Grenzen beeinflussbar. Damit ist die unangenehme Problematik der Koppelproduktion in größtem Ausmaß gegeben. Immer ist Ethen das Hauptprodukt; und selbst bei einem Wechsel des Einsatzstoffes ändert sich das Produktspektrum nur graduell. Eine Konstellation, bei der als Hauptprodukt z. B. Propen entstünde, konnte bisher nicht realisiert werden. Theoretische Lösungsansätze wie output-flexible Cracker und die Funktionalisierung von Alkanen, um einzelne Produkte unabhängig vom Cracker-Mix herstellen zu können, harren immer noch der Realisierung.

Ein aktuelles Beispiel für einen neuen, in technischem Maßstab durchführbaren Syntheseweg zu einem seit Jahrzehnten bedeutenden Zwischenprodukt ist die Methacrylsäure, der Monomerbaustein des Acrylglasses und die Komponente vieler anderer Kunststoffe und Kunststoff-Dispersionen. Das konventionelle Verfahren (Abb. 6) ist charakterisiert durch die Verwendung „chemischer Hilfsstoffe“ wie Schwefelsäure und Blausäure sowie den Zwangsanfall von zwei Tonnen Ammoniumsulfat pro Tonne Methylmethacrylat. Die BASF, bisher auf diesem Gebiet nicht tätig, hat ein Verfahren entwickelt (Abb. 7), das auf dem C<sub>1</sub>-Baustein in

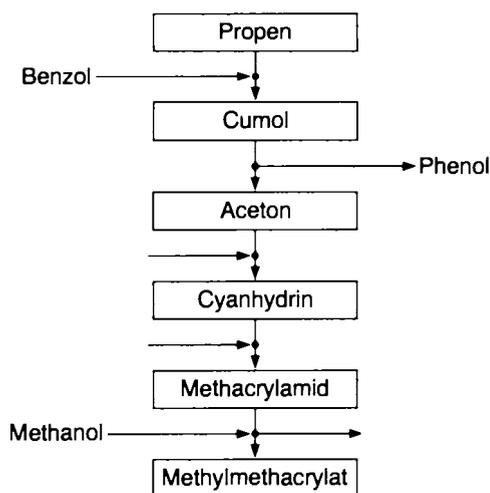


Abb. 6. Cyanhydrinverfahren zur Herstellung von Methylmethacrylat.

Form von Synthesegas, Methanol und Formaldehyd und dem C<sub>2</sub>-Baustein Ethen basiert; in wenigen, ausschließlich katalytischen Reaktionsschritten wird das Produkt gebildet; als Nebenprodukt entsteht nur Wasser. Bei der Entwicklung dieses Prozesses kam unsere große Expertise in der Oxidation und bei Oxidationsreaktionen zum Tragen.

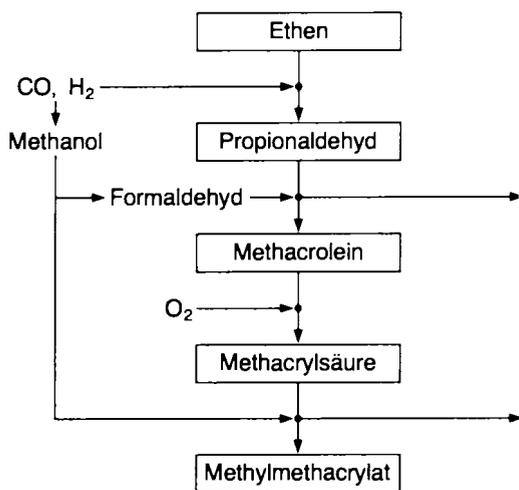


Abb. 7. BASF-Verfahren zur Herstellung von Methylmethacrylat.

Dieses Beispiel zeigt die unternehmerisch-wirtschaftliche Bedeutung der Verfahrensinnovation: bestehende Anbieterstrukturen können zugunsten des Innovators aufgebrochen werden. Das neue Verfahren bietet dem Markt Vorteile, die den abgeleiteten Produkten neue qualitative und quantitative Impulse geben, und es beinhaltet – wie jedes neue Verfahren – Potential für weitere Verbesserungen. Die Zwischenproduktpalette der BASF wird durch die drei wertvollen Monomerbausteine Methacrolein, Methacrylsäure und Methylmethacrylat ergänzt, die dem kreativen Syntheschemiker neue Möglichkeiten eröffnen; das difunktionelle Methacrolein wird dabei zum ersten Mal überhaupt in technischem Maßstab verfügbar.

## 5. Verbesserungspotential auch bei lange bewährten Verfahren

Die Rationalisierung bestehender Verfahren ist also von größter Bedeutung. Ansatzpunkte gibt es, selbst bei lang etablierten Prozessen, zur Genüge. Experten wissen, wie schwer es ist, bei der Oxidation von *o*-Xylol zu Phthalsäureanhydrid die Ausbeute um Zehntel-Prozentpunkte zu verbessern; niemand aber wird bestreiten, daß es bei einer Ausbeute von 78% der Theorie grundsätzlich noch ein beträchtliches Verbesserungspotential gibt. Die Herstellung von Ethylenoxid mit ca. 80% und von Acrylsäure mit 85% Ausbeute sind weitere Beispiele. Dabei fällt auf, daß dies alles Oxidationsreaktionen sind.

Hydrierungen führen – selbst wenn hohe Selektivität gefordert wird und die Möglichkeit der Methanisierung besteht – im allgemeinen zu guten Ergebnissen. Letzten Endes mag das daran liegen, daß das akkumulierte Know-how bei katalytischen Hydrierungen wesentlich größer ist als bei katalytischen Oxidationen: Chemiker haben bereits mit unterschiedlichsten Katalysatorsystemen hydriert, als sie noch mit Chrom- oder Salpetersäure oxidiert haben! Katalysierte, selektive Oxidationen sind sowohl für Praktiker wie für die Grundlagenforschung weiterhin eine Herausforderung; die molekularen Vorgänge sind ebenso komplex wie Aufbau und Zusammensetzung der Katalysatoren.

Priorität hat immer die stoffliche Optimierung eines Verfahrens, gefolgt von der energetischen. Die Erhöhung von Ausbeute und Selektivität korreliert direkt mit niedrigeren Einsatzmengen und geringerer Nebenproduktbildung. Der wirtschaftliche Vorteil einer Selektivitätserhöhung um nur 1% drückt sich hier nicht in Mark und Pfennig, sondern wegen der Produktionshöhe in jährlichen Einsparungen in Millionenhöhe aus. Der ökonomische Vorteil einer erfolgreichen Verfahrensverbesserung geht immer auch mit einer verbesserten Ökologie Hand in Hand: höhere Selektivitäten bedeuten eine Entlastung der Umwelt durch Ressourcenschonung und eine Verminderung von Nebenprodukten und Reststoffen, die entsorgt werden müssen.

## 6. Hohe Bedeutung der Katalysator-Forschung

Die Optimierung von Katalysatoren erfordert im weitesten Sinne auch eine gleichzeitige Anpassung der Prozeßparameter. Die immer tiefergehende Untersuchung der chemischen Reaktion, die der Katalysator steuert, muß korreliert werden mit der Chemie und Physik des Katalysators. In vielen Fällen ist unser Wissen über die Wirkungsweise von und Reaktionsbeeinflussung durch Promotoren unvollständig; so mangelt es an Kenntnissen über die Struktur aktiver und deaktivierter Phasen.

Für die Feinoptimierung von Katalysatoren ist heute eine rein empirische Vorgehensweise nicht mehr hinreichend. Ein tieferer Einblick in die Struktur der katalytisch aktiven Zentren mit verschiedenen oberflächenanalytischen Methoden ist unumgänglich. Hier eröffnet sich noch ein weites Feld für zusätzlichen Wissenserwerb über das Beziehungsgeflecht zwischen Natur und Wirkung eines Katalysators. Häufig erfolgt die Charakterisierung eines Katalysators an oxidischen Vorläufern und in einer betriebsfremden Atmosphäre.

Deshalb würde die Schaffung apparativer Möglichkeiten, um die Untersuchungen im Idealfall unter Simulation der Betriebsbedingungen inklusive der stofflichen Umgebung durchzuführen, den Erkenntnishorizont wesentlich erweitern.

Ein Oxidationsverfahren mit enormem Verbesserungsbedarf ist die Luftoxidation von Cyclohexan zum sogenannten Anolon, dem Gemisch von Cyclohexanol und Cyclohexanon (Abb. 8). Weltweit werden heute knapp vier Millionen Ton-

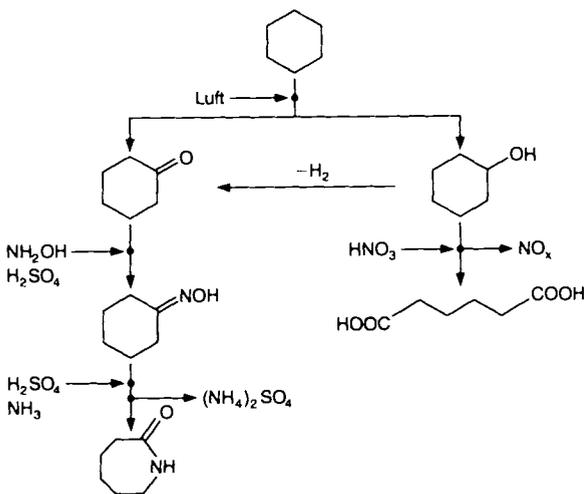


Abb. 8. Herstellung von Caprolactam und Adipinsäure auf der Basis von Cyclohexan.

nen Anolon auf diesem Wege hergestellt. Zwar wurde die Ausbeute im Laufe der Jahre deutlich gesteigert, aber dies nur bei einem Umsatz unter 4%. Die Folge ist, daß riesige Mengen Cyclohexan im Kreis gefahren werden müssen – nicht nur ein Kosten-, sondern auch ein Sicherheitsproblem.

Anolon wird entweder direkt als Gemisch mit Salpetersäure – also immer noch eine chemische Oxidation mit Ringöffnung – zu Adipinsäure oxidiert oder, nach katalytischer Dehydrierung des Cyclohexanols, über das Cyclohexanonoxim zu Caprolactam umgesetzt. Um wenigstens für den Adipinsäureteil die unbefriedigende Synthese über zwei Oxidationsstufen zu vermeiden, wurden neue Synthesewege ausgearbeitet.

Rhône-Poulenc hat ein Verfahren zum Patent angemeldet, bei dem Diacetoxybuten, das bereits in technischem Maßstab durch Acetoxylierung von Butadien zugänglich ist, zum 3-Hexendicarbon säure diester carbonyliert wird. Anschließend Hydrierung und Verseifung führen zur Adipinsäure. Eine erfolgreiche technische Ausarbeitung dieses Verfahrens böte die Chance zu einem neuen Syntheseweg für Adipinsäure auf der Basis von Butadien.

Auch die BASF hat eine neue Synthese für Adipinsäure entwickelt (Abb. 9). Mit der direkten Carbonylierung von Butadien zahlt sie zwar den Preis einer zweistufigen Synthese zum Adipinsäurediester, wobei die entstehenden Isomere nach Rückspaltung in die Synthese wieder zurückgeführt werden. Das Verfahren hat jedoch den Vorteil, daß der Roh-C<sub>4</sub>-Schnitt aus dem Steamcracker direkt eingesetzt werden kann. Damit erfolgt eine chemische Extraktion des Butadiens unter gleichzeitiger Höherveredelung.

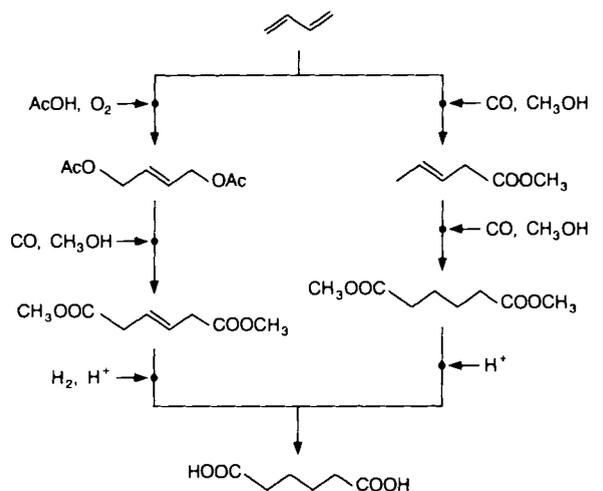


Abb. 9. Herstellung von Adipinsäure auf der Basis von Butadien.

Zwei grundsätzliche Einsichten werden uns hier vermittelt:

- Selbst bei technischen Großprodukten mit einer mehr als 40jährigen Erfolgsgeschichte kann es zu einem Innovationswettbewerb mit zunächst völlig offenem Ausgang kommen.
- Die Rohstoffquelle der neuen, konkurrierenden Verfahren ist ein bislang nicht voll genutztes Nebenprodukt aus dem C<sub>4</sub>-Schnitt der Olefin-Erzeugung.

Die intrinsischen Möglichkeiten des Butadiens sind damit aber nicht erschöpft, und ebensowenig wird der C<sub>5</sub>-Schnitt der Steamcracker bislang optimal genutzt. Dies sind nur einige von vielen denkbaren Hinweisen auf Schätze, die früher oder später gehoben werden können.

## 7. Rationalisierung des Energieeinsatzes weitgehend abgeschlossen

Während die stoffliche Rationalisierung unser ständiges Bemühen bleiben muß, ist im Bereich der Optimierung des Energieverbundes bis in den Temperaturbereich um 100 °C inzwischen ein gewisser Abschluß erreicht. In den achtziger Jahren wurden in der BASF große Anstrengungen unternommen und durch konsequente Anwendung der Wärmeintegrationsmethode auf die einzelnen Betriebe und Verfahren wesentliche Energieeinsparungen erreicht. Durch Investitionen in Energiesparmaßnahmen konnten durch die intensive Nutzung der Prozeßenergie nicht nur Investitionen in ein neues Kraftwerk vermieden, sondern Dampfeinsparungen von 700 Tonnen pro Stunde realisiert werden. Der Erfolg drückt sich in einer signifikanten Verminderung des spezifischen Energieaufwandes aus (Abb. 10): trotz einer Erhöhung der Produktion um 60% seit 1972 konnte der Verbrauch an Primärenergieträgern auf 40% gesenkt werden.

Da die Verminderung des Energieinputs immer auch eine Senkung des CO<sub>2</sub>- und Schadstoff-Outputs bedeutet, sind die positiven Auswirkungen dieser Maßnahmen auf die Umwelt erheblich (Tabelle 2). Die BASF hat damit einen wesentlichen Beitrag zur Senkung der CO<sub>2</sub>-Emissionen bereits ge-

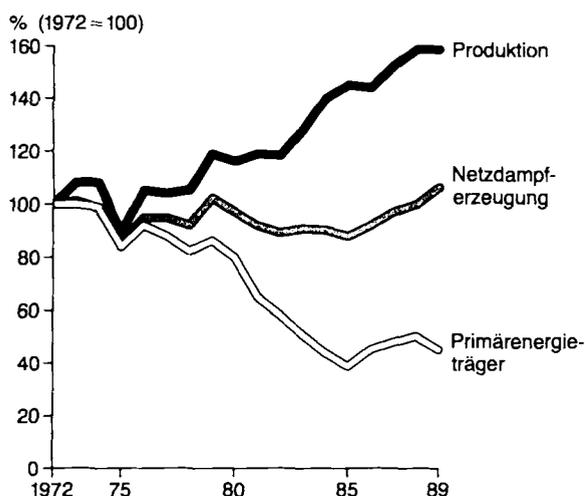


Abb. 10. Entwicklung von Produktion und Energieverbrauch zwischen 1972 und 1989.

leistet. Dies ist ein äußerst erfolgreiches Beispiel aus der jüngsten Zeit, bei dem die Innovation durch theoretische Arbeiten an der Hochschule, in diesem Fall durch Prof. Linnhoff an der Universität Manchester, initiiert wurde. Durch den kollektiven Sachverstand und das spezifische Fachwissen in der Industrie konnte diese Methode mit breitem Erfolg in den Produktionsanlagen angewandt werden.

Tabelle 2. Günstige Auswirkungen der Rationalisierung des Energieeinsatzes auf die Umwelt.

<b>Energieträger-Einsparung</b>	
Heizöl (schwer)	600 000 t/a
<b>Emissionsminderung</b>	
Kohlendioxid	1 900 000 t/a
Schwefeldioxid	12 000 t/a
Stickoxide	6000 t/a
Asche	180 t/a

## 8. Weiterentwicklung von Prozeßanalytik und -steuerung: faszinierende Chancen

Einen weiteren Innovationsbedarf sehen wir in der Elektro-, Meß- und Regeltechnik. Für den Ausbau der Prozeßsteuerung durch „Advanced Control“ sind detailliertere Kenntnisse über einzelne Prozeßschritte bis hin zur Modellierung und Simulation des Gesamtprozesses erforderlich. Bei einem verstärkten, computergestützten Einsatz dieser Technik stehen vor allem in Großverfahren mit wechselnden Einsatzstoffen und -qualitäten eine Minimierung von Rohstoff- und Energieeinsatz ebenso auf der Habenseite wie eine Minimierung von Reststoffen und nicht spezifikationsgerechter Produktion.

Einer weitergehenden Realisierung steht jedoch in vielen Anwendungsbereichen ein prinzipieller Mangel entgegen: mit Hilfe der EDV könnten heute für eine Prozeßsteuerung viele unterschiedliche Meßdaten miteinander verknüpft werden, das Hauptproblem liegt jedoch in der Ermittlung und Messung der relevanten Stoff- und Störgrößen. Das Problem der in-situ-Messung von Temperatur, Druck, Mengenströ-

men und einigen Stoffgrößen kann zwar als gelöst angesehen werden. Es fehlen jedoch in der Regel Sensoren zur on-line-, oder besser noch in-line-Messung der übrigen Größen. Insbesondere geringe Konzentrationen oder chemisch ähnliche Stoffe entziehen sich noch der exakten direkten Bestimmung. Dies gilt vor allem für schwer- und nichtflüchtige Verbindungen, die nicht gaschromatographisch erfaßt werden können. So trivial scheinende Fragestellungen wie die Messung der Konzentration von Salpetersäure in Schwefelsäure, von Metallen oder Salzanionen in verschiedenen Oxidationsstufen oder von Spuren von Metallen in Gasströmen können bis heute noch nicht direkt und kontinuierlich analysiert werden. Hier bedarf es dringend der Entwicklung geeigneter Sensoren und Meßmethoden.

Vor allem für die Steuerung und Qualitätssicherung von Feststoffprozessen ist die schnelle, direkte Ermittlung von Produktzuständen und die Kontrolle zustandsverändernder Maßnahmen von eminenter Bedeutung. Ein wichtiges Merkmal der Feststoffverfahren ist, daß die Produkteigenschaften nicht nur von der chemischen Zusammensetzung, sondern ganz wesentlich von den dispersen Eigenschaften des Produktes abhängen. Beispielsweise beeinflußt die Partikelgrößenverteilung und Partikelform eines Kristallisats den Filtrationsvorgang und dessen Ergebnis maßgeblich.

Die Farbwirkung eines lackierten Autos wird ebenso von der Partikelgröße der Pigmentteilchen bestimmt wie z. B. die rheologischen Eigenschaften des Lackes bei dessen Verarbeitung. Abbildung 11 zeigt die Abhängigkeit der gewünschten

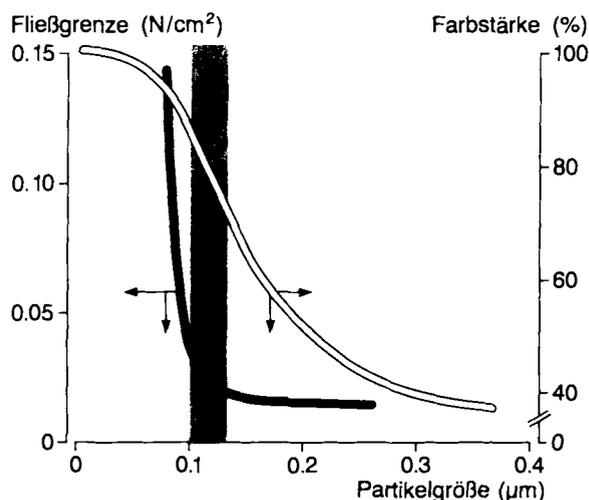


Abb. 11. Einfluß der Partikelgröße auf die Fließgrenze von Lackdispersionen und die Farbstärke von Pigmentlacken.

Zielgrößen von der zu bestimmenden Meßgröße. Da beide Eigenschaften stark von der Partikelgröße abhängen, dabei die Farbstärke hoch und die Fließgrenze niedrig sein soll, existiert nur ein schmaler geeigneter Bereich (in Abb. 11 grau). Erschwerend kommt hinzu, daß diese charakteristische Größe nicht nur bei der Synthese des Pigmentes, sondern auch bei den Folgeschritten wie Trocknen, Konfektionieren oder Dispergieren in das Lackharz beeinflusst wird (Abb. 12).

Für eine genaue Steuerung des Produktionsprozesses und die Sicherstellung einer spezifikationsgerechten Qualität ist es erforderlich, Leitgrößen zu ermitteln, die die Endqualität

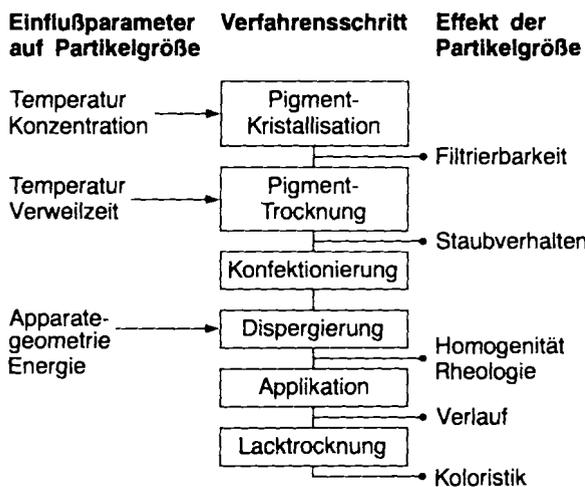


Abb. 12. Lackherstellung und Lackieren.

ausreichend bestimmen. Voraussetzung ist weiterhin, deren Abhängigkeit von den Prozeßbedingungen in den verschiedenen Verfahrensstufen genau zu kennen und deren Änderung bei den unterschiedlichen Bedingungen der Anlage auch eindeutig messen zu können. Häufig jedoch entziehen sich solche Zielgrößen einer direkten physikalischen Messung. Oft können phänomenologische Eigenschaften von Stoffen, wie das Verklebungsverhalten von Kristallisaten bei der Trocknung, die Brillanz von Pigmenten oder das Staubverhalten von Pulvern, nur mit indirekten, physikalisch nicht fundierten Meßmethoden bestimmt werden. Die Steuerung eines Produktionsprozesses mit Hilfe solcher empirischer Meßgrößen, die erst nach aufwendiger Probenaufbereitung ermittelt werden können, ist äußerst schwierig. Hier besteht enormer Bedarf, die heuristischen Modelle durch auf physikalisch-chemische Meßverfahren gegründete Methoden zu ersetzen und sie mit den gewünschten Produkteigenschaften sowie deren Abhängigkeit von den Apparate- und Prozeßparametern zu korrelieren.

## 9. Ausblick und Erwartung

Die Chemische Industrie wird eine dynamische Wachstumsindustrie bleiben. Moderne Lebensqualität und die Leistungsfähigkeit vieler anderer Branchen sind ohne die Beiträge der Chemischen Industrie nicht denkbar; das innovative Momentum unserer Branche ist ungebrochen. Und schließlich wird die Ertragskraft unserer klassischen Arbeitsgebiete benötigt, um den Aufbruch zu neuen Ufern, sei es in der Biotechnologie oder bei neuartigen Hochleistungswerkstoffen, wirtschaftlich zu ermöglichen.

Innovation ist kein eindimensionaler Vorgang, sondern dem Ineinandergreifen eines Uhrwerkes vergleichbar. Fortschritte sind in der Regel die Summation vieler kreativer Ideen und interdisziplinärer Zusammenarbeit. Bildlich gesprochen: unser vielfältiger betrieblicher Produkt- und Energieverbund muß seine Entsprechung in einem übergreifenden „Brain-Verbund“ haben. Die Hochschulen müssen arbeitsteiliger Bestandteil dieser Intelligenz-Integration sein.

Die Verfahrensforschung wird die Domäne der Chemischen Industrie bleiben; sie – und nicht die Universitäten – muß sich einem schonungslosen Wettbewerb stellen und das Diktat der Wirtschaftlichkeit und ökologischen Verträglichkeit akzeptieren. Für den Hochschulforscher dürfen solche Einschränkungen nicht gelten; er soll der Erkenntnisgewinnung Vorrang einräumen. Industrie und Hochschulen haben also auch dort, wo sich ihre Interessen berühren, aus ihrem grundverschiedenen gesellschaftlichen Auftrag heraus entsprechend unterschiedliche Grundpositionen zu vertreten.

Trotzdem erachte ich intensiven Dialog, auch intensive Zusammenarbeit, als unverzichtbar. Nicht nur in der Gründerzeit – und das gilt gleichermaßen für andere Industriezweige wie Maschinenbau oder Elektronik – waren innovative Synergien zwischen Hochschule und den korrespondierenden Wirtschaftszweigen ganz wesentliche Erfolgsfaktoren für beide und letztlich für die gesamte Volkswirtschaft und für Gesundheit und Wohlstand der Menschen.

Eingegangen am 17. Juli 1990 [A 791]