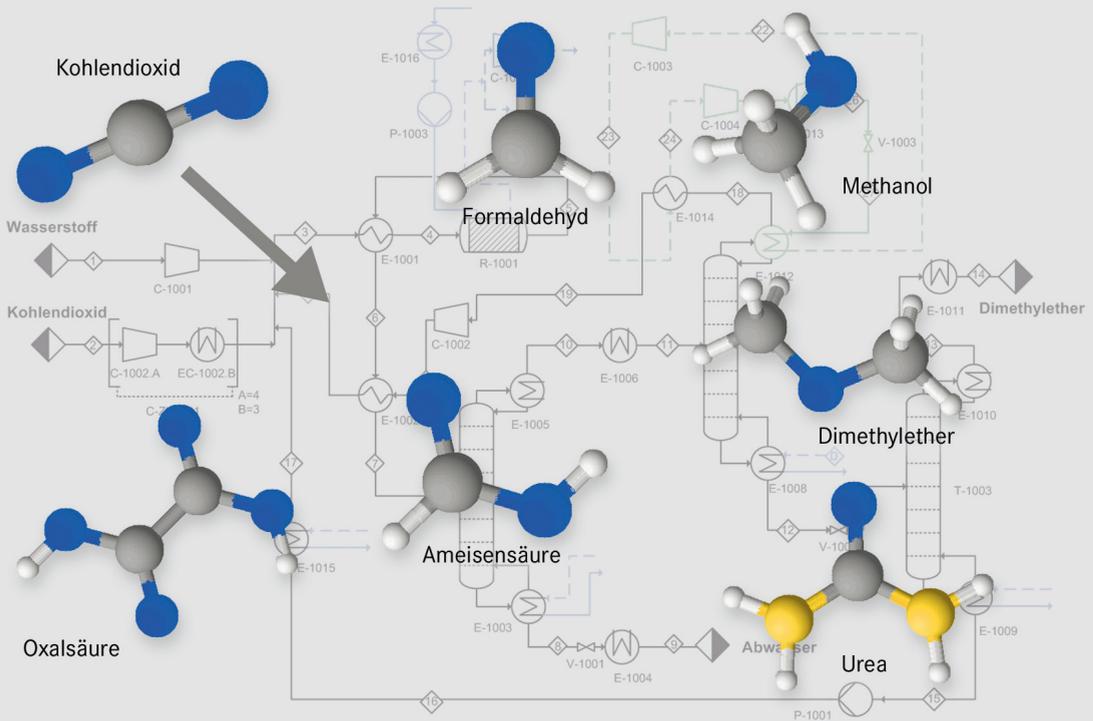


Chemische, verfahrenstechnische und ökonomische Bewertung von Kohlendioxid als Rohstoff in der chemischen Industrie

Alexander Otto



Energie & Umwelt /
Energy & Environment
Band / Volume 268
ISBN 978-3-95806-064-7

Forschungszentrum Jülich GmbH
Institut für Energie- und Klimaforschung
Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-3)

Chemische, verfahrenstechnische und ökonomische Bewertung von Kohlendioxid als Rohstoff in der chemischen Industrie

Alexander Otto

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment

Band / Volume 268

ISSN 1866-1793

ISBN 978-3-95806-064-7

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung.....	1
2	Zielsetzung und Vorgehensweise	5
3	Kohlendioxid als Rohstoff	7
3.1	Stand der industriellen Nutzung von CO ₂ für organische Produkte	7
3.1.1	Harnstoff.....	8
3.1.2	Methanol.....	8
3.1.3	Salicylsäure	9
3.1.4	Organische Carbonate und Bisphenol-A-Polycarbonat	9
3.1.5	Polypropylencarbonat	10
3.2	Reaktivität von Kohlendioxid.....	10
3.3	Aktivierung von CO ₂ durch Metalle	12
3.4	Hauptgruppenmetall-katalysierte Reaktionen.....	13
3.5	Übergangsmetall-katalysierte Reaktionen.....	15
3.5.1	Oxidative Kupplung.....	15
3.5.2	Insertion von CO ₂ in Metall-Elementbindungen.....	17
3.6	Reaktion mit Stickstoffverbindungen	21
3.7	Oxidative Dehydrierung von Kohlenwasserstoffen	22
3.8	Zusammenfassung der möglichen Reaktionen über CO ₂	23
4	Spezifische CO ₂ -Emissionen von Betriebsmitteln und Rohstoffen	25
4.1	Betriebsmittel	25
4.1.1	Elektrischer Strom aus dem deutschen Strommix.....	25
4.1.2	Elektrischer Strom aus erneuerbaren Energien	27
4.1.3	Erdgasbefeuerter Dampferzeuger.....	27
4.1.3.1	Wirkungsgrad und spezifische CO ₂ -Emissionen des Erdgasbrenners	29
4.1.3.2	Einfluss der Betriebsparameter auf die CO ₂ -Emissionen	34
4.1.3.3	Allgemeiner Emissionsfaktor für die Wärmebereitstellung	36
4.2	Rohstoffe	37
4.2.1	Wasserstoffherstellung über Dampfreformierung von Erdgas	37
4.2.2	Wasserstoffherstellung über alkalische Elektrolyse.....	39
4.2.3	Kohlendioxid	40
4.2.3.1	Kohlendioxid aus fossilen Kraftwerksprozessen	41
4.2.3.2	Kohlendioxid aus der Ammoniak-Synthese.....	43

4.2.3.3	Abtrennung von CO ₂ aus der Umgebungsluft.....	46
4.3	Zusammenfassung.....	47
5	Grundlagen der Wirtschaftlichkeitsanalyse.....	49
5.1	Investitionssumme.....	49
5.1.1	Bestimmung des Größenparameters Z für Anlagenbauteile.....	54
5.2	Herstellkosten.....	59
5.3	Herstellkosten abhängig von Zertifikatspreis und CO ₂ -Vermeidungskosten.....	63
5.3.1	CO ₂ -Vermeidungskosten verschiedener Reduktionsoptionen.....	64
6	Vorauswahl CO ₂ -basierter Reaktionen.....	67
6.1	Bewertungskriterien.....	67
6.1.1	Bulkchemikalien.....	67
6.1.2	Feinchemikalien.....	69
6.1.2	Erfassung von Reaktionen und.....	71
6.2	Unterteilung in Bulk- und Feinchemikalien.....	71
6.3	Bewertung der Bulkchemikalien.....	74
6.3.1	Bewertungsergebnis für die Bulkchemikalien.....	78
6.4	Bewertung der Feinchemikalien.....	79
6.4.1	Bewertungsergebnis für die Feinchemikalien.....	82
6.5	Diskussion der Vorauswahl CO ₂ -basierter Reaktionen.....	84
7	Vergleich der konventionellen und CO ₂ -basierten Prozesse.....	89
7.1	Berechnungsgrundlagen und Simulationswerkzeug.....	89
7.1.1	Aspen Plus.....	90
7.1.2	Entwicklung der Verfahrensführung der CO ₂ -basierten Prozesse.....	90
7.1.3	Randbedingungen für die Prozesssimulationen.....	91
7.2	Ameisensäure.....	94
7.2.1	CO ₂ -basierte Synthese.....	95
7.2.2	Bewertung des Potentials der CO ₂ -basierten Synthese.....	99
7.3	Oxalsäure.....	101
7.3.1	CO ₂ -basierte Synthese.....	101
7.3.2	Bewertung des Potentials der CO ₂ -basierten Synthese.....	103
7.4	Formaldehyd.....	105
7.4.1	CO ₂ -basierte Synthese.....	107
7.4.2	Bewertung des Potentials der CO ₂ -basierten Synthese.....	108

7.5	Methanol.....	109
7.5.1	CO ₂ -basierte Synthese	109
7.5.2	Bewertung des Potentials der CO ₂ -basierten Synthese	110
7.5.3	Analyse des konventionellen Prozesses	111
7.5.4	Energiebedarf und CO ₂ -Emissionen des konventionellen Prozesses.....	113
7.5.5	Entwurf und Simulation des CO ₂ -basierten Methanol-Prozesses.....	114
7.5.6	Parametervariation des CO ₂ -basierten Prozesses	117
7.5.7	CO ₂ -Emissionen des CO ₂ -basierten Prozesses.....	120
7.5.8	Vergleich und Bewertung der Prozesse	122
7.6	Harnstoff.....	123
7.6.1	Analyse des Stamicarbon CO ₂ -Stripping Prozesses	124
7.6.2	Energie und CO ₂ -Emissionen der Harnstoffsynthese.....	126
7.6.3	Simulation der Ammoniak-Herstellung aus regenerativem Wasserstoff ...	127
7.6.3.1	Energiebedarf und CO ₂ -Emissionen	130
7.6.4	Bewertung der Harnstoffsynthese.....	132
7.7	Dimethylether	134
7.7.1	CO ₂ -basierte Synthese	134
7.7.2	Bewertung des Potentials der CO ₂ -basierten Synthese	135
7.7.3	Simulation des konventionellen Prozesses	136
7.7.4	Energiebedarf und CO ₂ -Emissionen des konventionellen Prozesses.....	139
7.7.5	Entwurf und Simulation des CO ₂ -basierten Dimethylether-Prozesses.....	140
7.7.6	Parametervariation des CO ₂ -basierten Prozesses	145
7.7.7	Energiebedarf und CO ₂ -Emissionen des CO ₂ -basierten Prozesses.....	148
7.7.8	Vergleich und Bewertung der Prozesse	150
7.8	Diskussion des Vergleiches der konventionellen und CO ₂ -basierten Prozesse	151
8	Wirtschaftlichkeitsanalyse der Prozesse	157
8.1	Methanol.....	157
8.1.1	Investitionssumme und Herstellkosten des MegaMethanol Konzeptes	157
8.1.2	Investitionssumme des CO ₂ -basierten Prozesses.....	158
8.1.3	Herstellkosten des CO ₂ -basierten Prozesses	160
8.1.4	Einfluss des CO ₂ -Zertifikatspreises auf die Herstellkosten	161
8.1.5	CO ₂ -Vermeidungskosten	162
8.2	Dimethylether	164

8.2.1	Investitionssumme des konventionellen Prozesses	164
8.2.2	Investitionssumme des CO ₂ -basierten Prozesses	165
8.2.3	Herstellkosten von Dimethylether	166
8.2.4	Einfluss des CO ₂ -Zertifikatspreises auf die Herstellkosten	168
8.2.5	CO ₂ -Vermeidungskosten.....	169
8.3	Diskussion der Wirtschaftlichkeitsanalyse	171
9	Diskussion.....	175
10	Zusammenfassung	179
11	Literatur	185
12	Anhang	197
12.1	Verzeichnis der Abbildungen.....	198
12.2	Verzeichnis der Tabellen.....	201
12.3	Verzeichnis der Abkürzungen, Symbole und Indices.....	205
12.4	Auflistung der betrachteten Stoffe und Reaktionen.....	209
12.5	Daten für die Bewertung der Feinchemikalien	253
12.6	Auslegung und Simulation einer Kompressionskältemaschine	257
12.7	Zusatzinformationen zur Simulationssoftware Aspen Plus	260
12.7.1	Auswahl des thermodynamischen Modells.....	260
12.7.2	Aspen Plus Daten-Regressions-System.....	262
12.7.3	RadFrac-Modell in Aspen Plus	264
12.8	Detaillierte Aufstellung der Bauteilkosten	265

Um zukünftig die Ziele der Reduktion von CO₂-Emissionen zu erreichen, erfordert es eine Kombination zahlreicher Maßnahmen. Unter anderem beinhalten diese die Steigerung von Wirkungsgraden, den Ausbau von erneuerbaren Energien sowie die Abtrennung von Kohlendioxid aus Rauchgasen von fossilen Kraftwerksprozessen und Industrieprozessen mit anschließender geologischer Speicherung. Die Speicherung von Kohlendioxid ist jedoch mit zusätzlichen Kosten und einem zusätzlichen Energieaufwand verbunden sowie in Deutschland gesetzlich limitiert und gesellschaftlich umstritten. Alternativ kann das abgetrennte CO₂ auch als Rohstoff in der chemischen Industrie eingesetzt werden, sodass die Nachteile der geologischen Speicherung umgangen werden und gleichzeitig die chemische Industrie unabhängiger von fossilen Rohstoffen als Kohlenstoffquelle werden kann. Inhalt dieses Buches ist es, aus den in der Literatur zahlreich beschriebenen CO₂ Nutzungsreaktionen diejenigen zu identifizieren, die das Potential aufweisen, zur Reduktion von CO₂ Emissionen beizutragen sowie die Wirtschaftlichkeit der großtechnischen Umsetzung zu ermitteln. Der Fokus liegt dabei auf der chemischen Umsetzung von CO₂ zu organischen Produkten, durch die konventionell hergestellte Verbindungen substituiert werden können.

Autor:

Alexander Otto studierte an der Universität zu Köln Chemie mit Schwerpunkt Technische Chemie. Von 2011 bis 2014 beschäftigte er sich am Institut für Energie- und Klimaforschung – Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-3) im Forschungszentrum Jülich mit der Analyse und Bewertung von CO₂-Nutzungsreaktionen zur Synthese von Chemikalien. Der Inhalt dieses Buches wurde von der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen (RWTH Aachen) als Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Naturwissenschaften genehmigt.

Institut:

Die Forschungsaufgaben des Instituts für Energie- und Klimaforschung – Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-3) sind auf die Realisierung von Hoch- und Niedertemperaturbrennstoffzellen sowie von entsprechenden Stacks oder Systemen für stationäre oder mobile Anwendungen ausgerichtet. Ferner umfassen die verfahrenstechnischen und systemtechnischen Entwicklungen die Bereitstellung von Apparaten zur Brenngaserzeugung. Darüber hinaus zielt das IEK-3 auf die Bereitstellung von Anlagen zur großtechnischen Erzeugung von Wasserstoff mittels Elektrolyseuren mit Polymerelektrolytmembranen ab. Für eine tiefgehende Aufklärung von Strukturen und deren Wirkung sowie von energetischen Prozessketten werden die Arbeiten von physikalisch-chemischen Grundlagenuntersuchungen sowie systemanalytischen Studien der Energieverfahrenstechnik begleitet.