

Problemlöser und Denker

Rutger van Santen*



Rutger van Santen,
Eindhoven University of
Technology

Dringlichkeit und Entdeckung

Die Historie zeigt, dass starker gesellschaftlicher Druck wissenschaftliche Durchbrüche beschleunigen kann. Die wohlbekannte Geschichte von der Entwicklung der Ammoniaksynthese in den Jahren vor dem Ersten Weltkrieg ist ein hervorragendes Beispiel dafür, wie eine essenzielle Bedrohung der Gesellschaft Wissenschaftler mobilisieren und Entdeckungen vorantreiben kann. Weniger bekannt ist, wie der damalige Stand der Wissenschaft und Technik dieses Ergebnis beeinflusst hat. Zur Zeit der kontinentaleuropäischen Panik bezüglich der Nitratversorgung hatte Wilhelm Ostwald den Grundstein der physikalischen Chemie gelegt. Nach Fritz Habers Entdeckung des katalytischen Prozesses sollte es nur acht Jahre dauern, bis Carl Bosch diesen zur großindustriellen Anwendung brachte. Das Wechselspiel von Wissenschaft und Technik, die Beiträge von Denkern und Problemlösern – beide getrieben von der empfundenen Dringlichkeit des Problems – bringen Technologien voran.

Die derzeitige Sensibilisierung der Öffentlichkeit für die Gefahren von Treibhausgasemissionen und für die Notwendigkeit neuer Energiequellen ist vergleichbar mit der öffentlichen Debatte über Alternativen zum natürlichen Salpeter vor einem Jahrhundert. Wie können Denker und Problemlöser in der

Chemie dabei helfen, die dringlichen Probleme unserer Zeit zu lösen?

Katalyse für den Wandel

Wenn wir diese Frage beantworten möchten, müssen wir den gegenwärtigen Stand der Wissenschaft und Technik studieren. Dies war die Auffassung des niederländischen Physikers Hendrik Casimir, formuliert vor 50 Jahren nach langjähriger Verantwortung für Forschung bei Philips. Er beobachtete, dass Wissenschaft und Technik über zwei miteinander in Bezug stehende Zyklen verwoben sind. Vorhandene Methoden und Technologien können aktuelle Probleme lösen. Aber in Bereichen, wo es noch keine technologischen Antworten gibt, brauchen wir neue wissenschaftliche Einblicke. Diese beiden Aspekte können nicht voneinander getrennt werden, und der eine profitiert vom Fortschritt des jeweils anderen. Um neue Technologien verfügbar zu machen, ist Grundlagenforschung unabdingbar.

Mit diesem Gedanken im Hinterkopf befragte ein Team bestehend aus meinem Kollegen Djan Khoe, dem Wissenschaftsjournalisten Bram Vermeer und mir führende Denker und Problemlöser. Wir fragten nach möglichen Innovationen, mit denen sich die Probleme unserer Zeit lösen lassen könnten. Auf welchen Gebieten sind wir ausreichend gut positioniert, um einen Durchbruch zu erzwingen? Wie lässt sich die Wissenschaftlergemeinschaft derart mobilisieren wie zu Zeiten Habers? Die Ergebnisse dieser Interviews sind im

Buch *2030: Technology That Will Change the World* dokumentiert (siehe Rezension von G. Whitesides in der *Angewandten Chemie*^[1]).

In dem Buch werden zahlreiche vielversprechende nichtchemische Innovationen beschrieben, z. B. Körperscanner, optische Kommunikation und Erdwärme. Dennoch spielt die Chemie eine wichtige Rolle bei unserer Vision für die Zukunft. Im Besonderen kommt der Katalyse eine zentrale Aufgabe bei der Lösung der gegenwärtigen Probleme zu.

Auf welchen Gebieten können wir einen Durchbruch erzwingen?

Dies wird niemanden überraschen, der mit der Geschichte der Katalyse vertraut ist. Seit den Tagen Habers haben sich Katalysatoren als essenziell für die Prozessoptimierung erwiesen. Sie bieten eine bessere Kontrolle, eine erhöhte Effizienz und neue Wege zur Materialverwendung – allesamt entscheidende Zutaten für die Lösung von Problemen.

Einige Beispiele: Der Haber-Bosch-Katalysator auf Eisenbasis stellte sich auch als exzellenter Katalysator für die Kohlenwasserstoffsynthese aus Synthesegas heraus, wie ein Jahrzehnt später von Franz Fischer und Hans Tropsch entdeckt wurde. Deren Verfahren verringerte die Abhängigkeit von Rohöl und ebnete damit den Weg zur Herstellung von Treibstoffen aus alternati-

[*] Prof. Dr. R. van Santen
Eindhoven University of Technology
(Niederlande)
E-Mail: r.a.v.santen@tue.nl

ven Quellen wie Kohle und heutzutage Biomasse und Erdgas.

In ähnlicher Weise wurden andere katalytische Technologien ausgearbeitet, um gesellschaftliche Bedürfnisse zu befriedigen. Komplexe Edelmetallkatalysatoren verringern bei Fahrzeugen die Emission schädlicher Stickoxide. Synthetische nanoporöse Zeolithminerale finden Anwendung als Katalysatoren in Crackern für Rohöl zur Herstellung leistungsfähigerer Treibstoffe. Als Ersatz für Tonerde-Katalysatoren haben sie die Effizienz der Energieumwandlung drastisch verbessert.

Fortschritte in der Katalysertechnologie wurden stets durch einen akuten gesellschaftlichen Bedarf bedingt. Während die Dringlichkeit manchmal von einem bevorstehenden Krieg herrührte, zeigen die obigen Beispiele, dass die Sorge um die Umweltverschmutzung und die Ölabhängigkeit ebenfalls ausreichende Impulse gegeben hat.

Verkleinerung der Produktion

Die heutige Katalysatorforschung und -technologie ebnet neue Wege hin zu höherer Energieeffizienz und Präzision bei der Materialverwendung. Einzelmolekülmanipulation und Selbstorganisation komplexer molekularer Aggregate sowie nanoskalige komplexe und funktionale Materialien sind zu wegweisenden Forschungsgebieten geworden.

Diese Entwicklung verleiht uns die Möglichkeit, Produkte und Produktionsstätten drastisch zu verkleinern. Einhergehend mit einer analogen Miniaturisierung der Computertechnologie gibt uns dies die einzigartige Gelegenheit, Chemie mit künstlicher Intelligenz zu vereinen. Daraus resultiert ein Paradigmenwechsel in der Industrie: Um die Effizienz zu erhöhen, müssen wir nicht länger den Maßstab vergrößern. Die Miniaturisierung hat den Vorteil erhöhter Präzision und ermöglicht es, Prozesse nahe an ihrem thermodynamischen Optimum zu fahren sowie die Steuerung zu beschleunigen. Mikrofluidische Prozesse können auf diese Weise zu einer effizienteren Pro-

duktion führen, logistische Probleme lösen und eine bessere Nutzung von Materialien ermöglichen. Warum kehren wir die Tendenz zu immer größeren Einheiten also nicht einfach um und schrumpfen die Ausrüstung?

Physikalische Grenzen für den Wandel

Die Herausforderung besteht darin, solche neuen Technologien schnell genug einzuführen, dass sie eine wichtige Rolle bei der Lösung unserer heutigen Probleme spielen können. Ein technologischer Wandel in großem Maßstab, wie er für die Einführung mikrofluidischer Produktion nötig ist, wird Zeit kosten. Die Industrie hat Netzwerke symbiotischer Beziehungen und lange „Nahrungsketten“ von Lieferanten entwickelt. Wie ein natürliches Ökosystem kann das komplexe „Chemotop“ miteinander vernetzter Industrien kleine Änderungen überleben. Das Eindringen einer neuen „Spezies“, wie Mikroanlagen, kann jedoch den Zerfall des gesamten Systems herbeiführen und einen völligen Systemwandel auslösen. Der Ökonom Joseph Schumpeter nannte diesen Vorgang „kreative Zerstörung“, ein Phasenübergang, der an die später von Thomas Kuhn beschriebenen „wissenschaftlichen Revolutionen“ erinnert. Wir finden solche Übergänge auch in anderen komplexen Systemen, z.B. in Ökosystemen, bei autokatalytischen Prozessen und beim Erdklima.

Ein dramatischer Wandel dieser Größenordnung benötigt Jahrzehnte. Zwei Kollegen von Shell, Gert Jan Kramer und Martin Haigh, haben vor Kurzem gezeigt, dass es „physikalische Grenzen“ für die Geschwindigkeit gibt, mit der sich neue Technologien industriell nutzen lassen.^[2] Neue Technologien, die Produktionsmittel ersetzen könnten, wachsen mit der Geschwindigkeit von einer Größenordnung pro Jahrzehnt. Der Grund hierfür ist, dass ihre Einführung umfangreiche Tests und die Konstruktion unterschiedlicher Generationen von Demonstrationsanlagen umfasst. Nach dem Erreichen eines Marktanteils von einigen Prozent schwächt sich das exponentielle Wachstum ab und geht von da an mit der Ge-

schwindigkeit einher, mit der alte Anlagen ausgetauscht werden. Dies bedeutet, dass eine neue Energieumwandlungstechnologie 30 Jahre benötigen wird, um 10 Prozent der weltweiten Energieproduktion zu erzielen. Ganz ähnlich kann es noch Jahrzehnte dauern, bis wir ein neues Detergenz direkt aus einer Mikrofertigung im Supermarkt kaufen werden.

Computergestützte Entdeckung

Wir können nicht so lange warten. Sollen neue Technologien noch von irgendeinem Nutzen für die Lösung der gegenwärtigen Probleme sein, muss die Zeit bis zu ihrer industriellen Nutzung verkürzt werden. Eine massive Investition in die Forschung wird sicher hilfreich sein. Die Motivation sollte dabei sein, Wege zum Beschleunigen der Implementierung vielversprechender Technologien zu finden. Die Herausforderung besteht darin, die Komplexität, Kosten und Geschwindigkeit der Implementierung neuer Technologien für die Massenproduktion zu verringern. Dies ist eine wissenschaftliche ebenso wie eine technologische Angelegenheit.

Katalysatorforschung mit Computern treibt Innovationen an.

In der Katalysertechnologie stehen wir kurz vor einer deutlichen Beschleunigung von Entdeckungen und industriellen Implementierungen. Wir verdanken dies Pionieren wie Gerhard Ertl und Gábor Somorjai, die den größten Teil ihres Lebens damit verbracht haben, die atomaren Prozesse auf Katalysatoroberflächen aufzuklären. Ihre Einblicke ermöglichen es uns, Computersimulationen neuer katalytischer Materialien für unerforschte Reaktionen zu entwerfen, was wiederum die experimentelle Suche nach neuen Katalysatoren einengt. Im Ergebnis wird die Katalysatorforschung zu einem molekularen Engineering und umgeht damit die empirische Kunst des „learning by doing“. Dies verkürzt die Entwicklungszeit einer neuen Technologie und führt zu erhöhter Präzision. Computer ersetzen so

in großem Umfang physikalische Tests, was uns die nötige Geschwindigkeit zur Implementierung neuer Technologien in die Hand gibt.

Intelligente Katalysatoren

Dies ist erst der Beginn des tiefgreifenden Einflusses autonomer Programmabläufe auf Innovationen in der chemischen Industrie. Die Vereinigung von Katalyse- und Computertechnologie vervielfacht unsere Möglichkeiten. Ein Beispiel ist die Autoabgaskontrolle, wo Sensoren und Katalysatoren zusammenarbeiten. Das Potenzial ist jedoch viel größer. Katalysatoren können als Prozessmultiplikatoren verstanden werden, die die Energie- und Materialeffizienz erhöhen. Die Computertechnologie ist ein Intelligenzmultiplikator, der Steuerung, Rückkopplung und Adaption sowie letztlich Selbstorganisation ermöglicht. Zusammen könnten beide die drängenden Probleme der Menschheit in einem Jahrzehnt statt in einem halben Jahrhundert lösen.

Es gibt reichlich Probleme, die nach einer Lösung innerhalb einer Generati-

on verlangen: der Bedarf an erneuerbaren Energiequellen (gleichbedeutend mit der Erfordernis einer verbesserten elektrokatalytischen Hydrolyse für die Wasserstofferzeugung), an effizienten Batterien mit hoher Dichte zur Speicherung und zum Transport von Elektrizität, an unterschiedlichen und neuen Umwandlungssystemen für Kohlendioxid, Biomasse-bezogene Systeme und Solarenergie sowie am Zugang zu gereinigtem Oberflächenwasser, um nur einige zu nennen.

Suche nach neuen Werkzeugen

Fortschritte in der Soft- und Hardware werden eine schnellere Umsetzung neuer Technologien ermöglichen. Wir können aber nicht einfach Programmierer einstellen, damit sie für uns neue Programme schreiben. Wir müssen uns klar machen, dass solche Programme aus dem Wunsch resultieren, die atomaren Grundlagen der Chemie und die Komplexität von Reaktionssystemen zu verstehen. Ertl hatte keine Anwendung im Sinn, als er sich daranmachte, die Ammoniakkatalyse zu verstehen. Als er seine Forschungen betrieb, war der

Prozess bereits nahezu optimiert. Die neuen Werkzeuge, die er und seine Kollegen für ihre Forschungen entwickelten, sind das Ergebnis der Grundlagenforschung.

Dementsprechend sind Investitionen nicht nur in anwendungsbezogene Forschungen erforderlich. Es sollte eine Balance angestrebt werden zwischen der Förderung anwendungsorientierter Projekte und der Unterstützung von Grundlagenforschung, die auf das Unerwartete abzielt, angetrieben allein von Neugier und dem Wunsch zu verstehen. Der praktisch veranlagte Ingenieur und der erfinderische Wissenschaftler ergänzen einander. Indem beide unterstützt werden, können sich Wissenschaft und Technik fortentwickeln und sich weiterhin gegenseitig befruchten. Wir brauchen die Problemlöser ebenso wie die Denker.

[1] G. Whitesides, *Angew. Chem.*, 10.1002/ange.201106671; *Angew. Chem. Int. Ed.*, 10.1002/anie.201106671.

[2] G. J. Kramer, M. Haigh, *Nature* **2009**, 462, 568