



chemPLANT-Aufgabe 2024:

chemBASICS: Herstellung von nachhaltigen Grundchemikalien

Die chemische Industrie steht vor einer Mammutaufgabe: Ersetzen der petrochemischen Rohstoffgewinnung durch erneuerbare Quellen und dabei bis spätestens 2050 Netto-Treibhausgasneutralität gewährleisten. Besonders schwierig wird diese Aufgabe dadurch, dass die Herstellung der Grundchemikalien für ca. 2/3 der gesamten Treibhausgasemissionen der chemischen Industrie verantwortlich ist^[1]. Zu diesen Grundchemikalien zählen Methanol, Ammoniak, Harnstoff, Ethylen, Propylen, Butadien und Chlor, sowie die Aromaten Benzol, Toluol und Xylol.

Die diesjährige chemPLANT-Aufgabe thematisiert die Herstellung von Butadien, das vor allem für die Produktion von Synthetikgummi und weiteren Polymeren verwendet wird. Butadien fällt als Nebenprodukt bei der Herstellung von Ethylen aus Naphtha im Steamcracker an. Über diesen Weg werden ca. 95 % des weltweit verwendeten Butadiens hergestellt^[2]. Durch den Betrieb der Steamcracker mit Erdgas und die Bereitstellung des Naphthas aus petrochemischen Quellen fallen ca. 1,7 tCO₂ - Äquivalente pro Tonne Butadien an. Das zu entwickelnde Konzept soll im Vergleich zu diesem Referenzwert eine bessere Treibhausgasbilanz (in CO₂eq) aufweisen. Idealerweise soll das Konzept in Zukunft ermöglichen, Netto-Treibhausgasneutralität zu erreichen. Betrachtet werden soll der Treibhausgasausstoß von der Rohstoffbeschaffung bis zur Fertigstellung des Butadiens. Hierbei darf der Kohlenstoff recycelt sein, z.B. durch die Verwertung von Kunststoffabfällen. Dies wird im Rahmen der Aufgabe auch als treibhausgasneutral angesehen. Gehen Sie zum Vergleich von einem CO₂-Preis von ca. 70 € pro tCO₂ aus. Bei der Konzeptentwicklung soll beachtet werden, dass die Rohstoffe nicht in Konkurrenz zur Lebensmittelindustrie stehen. Beachten Sie bei der Wahl der Rohstoffquelle auch, dass eine zentrale oder mehrere dezentrale Anlagen oder Vorstufen geplant werden können. Die Gesamtproduktionsmenge an Butadien soll sich auf 50 kt pro Jahr belaufen.

Aktuelle Bestrebungen, den Treibhausgasausstoß bei der Bereitstellung von Butadien zu senken, behandeln die Verwendung von synthetischem Naphtha in herkömmlichen Steamcrackern. Butadien, welches mit diesem nachhaltigeren Verfahren hergestellt wird, hat einen Verkaufspreis von ca. 2000 € pro Tonne. Begründen Sie den Verkaufspreis, der sich aus ihrem Konzept ergibt, gegen diesen Referenzwert.

Neben dem Preis sollten Sie beachten, dass Ihr Produkt ein wichtiges Ausgangsmaterial für weitere Synthesen darstellt. Daher ist eine Mindestreinheit von 99,6 Gew. % 1,3-Butadien essenziell. Die weiteren Grenzwerte der Verunreinigungen können Tabelle 1 entnommen werden.

[1] Roadmap Chemie 2050, Dechema und FutureCamp

[2] C. White, Butadien production process overview, Chem Biol Interact., 2007

Tabelle 1: Maximale Verunreinigungen im Produktstrom.

Komponente	Zusammensetzung
Cis-Buten-2	4000 [mg/kg]
Alkine	15 [mg/kg]
Allene	20 [mg/kg]
Alkohole & Carbonyle	20 [mg/kg]
Wasser	100 [mg/kg]
Schwefel	1 [mg/kg]

Infrastruktur und Betriebsmittel am zentralen Standort

Kosten für die einzelnen am Standort zur Verfügung stehenden Betriebsmittel (sofern sie nicht selbst erzeugt werden) sowie anfallende Kosten für Entsorgung sind Tabelle 2 zu entnehmen. Weitere Betriebsmittel sind bei Bedarf zu begründeten Bedingungen zu wählen.

Tabelle 2: Betriebsmittel und Infrastruktur am zentralen Standort.

	Spezifikation	Kosten
Betriebsmittelkosten		
Strommix	10 kV & 400 V	80 € / MWh
Ökostrom	10 kV & 400 V	100 € / MWh
Erdgas	-	50 € / MWh
Hochdruck-Dampf*	40 bar	50 € / t
Niederdruck-Dampf	5 bar	25 € / t
Druckluft*	6 bar	70 € / 1000 Nm ³
Kühlwasser*	25 °C ($\Delta T_{\max} = 10 \text{ K}$)	80 € / 1000 m ³
Trinkwasser	-	2 € / m ³
Entsorgungskosten		
Abwasser	< 10.000 ppm CSB**	5 € / m ³

*nicht verfügbar bei dezentraler Ausführung

**CSB = Chemischer Sauerstoffbedarf

Das Anlagenkonzept darf sowohl zentral als auch dezentral entwickelt werden. Wenn sich für eine dezentrale Konzeptentwicklung entschieden wird, müssen die Preise der entsprechenden Betriebsmittel selbst evaluiert und umfassend argumentiert werden. Bei der Konzeptionierung und CO₂-Bilanzierung ist der Edukt-Bezug aus den Rohstoffquellen zu berücksichtigen. Bei der Konzept- und Verfahrensentwicklung sollen die **Innovation sowie der Nachhaltigkeits- und Wirtschaftlichkeitsaspekt** besonders betrachtet werden. Diskutieren Sie Ihre Entscheidungen und begründen Sie Ihre Annahmen.

Zusammengefasst gliedert sich die Aufgabe in folgende Schritte:

- Evaluierung möglicher nachhaltiger Rohstoffquellen in Deutschland.
- Verfahrenstechnische Auslegung Ihres innovativen Produktionskonzeptes.
- Erarbeitung der Massen- und Energiebilanzen für die angestrebte produzierte Butadien-Menge.
- Auslegung und Dimensionierung der Apparate.
- Erstellung eines Verfahrensfließbildes inkl. -beschreibung.
- Wirtschaftlichkeitsbetrachtung unter Berücksichtigung der Investitions-, Betriebs- und Logistikkosten sowie eine Bestimmung der Treibhausgasbilanz für das gesamte Konzept

Ihre Prozessentwicklung wird schlussendlich evaluiert und bewertet. Die Kriterien für den Bewertungsprozess sind wie folgt:

- Kreative Prozessentwicklung unter Berücksichtigung des Bezuges aus den Rohstoffquellen.
- Ökologie des Prozesses (und - falls benötigt - der Logistik) unter Betrachtung der Treibhausgasbilanz pro Tonne Butadien.
- Wirtschaftlichkeitsbetrachtung: Verkaufs- und Erzeugungspreis pro Tonne Butadien.