


Regenerativ erzeugter Wasserstoff – Perspektiven in chemischen Wertschöpfungsketten

Gabriela Rodrigues Niquini, Pia Münzer, Mahsa Ebrahim-Moghaddam, Lucas Warmuth, Karla Herrera Delgado, Stephan Pitter, Nicolaus Dahmen und Jörg Sauer*

DOI: 10.1002/cite.202300221

 This is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivs License, which permits use and distribution in any medium, provided the original work is properly cited, the use is non-commercial and no modifications or adaptations are made.

Wasserstoff wird zurzeit überwiegend aus Erdgas, Erdöl und Kohle hergestellt. Aktuell wird in der Forschung und der anwendungsnahen Entwicklung intensiv an neuen Verfahren für die Erzeugung und den Transport von regenerativ erzeugtem Wasserstoff gearbeitet. Für die chemische Industrie werden zudem neue Kohlenstoffquellen gesucht, wodurch sich die Wertschöpfungsketten auf dem Weg zur angestrebten Klimaneutralität drastisch verändern. Die vorliegende Arbeit zeigt, dass der Wasserstoffbedarf nur in den frühen Wertschöpfungsstufen erheblich zunehmen wird. Bei der Veredelung von Zwischenprodukten wird sich Bedarf nicht deutlich ändern, wenn davon ausgegangen wird, dass die heutigen Zwischenprodukte der industriellen organischen Industrie weitestgehend beibehalten werden. Für eine erfolgreiche Transformation der deutschen chemischen Industrie wäre es demnach von besonderer Bedeutung, eine optimale Balance zwischen dem Import regenerativ erzeugter Zwischenprodukte und der Bereitstellung von regenerativem Wasserstoff für die Veredelungsstufen zu den Endprodukten zu finden.

Schlagerwörter: Anwendungen von Wasserstoff in der chemischen Industrie, Energieeffizienz, Transport, Wasserstoff, Wasserstoff-Speicherung, Wertschöpfungsketten

Eingegangen: 10. November 2023; *revidiert:* 20. Dezember 2023; *akzeptiert:* 21. Dezember 2023





Regeneratively Produced Hydrogen – Perspectives in Chemical Value Chains

Today, hydrogen is mainly produced from natural gas, crude oil and coal. Both in research and in application-oriented development, intensive work is being carried out on new processes for the production and transportation of regeneratively produced hydrogen. For the chemical industry, the value chains will change drastically on the way to the desired climate neutrality. However, this study shows that the demand for hydrogen will only increase considerably in the early stages of the value chain in the future chemical industry. Hydrogen demand will not change significantly in the refinement of intermediate products, assuming that the current intermediate products of the industrial organic industry are largely retained. For a successful transformation of the German chemical industry, it would be therefore particularly important to find an optimal balance between the import of regeneratively produced intermediates and the supply of renewable hydrogen for the refinement stages leading to the final products.

Keywords: Applications of hydrogen in the chemical industry, Energy efficiency, Hydrogen, Hydrogen storage, Transportation, Value chains

1 Einleitung

Das weltweite Wirtschafts- und Bevölkerungswachstum sind die Hauptursachen für den stetig steigenden Weltenergiebedarf. Dieser wird in allen Sektoren des globalen Energiesystems nach wie vor größtenteils durch fossile Energieträger gedeckt. Daraus ergeben sich die bekannten Konsequenzen:

¹Gabriela Rodrigues Niquini, ¹Pia Münzer, ¹Mahsa Ebrahim-Moghaddam, ¹Dr. Lucas Warmuth  <https://orcid.org/0000-0002-2234-028X>, ¹Dr. Karla Herrera Delgado  <https://orcid.org/0000-0003-1889-3719>, ¹Dr. Stephan Pitter, ¹Prof. Dr. Nicolaus Dahmen  <https://orcid.org/0000-0002-5877-4776>, ¹Prof. Dr.-Ing. Jörg Sauer  <http://orcid.org/0000-0003-3133-4110> (j.sauer@kit.edu)
¹Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Institut für Katalysatorforschung und -technologie (IKFT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Deutschland.

- der rasche Verbrauch konventioneller fossiler Ressourcen,
- die steigenden Treibhausgas-Emissionen und
- den daraus resultierenden Beitrag an der globalen Erderwärmung.

In Klimaabkommen haben sich 195 Staaten der Erde zusammen mit der Europäischen Union ambitionierte Ziele gesetzt, um ihren Beitrag zur Reduktion von Treibhausgasemissionen durch einen Umstieg auf erneuerbare Energie (Sonne, Wind, Wasser, Geothermie, Biomasse) zu reduzieren [1]. In den letzten Jahrzehnten sind die Kosten für erneuerbare Energien durch die fortschreitende Entwicklung und Implementierung von Sonnen- und Windenergie drastisch gesunken. Nach IRENA hat sich der Mittelwert der Investitionskosten von Photovoltaik-Anlagen seit 2012 um 70 % und für Onshore-Wind um 38 % reduziert. Durch die zunehmende Massenproduktion von großskaligen Batterien zur Energiespeicherung sowie für Elektrolyseure zur Erzeugung von erneuerbarem Wasserstoff können auch hier ähnliche Effekte erwartet werden [2].

Wasserstoff aus erneuerbaren Energiequellen ist ein Energieträger mit einem breiten Anwendungsspektrum und der Möglichkeit der Speicherung über lange Zeiträume. Seine Verwendung beim Umbau des Energiesystems hin zur Klimaneutralität ist Gegenstand einer Vielzahl von Studien und wissenschaftlichen Arbeiten zu technologischen, ökonomischen und ökologischen Aspekten der verschiedenen Möglichkeiten seiner Anwendung, Herstellung sowie Transport- und Lagerwege. Für das zukünftige Energiesystem würde sich ein massiver Mehrverbrauch und eine deutliche Verschiebung des weltweiten Wasserstoffbedarfs von derzeit 40 % in der chemischen Industrie und 33 % in Erdölraffinerien ergeben. Parallel dazu ist ein Wandel der Rohstoffbasis für die Wasserstoffherzeugung erforderlich; von derzeit weltweit produzierten 95 Mt entstehen 49 % aus Erdgas, 29 % aus Erdöl und 18 % aus Kohle. Elektrolyseverfahren mit derzeit 0,1 % an der Erzeugung müssen zukünftig in enormem Umfang ausgebaut werden [3]. Auch die Erzeugung von Wasserstoff durch thermische Verfahren wie der Methanpyrolyse und Vergasung organischer Stoffe kann zur Ergänzung des weltweiten Wasserstoffbedarfs beitragen. Es ist absehbar, dass die gegenwärtig bereits großen Anstrengungen zur Entwicklung in diesen Technologiebereichen in den nächsten Jahren noch deutlich intensiviert werden müssen. Nach dem Szenario „Net-Zero-Emissions“ der IEA wird der weltweite gegenüber heute etwa vervierfachte Wasserstoffbedarf im Jahr 2050 etwa 61 Mt für den Straßenverkehr, 75 Mt für die Stromerzeugung, 116 Mt für den Flug- und Schiffsverkehr, 48 Mt für die Eisen- und Stahlindustrie, 61 Mt für die chemische Industrie, 6 Mt für Raffinerien und 21 Mt für sonstige industrielle Anwendungen betragen [4].

Für die chemische Industrie in Deutschland werden sich sowohl bei der Rohstoff- als auch bei der Energieversorgung massive Veränderungen ergeben. Dabei wird Wasserstoff nicht nur für die stoffliche Umwandlung in den Wert-

schöpfungsketten der Chemie, sondern auch als Energieträger eine wichtige Rolle spielen [5]. Wasserstoff kann zwar als Energieträger auch für den großen Wärmebedarf der chemischen Industrie eingesetzt werden, konkurriert hier aber mit der direkten und in der Regel effizienteren Nutzung von elektrischer Energie. Dieser Beitrag beschäftigt sich daher vorrangig mit der Frage nach dem zukünftigen Wasserstoffbedarf für die stofflichen Umwandlungsprozesse in der Chemie. Auf Basis der aktuellen Herstellungsverfahren und Hauptanwendungen von Wasserstoff in der chemischen Industrie werden Entwicklungsmöglichkeiten, deren Vor- und Nachteile, und die damit verbundenen Herausforderungen dargestellt und diskutiert. Im Weiteren werden die Potenziale von Zwischenprodukten für die Übertragung und den Transport von klimafreundlichem Wasserstoff sowie von zukünftigen, wasserstoffbasierten Wertschöpfungsketten in der chemischen Industrie beschrieben und die wesentlichen anwendungstechnischen und wirtschaftlichen Herausforderungen zusammengefasst. Eine exemplarische Einordnung des zukünftigen Wasserstoffbedarfs für die Herstellung industrieller, organischer Produkte in verschiedenen Prozesskonstellationen schließt den Beitrag ab.

2 Herstellungsverfahren für Wasserstoff in der chemischen Industrie

In industriellem Maßstab kann Wasserstoff aus verschiedenen Rohstoffen durch thermo- und elektrochemische sowie katalytische Verfahren hergestellt werden [6]. In thermochemischen Verfahren wird der Wasserstoff unter Wärmeeinwirkung in chemischen Reaktionen aus der molekularen Struktur organischer Materialien wie fossile Brennstoffe [7,8] oder Biomasse [9] freigesetzt. Die elektrochemische Gewinnung erfolgt über die Spaltung von Wasser unter Verwendung von elektrischem Strom, wobei neben Wasserstoff auch Sauerstoff freigesetzt wird [10].

2.1 Wasserstoff aus fossilen Rohstoffen

Weltweit wird Wasserstoff heutzutage hauptsächlich mittels etablierter Technologien aus fossilen Brennstoffen hergestellt. Die Produktionskosten der Verfahren, wie beispielsweise der Kohlenwasserstoffreformierung und Pyrolyse, hängen dabei hauptsächlich vom Preis des Brennstoffs ab [11]. Die gängigsten kommerziellen Technologien zur Wasserstoffgewinnung sind die Dampfreformierung, die partielle Oxidation, die autotherme Reformierung und die Trockenreformierung von Erdgas (d.h. Methan, CH₄), der derzeit wichtigsten Wasserstoffquelle [3, 12].

2.1.1 Reformierungs- und Oxidationsreaktionen

Dampfreformierung

Das bedeutendste und ausgereifteste großtechnische Verfahren zur Erzeugung von Wasserstoff ist die Dampfreformie-

nung (engl. *steam reforming*, SR) von Methan (Gl. (1)) unter Zugabe von Heißdampf (700–1000 °C) [13]. Etwa 48 % der derzeitigen Wasserstoffproduktion basiert auf diesem endothermen Prozess [14]. Die Reaktion findet bei Drücken zwischen 3 und 25 bar in Gegenwart eines metallbasierten Katalysators statt, wobei Wasserstoff und Kohlenmonoxid im Verhältnis 3:1 (H₂ zu CO) sowie eine vergleichsweise geringe Menge an Kohlendioxid entstehen. Die Effizienz des Prozesses wird stark durch die Deaktivierung des Katalysators durch Kohlenstoffablagerungen beeinträchtigt [15]. Das erzeugte Kohlenmonoxid wird wie auch bei den folgenden Verfahren mit Hilfe von Wasserdampf in der sogenannten Wassergas-Shift-Reaktion (WGS) (Gl. (2)) an einem heterogenen Katalysator in Kohlenstoffdioxid (CO₂) und Wasserstoff umgewandelt, um die Wasserstoffausbeute weiter zu erhöhen.

Dampfreformierung



Wassergas-Shift-Reaktion

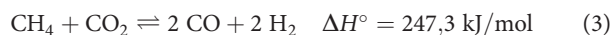


Der Wasserstoff kann durch eine Druckwechseladsorption abgetrennt werden. Dabei werden CO₂ und andere Verunreinigungen aus dem Produktgasstrom entfernt, bis Wasserstoff mit einer hohen Reinheit von bis zu 99,99+% zurückbleibt. Verfahren mit mehreren Festbetten sind in der Lage, hohe Durchsätze (265 000 Nm³h⁻¹) und Ausbeuten von mehr als 90 % zu erzielen [16]. Das Reformierungsverfahren kann auch zur Erzeugung von Wasserstoff aus anderen organischen Grundstoffen wie Alkoholen (z. B. Methanol, Ethanol, *n*-Propanol) [17–19] und Propan [20] eingesetzt werden.

Trockenreformierung

Die Trockenreformierung (engl. *dry reforming*, DR) von Methan (Gl. (3)) wurde als alternatives Verfahren für das SR zur industriellen Reife entwickelt, da bei dieser Reaktion Synthesegaszusammensetzungen mit niedrigeren H₂/CO Verhältnissen resultieren, was u.a. für die Herstellung von Aldehyden, Dimethylether oder Essigsäure vorteilhaft ist. Zudem bietet dieser Prozess die Möglichkeit, CO₂ als Reformierungsmittel zu verwenden [13]. Die Temperaturen von > 800 °C bei vergleichsweise hohen Drücken von 20–40 bar sind technisch anspruchsvoll und erfordern einen erhöhten Energieaufwand. Die Lebensdauer und Aktivität des Katalysators kann aufgrund von Koksbildung beeinträchtigt werden [21].

Trockenreformierung

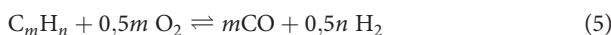
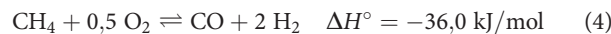


Partielle Oxidation

Die katalytische partielle Oxidation (engl. *catalytic partial oxidation*, CPOX) von Methan (Gl. (4)) ist eine Alternative zu den endothermen Reformierungsverfahren für die Herstellung von Synthesegas in einer exothermen Reaktion

[22], bei der Sauerstoff als Reformierungsmittel dient. Im Vergleich zur Dampfreformierung kann die CPOX mit einer Kostenreduzierung von bis zu 30 % betrieben werden [23].

Partielle Oxidation von Methan und höheren Kohlenwasserstoffen



Die Reaktionen laufen an Katalysatoren auf Übergangsmetallbasis bei Temperaturen zwischen 800 und 1000 °C ab, wobei vergleichsweise kleine Reaktoren verwendet werden, um hohe CH₄-Umsätze bei kurzen Kontaktzeiten zu erzielen. Das CPOX-Produkt enthält H₂ und CO in einem Verhältnis von 2, was sich gut für wichtige nachgeschaltete Prozesse wie z. B. die Methanolsynthese eignet [24]. Die Selektivität hängt, wie in Gl. (5) gezeigt, vom Mischverhältnis der Einsatzstoffe ab. Im Vergleich zur SR wird bei diesem Verfahren stöchiometrisch weniger Wasserstoff pro Formeleinheit des Einsatzbrennstoffs erzeugt, was einen Nachteil darstellt, wenn das Zielprodukt des Prozesses Wasserstoff ist. Trotz des einfacheren Betriebs, des geringeren Energieverbrauchs und des flexiblen Einsatzes verschiedener Rohstoffe stößt der Prozess bei einer großtechnischen Produktion an seine Grenzen, da die stark exotherme Reaktion durch rasche Versinterung zu einer deutlichen Mindering der Katalysatoraktivität führt [25].

Die derzeit weltweit wichtigsten nicht katalysierten POX-Verfahren zur Gewinnung von Wasserstoff sind Vergasungsverfahren von Kohlenwasserstoff-Schnitten, wie das Texaco-Vergasungsverfahren und das Shell-Verfahren [26].

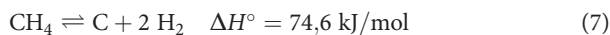
Autotherme Reformierung

Die autotherme Reformierung (engl. *autothermal reforming*, ATR) kombiniert die exotherme CPOX (Gl. (4) bzw. (5)) mit der endothermen SR (Gl. (1)) in einem Reaktor. Dabei liefert die Oxidationsreaktion die für die Reformierung leichter Kohlenwasserstoffe erforderliche Energiemenge [27]. Die Gesamtreaktion hängt vom eingesetzten Katalysator ab, wobei aufgrund ihrer geringen Kosten häufig Übergangsmetalle (insbesondere Nickel) [28] verwendet werden. Die ATR ist ein effizientes Verfahren, das jedoch eine geringere Wasserstoffausbeute aufweist als die Dampfreformierung [29].

2.1.2 Pyrolyse

Bei der nicht katalysierten Pyrolyse werden leichte Kohlenwasserstoffe durch thermische Zersetzung (Gl. (6)) in Wasserstoff und festen Kohlenstoff umgewandelt [11]. Seit einigen Jahren wird die Methanpyrolyse als vielversprechende Alternative zur Dampfreformierung entwickelt (Gl. (7)), da beide Verfahren eine ähnliche Reaktionsenthalpie für die Wasserstoffherzeugung aufweisen. Dabei hängen Prozessselektivität und Umsatz der Pyrolyse stark von der Zusammensetzung des Einsatzstoffes und der Art des Katalysators ab [30].

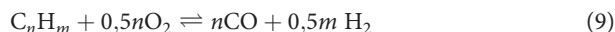
Pyrolyse



2.1.3 Feststoffvergasung

Die Feststoffvergasung (*gasification*) ist ein etablierter und weltweit eingesetzter Prozess, in dem feste Energieträger unter Zusatz eines gasförmigen Vergasungsmittels zu Synthesegas umgesetzt werden. Je nach Art des Einsatzstoffes und der Prozessbedingungen kommen Festbett-, Wirbelschicht- und Flugstromvergaser zum Einsatz. In autothermen Verfahren mit Luft oder Sauerstoff erfolgt dabei eine partielle Oxidation des Einsatzstoffes bei hohen Temperaturen (800–1600 °C) und Drücken (1–80 bar) zu Synthesegas. Für die Umsetzung von Kohle wird zudem Wasserdampf als Vergasungsmittel benötigt (s. nicht-stöchiometrische Gl. (8)). Derzeit werden weltweit etwa 18 % des Wasserstoffs durch Kohlevergasung gewonnen [30, 31]. Auch Lignozellulose-Biomasse kann auf diese Weise für die Herstellung von Synthesegas und Wasserstoff eingesetzt werden.

Autotherme Feststoffvergasung

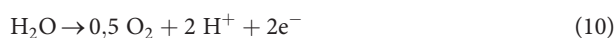


2.2 Wasserstoff aus erneuerbaren Rohstoffen

Wasserstoff aus Wasser

Unter Zuführung von Energie kann Wasser in Wasserstoff und Sauerstoff aufgespalten werden. Mögliche Energiequellen können elektrischer, thermischer oder (bio-)photonsicher Natur sein [32]. Das einfachste und bekannteste Verfahren ist die Elektrolyse, bei der Wasser mit Hilfe elektrischen Stroms an Anode und Kathode der Zelle gespalten wird (Gl. (10) und (11)) [33]. Verschiedene Technologien, welche sich anhand der verwendeten Elektrolyte klassifizieren lassen, sind derzeit am Markt etabliert. So gibt es neben der alkalischen (engl. *alkaline water electrolysis*, AWE) [34] auch Polymerelektrolyt- (engl. *proton exchange membrane*, PEM) [35], Festoxid- (engl. *solid oxide electrolysis cells*, SOEC) [36] und Anionenaustauschmembran-Elektrolysezellen (engl. *anion exchange membrane*, AEM) [37].

Anode



Kathode



Die thermochemische Wasserspaltung oder Thermolyse nutzt die Abwärme von nuklearen oder chemischen Reaktionen [38, 39]. Der Zersetzungsprozess benötigt Temperaturen oberhalb von 2000 °C, um eine Spaltung in die Elemente zu gewährleisten. Dies erfordert robuste Materialien, die den hohen Temperaturen standhalten können, sowie eine Prozessgestaltung, die eine Entstehung explosionsfähiger Mischungen minimiert [40].

Die Photoelektrolyse oder photoelektrochemische (engl. *photoelectrochemical*, PEC) Wasserspaltung nutzt Sonnenenergie und Photokatalysatoren, um Wasser in seine Elemente zu zerlegen [41]. Dabei wird das Sonnenlicht durch halbleitende, photoelektrochemische Materialien absorbiert, um Wassermoleküle direkt zu spalten [42]. Dieser Prozess ist jedoch durch die Rekombination von Ladungsträgern, das hohe Überpotenzial und die langsame Reaktionskinetik in seiner Effizienz begrenzt [10].

Die Biophotolyse (engl. *biophotolysis*) ermöglicht die Erzeugung von Wasserstoff aus Wasser durch Mikroorganismen wie Algen oder Cyanobakterien mit Hilfe von Sonnenenergie. Auch diese Technologie befindet sich noch im Entwicklungsstadium und ist aufgrund ihrer geringen Effizienz nur begrenzt einsetzbar [43].

Wasserstoffherzeugung aus Biomasse

Wasserstoff kann auch aus biogenen Ausgangsstoffen (z. B. Waldrestholz, Mikroalgen) oder tierischen Nebenprodukten unter Verwendung bestehender Technologien hergestellt werden. Die Verfahren können biologisch (z. B. Biophotolyse, biologische Wasser-Gas-Verschiebungsreaktion, Fermentation) und thermochemisch (z. B. Pyrolyse, hydrothermale Verflüssigung (katalytisch) und Vergasung) sein [44]. Thermochemische Prozesse sind dabei schneller und liefern eine höhere Wasserstoffausbeute als biologische Prozesse. Die Vergasung und Pyrolyse von lignozellulöser Biomasse sind Stand der Technik, dienen derzeit jedoch nicht zur Wasserstoffherstellung [9]. Die Pyrolyse ist Bestandteil praktisch aller thermochemischen Umwandlungstechnologien, und kann bei hoher Verweilzeit und Temperatur direkt Wasserstoff liefern (vgl. Abschn. 2.1.2).

Die in Abschn. 2.1.1 aufgeführten Verfahren zur Erdgasumwandlung lassen sich auch auf synthetisch erzeugtes Methan übertragen. So stehen Bio-Methan-Dampfreformierung zur Kommerzialisierung bereit [45]. Aufgrund der vorgelagerten Prozesse zur Herstellung der Vorprodukte sind der Skalierung dieser Verfahren gegenüber der Verwendung fossiler Ausgangsstoffe allerdings Grenzen gesetzt.

2.3 Wasserstoff als Nebenprodukt

Zusätzlich zur gezielten Herstellung wird Wasserstoff auch als Nebenprodukt bei der Herstellung anderer Produkte gewonnen. Auf diese Weise werden derzeit rund 16 % des globalen Bedarfs gedeckt [3]. Neben der etablierten Gewinnung von Wasserstoff aus der Reformierung von Naphtha

oder der Produktion von Ethen gibt es weitere Prozesse, deren Wasserstoffpotential bisher nicht oder nur teilweise ausgeschöpft wird.

Mineralölraffinierung

In der Mineralölraffinerie ist die Wasserstoffherzeugung und -nutzung bereits seit Langem im Fokus von Optimierungsvorhaben [46]. Im Allgemeinen geht es dabei um den standortinternen Einsatz des bei der katalytischen Reformierung von Benzin freigesetzten Wasserstoffs für das Hydrotreating und das Hydrocracken. Die beiden Verfahren dienen zur Entschwefelung bzw. zur Aufspaltung schwersiedender Komponenten in wertvollere, niedermolekulare Produkte und sind wichtiger Bestandteil der Wertschöpfung in der Mineralölindustrie [47]. Einige Reformer sind inzwischen sogar für eine maximierte Wasserstofffreisetzung ausgelegt, wobei Abstriche bei der Qualität des Reformats in Kauf genommen werden. Auch wenn die Mineralölraffinerien selbst nicht zur chemischen Industrie zählen, so liefern sie doch die wichtigsten Ausgangsstoffe für die industrielle organische Chemie. Wie weiter unten diskutiert wird, müssen diese in Zukunft aus nicht-fossilen, erneuerbaren Rohstoffen bereitgestellt werden.

Ethen, Propen

Zur Herstellung von leichten Olefinen als bedeutende Zwischenprodukte der chemischen Industrie mittels Steamcracken wird häufig die in der Raffinerie gewonnene Leichtbenzinfraction (Naphtha) verwendet. Beim Aufbrechen der Kohlenwasserstoffketten unter Zugabe von Wasserdampf werden neben den Olefinen auch Methan und Wasserstoff freigesetzt [48]. Das Produktgemisch wird in mehreren Rektifikationsschritten aufgetrennt, bis schließlich Wasserstoff von Methan separiert werden kann. Bei sehr kurzen Verweilzeiten entstehen circa 0,03 kg Wasserstoff pro kg Ethen. Bei einer für das Jahr 2024 prognostizierten globalen Produktion von 283 Mt Ethen ergibt sich somit eine Wasserstoffproduktionskapazität von rund 9 Mt. Der Wasserstoffstrom wird direkt innerhalb der Produktionsanlage für Hydrierungsreaktionen verwendet und etwaige überschüssige Mengen werden als Brennstoff eingesetzt.

Formaldehyd

Formaldehyd, ein wichtiges Zwischenprodukt der chemischen Industrie, wird großtechnisch unter anderem durch die silberkatalysierte oxidative Dehydrierung von Methanol gewonnen [49,50]. Während der Synthese wird Wasserstoff freigesetzt, welcher nach der abschließenden Absorption des Formaldehyds in Wasser gemeinsam mit anderen Gasen als Kopfprodukt der Kolonne abgezogen wird. Eine Nutzung des darin enthaltenen Wasserstoffs ist bislang nicht rentabel, da durch den Einsatz von Luftsauerstoff als Oxidationsmittel auch große Mengen an Stickstoff im Gasgemisch enthalten sind und eine Abtrennung des Wasserstoffs somit sehr aufwändig ist. Das Abgas dient deshalb lediglich zur Erzeugung von Prozessdampf für umliegende Produktionsverfahren. Im Jahr 2022 wurden weltweit etwa 46,5 Mt

Formaldehyd produziert [51], was mit einer potenziellen Freisetzung von 1,2 Mt Wasserstoff einhergeht. Für das Jahr 2030 wird mit einem gesteigerten Formaldehydbedarf von über 70 Mt und somit auch einer entsprechend gesteigerten Wasserstofffreisetzung gerechnet.

Chloralkali-Elektrolyse

Bei der Chloralkali-Elektrolyse werden Chlor und Natriumhydroxid aus Kochsalzlösungen gewonnen [52]. Mit jeder Tonne Chlor werden gleichzeitig 28,5 kg Wasserstoff freigesetzt. Bei einer jährlich produzierten Menge von 75 Mt Chlor [53] entstehen demnach 2,1 Mt Wasserstoff. Obwohl in der Chloralkali-Elektrolyse hergestellter Wasserstoff sehr rein ist (99,9 %) [53] und geringere Treibhausgasemissionen verursacht als der über die Dampfreformierung erzeugte Wasserstoff, wird diese Quelle nicht vollständig genutzt. Im Jahr 2022 wurden in Europa etwa 13,5 % des Chloralkali-Wasserstoffs keiner weiteren Verwendung zugeführt und rund 38 % wurden zur Gewinnung von Dampf und Prozesswärme verbrannt. Die verbleibenden 48,5 % kamen unter anderem in der Ammoniak- und Salzsäuresynthese sowie beim Hydrocracken in Raffinerien zum Einsatz [52,54].

Sonstige

Neben den hier aufgeführten großtechnischen Verfahren gibt es noch weitere Prozesse, bei denen Wasserstoff als Nebenprodukt anfällt. So enthält beispielsweise Hochofengas aus der Stahlherstellung zwischen 40 und 65 % Wasserstoff [55]. Im Jahr 2020 wurden so 3–5 Mt Wasserstoff erzeugt. Ebenso wird bei der Synthese von Chemikalien mit geringeren Produktionskapazitäten, wie beispielsweise Natriummethanolat [56] oder bei der Herstellung und Zersetzung von Silanen für Beschichtungsvorgänge in der Halbleiterindustrie Wasserstoff freigesetzt [57]. Auch bei der Aufbereitung von Aluminiumabfällen freigesetzter Wasserstoff könnte zukünftig genutzt werden [58]. Darüber hinaus wird die Verwendung neuer Einsatzstoffe in bekannten Verfahren erkundet, z. B. die Reformierung von Glycerin, welches als Nebenprodukt bei der Biodieselproduktion anfällt [59]. Anhand der genannten Beispiele wird deutlich, dass derzeit ein noch nicht ausgeschöpftes Wasserstoffpotential in der chemischen Industrie besteht. Wasserstoffreiche Nebenprodukte industrieller Prozesse könnten zukünftig eine sinnvolle Ergänzung zur gezielten Gewinnung von Wasserstoff darstellen.

3 Anwendungen von Wasserstoff in der chemischen Industrie

Wasserstoff lässt sich in der chemischen Industrie folgenden Hauptverwendungszwecken zuordnen:

- 1) Hydrierprozesse, in denen der Wasserstoff mittels Addition in das Produkt eingebaut wird,
- 2) Reduktionsprozesse, bei denen aus einem Reaktand Atome entfernt werden, in der Regel unter Freisetzung

einer Heteroatomwasserstoffverbindung wie Wasser, Ammoniak oder Schwefelwasserstoff.

In Deutschland werden pro Jahr rund 1,6 Mt Wasserstoff (entsprechen 57 TWh) verbraucht [60]. Die deutsche Prozess-Industrie nutzt davon die größten Anteile für die Ölraffination (640 kt), die Ammoniaksynthese (534 kt) und die Methanolsynthese (334 kt). Geringere Mengen Wasserstoff werden zur Herstellung von Dimethylether (DME) und erneuerbaren Kraftstoffen sowie für Reduktions- und Hydrierprozesse in der Fein- und Spezialchemie eingesetzt, z. B. zur Herstellung von Fettalkoholen und Zuckerderivaten. Die meisten dieser Prozesse benötigen Wasserstoff in hoher Reinheit und bei einem erhöhten Wasserstoffpartialdruck [61].

Die Ammoniaksynthese ist derzeit der mengenmäßig größte Wasserstoff-verbrauchende Einzelprozess, mit 1965 Nm³ Wasserstoff und 668 Nm³ Stickstoff pro Tonne produzierten Ammoniaks. Deren Umsetzung erfolgt an einem Katalysator bei 15–25 MPa und 470–530 °C. Um eine Anreicherung der Inertgase im Synthesereaktor zu verhindern, muss ein Teil des Kreislaufgases kontinuierlich aus dem Kreislauf entfernt werden, was zusätzliche Wasserstoff-Rückgewinnungsanlagen erfordert.

Die großtechnisch etablierte Methanolsynthese basiert heute größtenteils auf der Bereitstellung von Wasserstoff mittels Dampfreformierung. Mittlerweile existieren jedoch diverse modifizierte Prozesse, in denen sowohl im Pilot- und Demo- als auch bereits im Produktionsmaßstab erneuerbarer Wasserstoff eingesetzt wird. Gleichzeitig wird verstärkt die Nutzung von Synthesegas mit erhöhtem CO₂-Gehalt vorangetrieben, um die Klimabilanz der Methanolherstellung durch die gleichzeitige Nutzung von CO₂ in CCU-Prozessen (*carbon capture and utilization*) zu verbessern. Aus Gründen der Reaktionsstöchiometrie ergibt sich für die CO₂-Hydrierung ein steigender Wasserstoffbedarf durch die Bildung von Reaktionswasser. Die dafür benötig-

ten Katalysatoren müssen daher in Richtung einer größeren Wasserverträglichkeit weiter entwickelt werden [62, 63].

In der Erdölraffination besteht die hauptsächliche Anwendung von Wasserstoff in der Veredelung von Kohlenwasserstoffströmen durch a) die Entfernung unerwünschter Komponenten (bes. Schwefel-, Halogen-, Sauerstoff- und Stickstoffhaltige Verbindungen), b) die Sättigung, Isomerisierung, Ringöffnung von C-C-Mehrfachbindungen und c) das Cracken von schwersiedenden Fraktionen. Dabei werden in den als Hydroprocessing zusammengefassten Verfahrensschritten einerseits leichtere Kohlenwasserstofffraktionen mittels hydrierender Spaltung erzeugt und andererseits der Wasserstoffgehalt der Rohölfraktionen erhöht [61].

Für die chemischen Produkte, die bislang aus Intermediaten der Erdölraffination produziert wurden, besteht in Zukunft ein veränderter Bedarf an Wasserstoff [64–66]. Hauptursache ist die Umstellung auf die regenerativen Kohlenstoffquellen CO₂ und Biomasse sowie im Kreislauf geführte Kohlenstoffträger des Chemical Recycling. Die bisherige und mögliche zukünftige Struktur der Chemieproduktion sind in Abb. 1 bzw. 2 in vereinfachter Form dargestellt. Bei der Herstellung und Nutzung von Biogas, fermentativ aus Kohlenhydraten erzeugten Alkoholen und wie bislang genutzten Fettsäuren ans Pflanzenöl wird sich der H₂-Bedarf kaum verändern. Ein signifikanter Mehrbedarf entsteht in Prozessketten, bei denen CO₂ oder Synthesegas aus regenerativen Quellen verwendet wird (s. Abschn. 5). Dies betrifft die Herstellung von synthetischem Methan (*substitute natural gas*, SNG), von synthetischen Kohlenwasserstoffen z. B. über die Fischer-Tropsch-Synthese und die von Methanol. Die Schnellypholyse von Lignozellulose (etwa C₆H₉H₄) führt zu flüssigen Zwischenprodukten, die unter Wasserstoffeinsatz weiter deoxygeniert werden müssen. Abfallkunststoff wird nach Vorbehandlung als Ausgangsstoff für Steamcracker verwendet.

Wasserstoff ist in den weiteren Veredelungsstufen der chemischen Industrie ferner bedeutsam für die Produktion

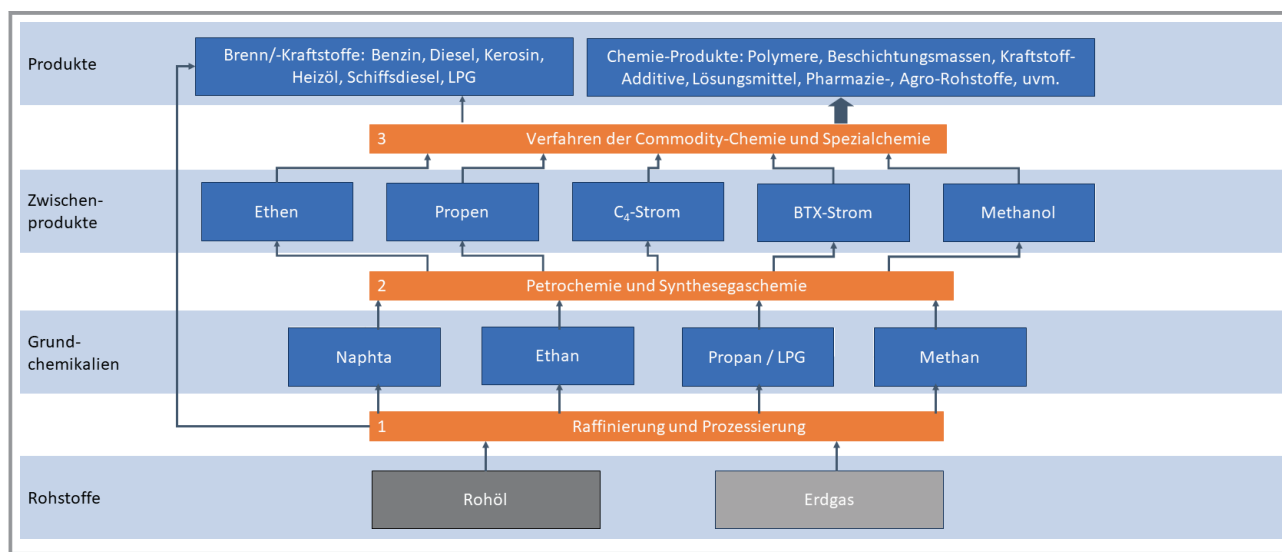


Abbildung 1. Wertschöpfungsketten der gegenwärtigen chemischen Industrie.

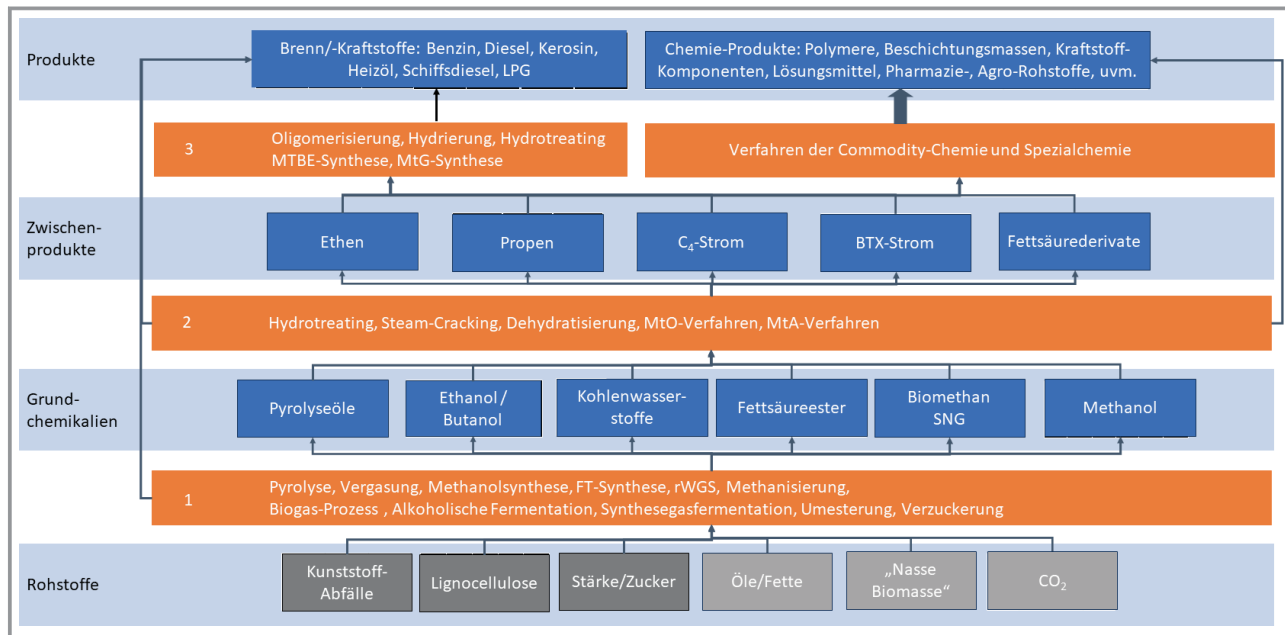


Abbildung 2. Mögliche Wertschöpfungsketten einer zukünftigen organisch-chemische Industrie.

von Butyraldehyd aus Propen (Oxo-Verfahren), von Butandiol sowie Tetrahydrofuran aus Maleinsäureanhydrid, von Hexamethyldiamin aus Adiponitril sowie von Cyclohexan aus Benzol. Bei der Herstellung von Polypropylen wird Wasserstoff verwendet, um das Molekulargewicht des Polymers einzustellen.

Im weiteren Sinn zählen zu der Gruppe der chemischen Prozesse mit hohem Wasserstoffbedarf auch wichtige metallurgische Verfahren, wie zum Beispiel die Reduktion von Eisenerz, bei der Wasserstoff als Reduktionsmittel einen Teil des Koks ersetzt, der im konventionellen Hochofenverfahren eingesetzt wird [67], die Herstellung von Nickel nach dem Sherritt-Gordon-Verfahren oder auch die für die Herstellung von Elektronikbauteilen außerordentlich bedeutende Reduktion von Siliziumtetrachlorid zu Silizium [68].

Auch die in Zukunft benötigten Kraftstoffe sind synthetisch herzustellen, basierend auf Methanol, Kohlenwasserstoffen und Methan aus erneuerbaren Kohlenstoffquellen, was zu einem entsprechend hohen Wasserstoffbedarf führen wird [69]. Dem aus einer stöchiometrischen Reaktion in Tab.1 ermittelten spezifischen Wasserstoffbedarf folgend werden für die Herstellung von 1 kg synthetischem Kohlenwasserstoff rund 0,44 kg Wasserstoff pro benötigt.

4 Chemische Komponenten für den Transport von regenerativ erzeugtem Wasserstoff

Wasserstoffträger können an Orten hergestellt werden, an denen Wasserstoff kostengünstig und in großen Mengen produziert werden kann. Sie können sicher und mit ver-

gleichsweise hoher Energiedichte transportiert und anderswo wieder zu Wasserstoff gespalten oder als chemisches Zwischenprodukt stofflich genutzt werden. Heute gehandelte, synthetisch hergestellte Komponenten sind Methanol und Ammoniak, die derzeit an Standorten hergestellt werden, an denen Wasserstoff aus Erdgas in großen Mengen kostengünstig verfügbar ist [70]. Diese und weitere mögliche Wasserstoffträger wurden hinsichtlich ihres Wasserstoffgehalts und der Energieeffizienz bei der Freisetzung des Wasserstoffs und der Schließung des Wasserstoffkreislaufs verglichen [71–74]. In Tab.1 sind einige wichtige Wasserstoffträger und Transportformen von Wasserstoff mit einigen ihrer Eigenschaften sowie spezifischem Wasserstoffbedarf bei deren Herstellung und Wasserstofffreisetzung bei deren Zersetzung aufgelistet.

In der Literatur werden verschiedene Kriterien für die Auswahl geeigneter Wasserstoffträger verwendet, darunter befinden sich:

- Gehalt an freisetzbarem Wasserstoff in der Komponente,
- Wärmemenge die notwendig ist den Wasserstoff freizusetzen,
- Siedepunkt der Komponente in hydrierter Form,
- Temperatur der Freisetzung,
- Effizienz der Kette von Wasserstoff zu Wasserstoff,
- Kosten für Speicherung und Transport und
- Sicherheitsaspekte für die Handhabung der Komponenten.

Die Wasserstoffträger unterscheiden sich hinsichtlich ihrer Leistungskriterien ganz erheblich. Es ist aber davon auszugehen, dass mehrere Lösungen parallel eingeführt werden, da sehr unterschiedliche Anwendungsprofile existieren und es zu einer Überlappung von stofflicher Nutzung

Tabelle 1. Vergleich der Eigenschaften und der derzeitigen Produktionsmengen unterschiedlicher synthetisch erzeugter Grundchemikalien/Wasserstoffträger.

Grundchemikalie / Wasserstoffspeicher	Spez. Wasserstoff-Verbrauch nach Stöchiometrie [t t ⁻¹]	Rohstoff neben H ₂	Dichte [kg m ⁻³]	Siedepunkt [°C]	Freisetzbarer Wasserstoff [t t ⁻¹]	Produkt bei H ₂ -Freisetzung	Derzeitige Produktionsmenge [Mt a ⁻¹]
Methanol (flüssig)	0,189	CO ₂	791 [75]	64,7 [75]	0,126 (CO), 0,189 (CO ₂)	CO, CO ₂	100 [76]
Dimethylether (flüssig)	0,263	CO ₂	668 [75]	-24,9 [75]	0,263	CO ₂	9 [77]
Synthetische Kohlenwasserstoffe (flüssig oder fest)	0,437 (gerechnet als C ₁₄ H ₃₀)	CO ₂	770–860 [75]	150–320 [75]	0,010	Ethen, C ₂ ⁼ +, Propen, C ₃ ⁼ +, Buten, C ₄ ⁼	
H12-MBT* (flüssig)	0,062	DBT	876 [78]	265 [78]	0,062	MBT	
l-SNG (flüssig)	0,503	CO ₂	0,47 [79]	-135 bis -168 [79]	0,251 (C), 0,503 (CO ₂)	C, CO ₂	401,5 [80]
Ammoniak (flüssig)	0,178	N ₂	683 [73]	-34 [73]	0,178	N ₂	185 [76]
Wasserstoffperoxid (flüssig)	0,059	O ₂	1450 [81]	150 [81]	0	-	6,3 [82]
H ₂ (gasförmig, 700 bar, 25 °C)	1,00	-	39,3[83]	-	1,00	-	
H ₂ (flüssig, 2 bar)	1,00	-	67,7 [83]	-253 [83]	1,00	-	

Umrechnungsfaktoren: 1 Mt = 1,11 · 10¹⁰ Nm³, 1 Mt = 33,3 TWh, 1 Nm³ = 3 · 10⁻⁹ TWh, 1 Nm³ = 8,99 · 10⁻¹¹ Mt, 1 TWh = 0,03 Mt, 1 TWh = 3,34 · 10⁸ Nm³. *MBT: Monobenzyltoluol

und Wasserstoff-Transport kommen kann. Folgende stoffliche Anwendungen der Zwischenprodukte bzw. Speicherkomponenten sind heute schon Stand der Technik:

- Düngemittelherstellung,
- Chemierohstoff,
- Kraftstoff-Komponenten (Methanol in Biodiesel und MTBE),
- Direkte Anwendungen beispielsweise als Lösungsmittel, Kältemittel, Bleich- und Reinigungsmittel, uvm.

Auf dem Weg hin zu einer klimaneutralen, zumindest einer treibhausgasneutralen Wirtschaft wird der Bedarf an regenerativ erzeugtem Wasserstoff zunehmen (vgl. auch Abschn. 3). Gegenüber heute können zusätzlich weitere Anwendungen von Wasserstoff etabliert werden. Dazu gehören:

- Hochtemperaturwärme in der Chemie-, Glas-, Keramikindustrie und Metallurgie
- Reduktionsmittel zur
 - Kreislaufschließung metallischer Wertstoffe
 - Herstellung und Veredlung von Kraftstoffkomponenten in der zukünftigen „grünen Raffinerie“

Es ist damit zu rechnen, dass der Bedarf an synthetisch erzeugten chemischen Zwischenprodukten in der chemischen Industrie trotz Erhöhung des Anteils von rezyklierten Chemieprodukten zunehmen wird, insbesondere dadurch, dass diese auch direkt als Brenn- und Kraftstoff verwendet (z. B. Wasserstoff, Ammoniak oder Methanol) oder zu anderen Kraftstoffkomponenten wie synthetischem Kerosin weiter verarbeitet werden.

5 Entwicklung und Wasserstoffbedarf von Wertschöpfungsketten der chemischen Industrie

Die Wertschöpfungsketten der heutigen industriellen organischen Chemie bauen weitgehend auf fossilen Ausgangsstoffen in Form von Erdgas oder von in Erdölraffinerien erzeugten Kohlenwasserstofffraktionen auf. In dem vereinfachten Schema der Abb. 1 stellen Methan, kurzkettige Kohlenwasserstoffe und Naphta die Hauptausgangsstoffe dar, die durch petrochemische Prozesse und über den Weg der Synthesegaschemie in Grundchemikalien wie Olefine, BTX-Aromaten und Methanol umgewandelt werden. Aus diesen und weiteren Stoffen entsteht in der Vielzahl von Prozessen der Basis- und Spezialchemie die große Produktvielfalt für die weiterverarbeitende Industrie in vielen Branchen. Brenn- und Kraftstoffe werden in den Prozessen der Erdölraffinerien direkt erzeugt. Kohle spielt in der Chemie heute nur noch eine untergeordnete Rolle, während nachwachsende Rohstoffe derzeit bereits rund ein Sechstel ihrer Rohstoffbasis ausmachen, wobei Fette und Öle, Stärke, Zucker und Zellstoff für chemische Spezialprodukte hierunter den größten Anteil haben [84]. Es kann angenommen werden, dass diese auch in Zukunft in etwa gleicher jährlicher Menge von knapp 3 Mt benötigt und hergestellt werden [5].

In der zukünftigen chemischen Industrie werden Chemie, Kreislaufwirtschaft, Bioökonomie und eine grüne CO₂- und

Wasserstoffwirtschaft verstärkt ineinandergreifen. Auch wenn in zunehmendem Maße neue Plattformchemikalien z. B. aus der Biotechnologie nutzbar werden, kann davon ausgegangen werden, dass die oben genannten Grundchemikalien als Ausgangsstoffe für die vielfältigen, etablierten Verarbeitungspfade noch lange Zeit notwendig sind. Daher gilt es, diese aus erneuerbaren Rohstoffen und Energieformen herzustellen. Ein solches, beispielhaftes Konzept ist in Abb. 2 gezeigt: Kohlenstoffquellen sind hier lignozellulose Biomasse, Kunststoffabfälle und CO₂. Kohlenhydrate und CO₂ entstehen ebenfalls aus der Fraktionierung bzw. der thermochemischen Umwandlung von Lignozellulose-Biomasse. Grüne Biomasse dient als Ausgangsstoff für die Erzeugung von Biogas als Methanquelle. Entsprechend komplex ist die Zahl der weiteren Veredlungsschritte und der Zwischenprodukte. Hier finden sich Kohlenwasserstoffe aus der Fischer-Tropsch-Synthese, Methanol aus Synthesegas, Methan aus Biogas und der Methanisierung von CO₂, Alkohole durch mikrobielle Synthese aus Zuckern, und Pyrolyseöle als Quelle für Aromaten oder zur Erzeugung von Synthesegas, das auch direkt aus lignozellulose Biomasse hergestellt werden kann. Altkunststoffe finden als Ausgangsstoff für das Steamcracking zur Erzeugung von Ethen und Propen Verwendung. Aus diesen Grundstoffen entstehen dann die chemischen Zwischenprodukte. Dazu eignen sich grundsätzlich verschiedene Wege; Olefine können zum Beispiel durch das MtO-Verfahren aus Methanol, durch Dehydratisierung von Alkoholen oder über das Steamcracking von Fischer-Tropsch-Produkten erhalten werden. Die Nutzung vorhandener Infrastruktur ist dabei von besonderer Bedeutung für die Wirtschaftlichkeit des Rohstoffwandels. Aromaten können ebenfalls aus Methanol erzeugt oder durch Deoxygenierung aus Pyrolyseölen gewonnen werden. Im Gegensatz zu dem Schema der Erdöl-basierten Struktur der Chemieindustrie werden auch die in Zukunft noch benötigten Kohlenwasserstoff-basierten Brennstoffe aus erneuerbaren Rohstoffen hergestellt. Die Herstellung der heute gebräuchlichen Kraftstoffe auf Basis von Methanol und Fischer-Tropsch-Produkten ist weit entwickelt oder bereits Stand der Technik.

Durch die Verwendung Wasserstoff-armer Ausgangsstoffe kann erwartet werden, dass über die bereits heute in der chemischen Industrie in Deutschland eingesetzte Menge an Wasserstoff von rund 1 Mt a⁻¹ hinaus ein signifikanter zusätzlicher Bedarf entsteht. Eine ausführliche Darstellung möglicher Szenarien einer zukünftigen Chemieindustrie inklusive ihrer Energieversorgung findet sich in dem Bericht „Chemistry4Climate“ von VCH und VDI zur Transformation der Chemie [5]. Das dort beschriebene Mengengerüst für die Produktionskapazitäten der wichtigsten Grundstoffe im Jahr 2045 wird hier verwendet, um den Rohstoff- und Wasserstoffbedarf zur Herstellung des mengenmäßig bedeutenden Methanols, von C₂-C₄-Olefinen und von BTX-Aromaten beispielhaft zu ermitteln, denen das in Abb. 2 gezeigte, vereinfachte Schema mit den dazugehörigen Faktoren zum spezifischen Wasserstoffbedarf für die verschiedenen Produktionspfade zugrunde liegt.

Vergleichend werden drei Fälle betrachtet (Szenario I–III in Tab. 2), die sich für das ausgewählte Mengengerüst durch die verwendete Kohlenstoffquelle und Basistechnologie unterscheiden. Szenario I legt die Verwendung von Lignozellulose-haltiger Biomasse über den Weg der Synthesegasherstellung zugrunde, wobei das als Nebenprodukt entstehende CO₂ ebenfalls für die Synthesen verwendet wird. Szenario II und III basieren ausschließlich auf CO₂ als Kohlenstoffquelle über den Weg der Methanol- bzw. Fischer-Tropsch-Synthese. Der größte, spezifisch Wasserstoffbedarf bei gleicher Kohlenstoffeinsatzmenge erscheint bei der Herstellung ungesättigter Olefine und Aromaten über den Weg der Fischer-Tropsch-Synthese, da die langkettigen Kohlenwasserstoffe hydrierend gespalten werden müssen, was die beim Cracking entstehende Wasserstoffmenge übersteigt. Demgegenüber ist die bereits verfügbare, kapitalintensive Anlagentechnik für diesen Prozess ein Vorteil. Bei der Verwendung von Biomasse wurde eine Prozesssimulation für den am KIT entwickelten bioliq-Prozess zugrunde gelegt [85]. Das bei der Synthesegaserzeugung in Szenario I entstehende und ebenfalls zur jeweiligen Synthese genutzte CO₂ ist in der Tabelle separat aufgeführt. Die Synergie von Biomasse und CO₂ ist durch den gegenüber dem CCU-Methanolfad um mehr als die Hälfte deutlich verringerten Wasserstoff-

Tabelle 2. Wasserstoff- und Ausgangsstoffeinsatz in kt a⁻¹ zur Herstellung wichtiger organisch-chemischer Zwischenprodukte bezogen auf den Verbrauch in Deutschland.

Produkt	Menge in 2045 [kt]	Szenario I			Szenario II		Szenario III	
		Bedarfe bei Biomasse mit CCU [kt a ⁻¹]			Bedarfe bei CCU [kt a ⁻¹]			
		H ₂	Biomasse	CO ₂	H ₂	CO ₂	H ₂	CO ₂
Methanol	1344	141	1014	1022	255	1848	255	1848
C ₂ , C ₃ -Olefine	7454	1706	24 534	8979	3727	23 427	4249	23 427
C ₄ -Olefine	1894	433	6234	2281	901	5953	1091	5953
Aromaten	2199	503	7238	2649	1100	6911	1188	6911
Summe	12.891	2784	39 946	14 932	5983	38 139	6783	38 139

einsatz klar erkennbar. Dem stehen ein Biomasse-Einsatz von gut 40 Mt lufttrockener Biomasse sowie die Schaffung einer zu deren Umwandlung notwendigen Infrastruktur und Logistik gegenüber. Diese Menge entspricht in ihrer Größenordnung dem jährlichen Aufkommen an biogenen Lignozellulose-Reststoffen plus der Menge an heute in Deutschland genutztem Energieholz.

Bereits durch diese einfache Betrachtung wird deutlich, dass ein zusätzlicher Wasserstoffbedarf in der ersten Verarbeitungsebene der erneuerbaren Rohstoffe zu den Grundstoffen entsteht, allen voran dem zusätzlich produzierten Methanol und dem synthetischen Naphta aus Kohlenwasserstoffen der Fischer-Tropsch Synthese oder der Hydrierung von Ölen und Fetten. Für die Erzeugung der darauf basierenden Zwischenprodukte und deren nachfolgende, vielfältige Weiterverarbeitung entsteht praktisch kein zusätzlicher Wasserstoffbedarf in der industriellen organischen Chemie.

6 Themen für Forschungs und Entwicklung zukünftiger Wertschöpfungsketten mit Wasserstoff in der chemischen Industrie

Der Forschungs- und Entwicklungsbedarf (F&E) zur Nutzung von Wasserstoff in der Industrie allgemein und in der chemischen Industrie wurde aktuell in zwei durch Bundesministerien geförderten Projekten zusammen mit Experten aus Industrie und aus der akademischen Forschung zusammengefasst:

- 1) Das vom Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz geförderte und dem Projektträger Jülich organisatorisch unterstützte Forschungsnetzwerk Wasserstoff [86] erarbeitet in mehreren Clustern Expertenempfehlungen zu vordringlichen Themen für die Forschung zu Wertschöpfungsketten unter Nutzung von Wasserstoff.
- 2) Der Wasserstoff Kompass [69] wird von den Bundesministerien für Bildung und Forschung und Wirtschaft und Klimaschutz erarbeitet auf Basis von Metastudien wissenschaftlich an Vorschlägen für die Herstellung und Anwendung von Wasserstoff für den Markthochlauf von „klimaneutralem Wasserstoff“ in der deutschen Wirtschaft

Ziel der gemeinsamen Anstrengungen in den F&E-Themen ist die Entwicklung und ganzheitliche Optimierung der Wertschöpfungsketten von der Bereitstellung erneuerbarer Energie und Wasserstoff bis hin zur Herstellung von Produkten für weiterverarbeitende Kunden aus der chemischen und pharmazeutischen Industrie sowie der Kunststoffherstellung und -verarbeitung. Dies erfordert interdisziplinäres F&E entlang der gesamten Skala der Technical Readiness Levels (TRL). Die Entwicklung neuer Materialsysteme wie in Katalysatoren, Membranen, Elektrodenmaterialien und Elektrolyte ist eine der Grundlagen für neue Prozess-, Apparate- und Anlagenkonzepte. Methoden der Digitalisierung, der Multiskalenmodellierung und der

beschleunigten Material- und Prozessentwicklung bilden die Grundlage für eine wissensbasierte Forschung. Plattformen für die Entwicklung und Demonstration von Verfahrens- und Anlagenkonzepten auf deutscher und europäischer Ebene müssen darauf abzielen, Entwicklungen von der Forschung in die Demonstration zu überführen. Die Begleitung der technisch-wissenschaftlichen F&E-Arbeiten durch eine fortlaufende Bewertung der sozioökonomischen Leistungsfähigkeit ermöglicht eine frühe Fokussierung auf aussichtsreiche Verfahrenskonzepte, Prozesskonfigurationen und Anwendungsszenarien.

7 Fazit und Ausblick

Die Umstellung der Rohstoffversorgung der chemischen Industrie von den fossilen Rohstoffen Erdöl, Erdgas und Kohle auf Rohstoffe mit zirkulärer Wertschöpfung wird zu einem erheblichen Anstieg des Bedarfs an regenerativ erzeugtem Wasserstoff führen, wie dies in verschiedenen Studien gezeigt wurde. Allein für die organisch-chemische Industrie kann ein gegenüber heute 3–4facher Mehrbedarf angenommen werden [4]. In der vorliegenden Arbeit werden mögliche Wertschöpfungsstufen einer zukünftigen, klimaneutralen chemischen Industrie betrachtet. Dabei ist die Wertschöpfungskette analog ihrer bisherigen Struktur in drei Stufen unterteilt: In der ersten Wertschöpfungsstufe werden aus den erneuerbaren Rohstoffen handelbare Grundchemikalien erzeugt; die Zwischenprodukte der zweiten Wertschöpfungsstufe können dann praktisch unverändert von der heutigen industriellen organischen Chemie übernommen werden. In einer Wertschöpfungskette mit dieser Struktur geht der gesteigerte Wasserstoff-Bedarf im Wesentlichen auf die Herstellung der regenerativ erzeugten Zwischenprodukte ausgehend von zur Verfügung stehenden erneuerbaren Rohstoffen über zukünftige Grundchemikalien zurück. Die anschließende Veredelung zu etablierten und langfristig weiter benötigten Produkten der chemischen Industrie führt kaum zu einer Erhöhung des Wasserstoffbedarfs. Erfolgt die Herstellung der Zwischenprodukte jedoch in Ländern mit Möglichkeiten für eine kostengünstige Herstellung von erneuerbarem Wasserstoff, so könnte der Wasserstoffbedarf in Deutschland durch Import und Weiterverarbeitung entsprechender Wasserstoffträger im Wesentlichen auf dem heutigen Niveau gehalten werden, sofern nicht weiterer Wasserstoffbedarf für die Bereitstellung von Prozesswärme entsteht. Dieser Wasserstoff wäre dann entweder aus lokal erzeugtem oder importierten „grünem“ oder „blauem“ Wasserstoff zu decken. Zahlreichen Studien mit Szenarien über die nächsten Jahrzehnte lassen übereinstimmend erwarten, dass regenerativ erzeugter Wasserstoff über dem heutigen Preisniveau bleiben wird. Daher wird sich die Prozessoptimierung aller Wertschöpfungsstufen auf die Minimierung des Wasserstoffeinsatzes bei Maximierung der Ausnutzung von Nebenproduktströmen ausrichten müssen.

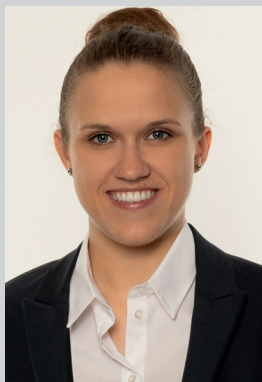
Danksagung

Open Access Veröffentlichung ermöglicht und organisiert durch Projekt DEAL.



Gabriela Rodrigues Niquini studierte Chemieingenieurwesen an der Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG, Brasilien). Seit 2021 ist sie Doktorandin am Institut für Katalysatorforschung und -technologie (IKFT) des KIT in der Gruppe „Katalyse und Prozesse zur CO₂-Fixierung“.

Ihr Forschungsschwerpunkt ist die kinetische Modellierung von Methanol- und Dimethylethersynthese mit CO₂-reichem Syngas für den Cu/ZnO/ZrO₂ Katalysator.



Pia Münzer studierte Chemieingenieurwesen und Verfahrenstechnik am Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Seit 2022 ist sie Teil der Arbeitsgruppe „Katalyse und Prozesse für nachhaltige Kraftstoffe“ am Institut für Katalysatorforschung und -technologie des KIT und befasst sich im Rahmen ihrer Promotion mit der

direkten Kopplung der Methanol- und Formaldehydsynthese zur Minimierung des Gesamtwasserstoffbedarfs.



Mahsa E-Moghaddam studierte Chemieingenieurwesen an der Universität Arak, Iran. Seit 2020 arbeitet sie als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für Katalysatorforschung und -technologie (IKFT) des KIT in der Gruppe „Thermochemische Umwandlung von Biomasse“.

Ihr aktueller Forschungsschwerpunkt liegt in der Prozesssimulation und Untersuchung verschiedener Prozessrouten zur Kraftstoffproduktion aus biomassebasiertem Synthesegas.



Lucas Warmuth studierte Chemie am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) und promovierte dort 2020 am Institut für Anorganische Chemie. Seit 2021 ist er am Institut für Katalysatorforschung und -technologie (IKFT) des KIT als Postdoktorand in der Arbeitsgruppe „Katalyse und Prozesse zur CO₂-Fixierung“ tätig. Seine

Forschung fokussiert sich auf die Entwicklung von Katalysatormaterialien von der Herstellung in verschiedenen Skalen bis zur Langzeittestung und der Evaluation von Stabilität sowie Materialveränderungen im Katalysatorbetrieb.



Karla Herrera Delgado studierte Chemie an der Universität von Costa Rica (UCR). Im Jahr 2014 promovierte sie am Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Seit 2015 ist sie am Institut für Katalyseforschung und -technologie (IKFT) des KIT tätig und ist dort Teamleiterin in der Arbeitsgruppe „Katalyse und Prozesse zur CO₂-Fixierung“. Ihre Forschungsschwerpunkte sind heterogene Katalyse im Bereich der PtX-Technologien, Reaktor- und Prozess-Simulation, Entwicklung von kinetischen Modellen (z.B. Multiskalenmodellierung) und Optimierung von chemischen Reaktoren.



Stephan Pitter studierte Chemie an der Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, und promovierte 1993 am Institut für Anorganische Chemie. Von 1994 bis 1996 war er Stipendiat der Max-Planck-Gesellschaft in der Arbeitsgruppe „CO₂-Chemie“ in Jena, Deutschland, und setzte sein Studium bis 1999 als wissenschaftlicher Mitarbeiter

fort. Seit 2000 ist er in verschiedenen Positionen am ehemaligen Forschungszentrum Karlsruhe bzw. am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) tätig. Seine Forschungsinteressen liegen auf dem Gebiet der homogenen Katalyse, der Mehrphasenkatalyse und der chemischen Prozesse in überkritischem CO₂. Derzeit ist er am KIT-Institut für Katalyseforschung und -technologie (IKFT) als wissenschaftlicher Geschäftsführer tätig und leitet die Gruppe „Katalyse und Verfahren zur CO₂-Fixierung“.



Nicolaus Dahmen studierte Chemie an der Universität Bochum und promovierte 1992 in der Arbeitsgruppe von G. M. Schneider. Er arbeitete an der Anwendung von hohen Drücken für chemische Reaktionen und Trennprozesse als Gruppenleiter und seit 2000 als Leiter der Abteilung „Hochdruckverfahrenstechnik“ am Forschungszentrum Karlsruhe (heute KIT). Im Jahr 2005 stieg er in den Aufbau der bioliq-Pilotanlage zur Umwandlung von Biomasse in synthetische Kraftstoffe und Chemikalien ein und leitet nun die Abteilung „Scale-up von Prozessen mit erneuerbaren Kohlenstoffquellen“ am Institut für Katalyseforschung und -technologie (IKFT). Nach seiner Habilitation im Jahr 2010 an der Universität Heidelberg ist er seit 2014 Professor an der Fakultät für Chemieingenieurwesen und Verfahrenstechnik des KIT.



Jörg Sauer ist seit 2012 ordentlicher Professor und Direktor des Instituts für Katalyseforschung und -technologie (IKFT) am Karlsruher Institut für Technologie. Sein Forschungsinteresse gilt der Entwicklung von Prozessketten, neuen Katalysatoren für die Herstellung synthetischer Flüssigkraftstoffe und Chemikalien auf Basis erneuerbarer Energieträger, der Prozesssimulation und techno-ökonomischen Bewertung von Produktionsprozessen sowie der Anwendung von Kraftstoffkomponenten in Verbrennungsmotoren.

Literatur

- [1] H. Ishaq, I. Dincer, in *Accelerating the Transition to a 100% Renewable Energy Era* (Ed: T. S. Uyar), Vol. 74, Springer International Publishing, Cham 2020.
- [2] M. Taylor, S. Al-Zoghoul, P. Ralon, *Renewable Power Generation Costs in 2022*, International Renewable Energy Agency, Abu Dhabi 2023.
- [3] P. Bains et al., *Global Hydrogen Review 2023*, International Energy Agency, Paris 2023.

- [4] A. Fernández, T. Spencer, *Net Zero Roadmap: A Global Pathway to Keep the 1.5 °C Goal in Reach - 2023 Update*, International Energy Agency, Paris **2023**.
- [5] R. Geres, A. Wehr, F. Ausfelder, A. Bazzanella, K. Wendler, F. Bierau-Delpont, K. y Gabriel, M. Kaspar, G. Franßen, A. Grobe, *Chemistry4Climate, Wie die Transformation der Chemie gelingen kann*, Abschlussbericht 2023, Verband der Chemischen Industrie E. V. (VCI), Verein Deutscher Ingenieure E. V. (VDI) **2023**.
- [6] P. Nikolaidis, A. Poullikkas, *Renewable Sustainable Energy Rev.* **2017**, *67*, 597–611. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.09.044>
- [7] K. T. Möller, T. R. Jensen, E. Akiba, H. Li, *Prog. Nat. Sci. Mater. Int.* **2017**, *27* (1), 34–40. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2016.12.014>
- [8] A. Midilli, H. Kucuk, M. E. Topal, U. Akbulut, I. Dincer, *Int. J. Hydrogen Energy* **2021**, *46* (50), 25385–25412. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.05.088>
- [9] L. Cao, I. K. M. Yu, X. Xiong, D. C. W. Tsang, S. Zhang, J. H. Clark, C. Hu, Y. H. Ng, J. Shang, Y. S. Ok, *Environ. Res.* **2020**, *186*, 109547. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.envres.2020.109547>
- [10] F. Safari, I. Dincer, *Energy Convers. Manage.* **2020**, *205*, 112182. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2019.112182>
- [11] P. J. Megía, A. J. Vizcaíno, J. A. Calles, A. Carrero, *Energy Fuels* **2021**, *35* (20), 16403–16415. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.1c02501>
- [12] J. R. Rostrup-Nielsen, J. Sehested, J. K. Nørskov, *Adv. Catal.* **2002**, *47*, 65–139.
- [13] K. Delgado, L. Maier, S. Tischer, A. Zellner, H. Stotz, O. Deutschmann, *Catalysts* **2015**, *5* (2), 871–904. DOI: <https://doi.org/10.3390/catal5020871>
- [14] G. Franchi, M. Capocelli, M. De Falco, V. Piemonte, D. Barba, *Membranes* **2020**, *10* (1), 10. DOI: <https://doi.org/10.3390/membranes10010010>
- [15] J. R. Rostrup-Nielsen, *Catal. Today* **2000**, *63* (2), 159–164. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0920-5861\(00\)00455-7](https://doi.org/10.1016/S0920-5861(00)00455-7)
- [16] M. Luberti, H. Ahn, *Int. J. Hydrogen Energy* **2022**, *47* (20), 10911–10933. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.01.147>
- [17] M. Rostami, A. H. Farajollahi, R. Amirkhani, M. E. Farshchi, *AIP Adv.* **2023**, *13* (3), 030701. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0137706>
- [18] O. Shtyka, Z. Dimitrova, R. Ciesielski, A. Kedziora, G. Mitukiewicz, J. Leyko, W. Maniukiewicz, A. Czyilkowska, T. Maniecki, *React. Kinet. Mech. Catal.* **2021**, *132* (2), 907–919. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11144-021-01945-6>
- [19] M. Wang, C.-T. Au, S.-Y. Lai, *Int. J. Hydrogen Energy* **2015**, *40* (40), 13926–13935. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.07.162>
- [20] T. Ramantani, G. Bamos, A. Vavatsikos, G. Vatskalis, D. I. Konradides, *Nanomaterials* **2021**, *11* (8), 1931. DOI: <https://doi.org/10.3390/nano11081931>
- [21] K. Wittich, M. Krämer, N. Bottke, S. A. Schunk, *ChemCatChem* **2020**, *12*.
- [22] A. Donazzi, B. C. Michael, L. D. Schmidt, *J. Catal.* **2008**, *260* (2), 270–275. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2008.09.028>
- [23] H. E. Figen, S. Z. Baykara, *Int. J. Hydrogen Energy* **2015**, *40* (24), 7439–7451. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.02.109>
- [24] G. Bozzano, F. Manenti, *Prog. Energy Combust. Sci.* **2016**, *56*, 71–105. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pecc.2016.06.001>
- [25] B. Christian Enger, R. Lødeng, A. Holmen, *Appl. Catal. Gen., A* **2008**, *346* (1–2), 1–27. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2008.05.018>
- [26] J. G. Speight, in *Gasification for Synthetic Fuel Production* (Eds: R. Luque, J. G. Speight), Woodhead Publishing **2015**.
- [27] W.-H. Chen, P. P. Biswas, H. C. Ong, A. T. Hoang, T.-B. Nguyen, C.-D. Dong, *Fuel* **2023**, *333*, 126526. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.126526>
- [28] P. M. Araújo, K. M. da Costa, F. B. Passos, *Int. J. Hydrogen Energy* **2021**, *46* (47), 24107–24116. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.04.202>
- [29] U. Zahid, S. S. Khalafalla, H. A. Alibrahim, U. Ahmed, A. G. A. Jameel, *Energy Convers. Manage.* **2023**, *296*, 117681. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.117681>
- [30] N. Sanchez-Bastardo, R. Schloegl, Holger. Ruland, *Chem. Ing. Tech.* **2020**, *92* (10), 1596–1609. DOI: <https://doi.org/10.1002/cite.202000029>
- [31] L. Jiang, D. Xue, Z. Wei, Z. Chen, M. Mirzayev, Y. Chen, S. Chen, *Energy Rev.* **2022**, *1* (1), 100004. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.enrev.2022.100004>
- [32] S. A. Grigoriev, V. N. Fateev, D. G. Bessarabov, P. Millet, *Int. J. Hydrogen Energy* **2020**, *45* (49), 26036–26058. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.03.109>
- [33] M. Risbud, G. Kaur, D. S. Dhawale, H. Zhu, N. Haque, S. Giddey, in *Hydrogen Economy* (Eds: A. Scipioni, A. Manzardo, J. Ren), 2nd Ed., Academic Press **2023**.
- [34] W. Kuckshinrichs, T. Ketelaer, J. C. Koj, *Front. Energy Res.* **2017**, *5*. DOI: <https://doi.org/10.3389/fenrg.2017.00001>
- [35] M. Carmo, D. L. Fritz, J. Mergel, D. Stolten, *Int. J. Hydrogen Energy* **2013**, *38* (12), 4901–4934. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.01.151>
- [36] Y. Zheng, J. Wang, B. Yu, W. Zhang, J. Chen, J. Qiao, J. Zhang, *Chem Soc Rev.* **2017**, *46* (5), 1427–1463. DOI: <https://doi.org/10.1039/C6CS00403B>
- [37] D. Henkensmeier, M. Najibah, C. Harms, J. Žitka, J. Hnát, K. Bouzek, *J. Electrochem. Energy Convers. Storage* **2020**, *18* (2), 024001. DOI: <https://doi.org/10.1115/1.4047963>
- [38] H. Wendt, G. H. Bauer, in *Hydrogen as an Energy Carrier: Technologies, Systems, Economy* (Eds: C.-J. Winter, J. Nitsch), Springer, Heidelberg **1988**.
- [39] H. Miyaoka, T. Ichikawa, N. Nakamura, Y. Kojima, *Int. J. Hydrogen Energy* **2012**, *37* (23), 17709–17714. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.09.085>
- [40] M. Orfila, D. Sanz, M. Linares, R. Molina, R. Sanz, J. Marugán, J. Á. Botas, *Int. J. Hydrogen Energy* **2021**, *46* (33), 17458–17471. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.04.222>
- [41] M. A. Marwat et al., *ACS Appl. Energy Mater.* **2021**, *4* (11), 12007–12031. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsaem.1c02548>
- [42] T. Setoyama, T. Takewaki, K. Domen, T. Tatsumi, *Faraday Discuss.* **2017**, *198*, 509–527. DOI: <https://doi.org/10.1039/C6FD00196C>
- [43] K. Bolatkhan, B. D. Kossalbayev, B. K. Zayadan, T. Tomo, T. N. Veziroglu, S. I. Allakhverdiev, *Int. J. Hydrogen Energy* **2019**, *44* (12), 5799–5811. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.01.092>
- [44] T. A. Milne, C. C. Elam, R. J. Evans, *Hydrogen from Biomass: State of the Art and Research Challenges*, United States **2002**.
- [45] M. Buffi, M. Prussi, N. Scarlat, *Biomass Bioenergy* **2022**, *165*, 106556. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2022.106556>
- [46] X. Liu, J. Liu, C. Deng, J.-Y. Lee, R. R. Tan, *Energy* **2020**, *201*, 117623. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.117623>
- [47] M. P. Lapinski, S. Metro, P. R. Pujadó, M. Moser, in *Handbook of Petroleum Processing* (Eds: S. A. Treese, D. S. Jones, P. R. Pujadó), Springer International Publishing, Cham **2014**.
- [48] H. Zimmermann, R. Walzl, in *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim **2009**.
- [49] H. Sperber, *Chem. Ing. Tech.* **1969**, *41* (17), 962–966. DOI: <https://doi.org/10.1002/cite.330411705>

- [50] A. W. Franz, H. Kronemayer, D. Pfeiffer, R. D. Pilz, G. Reuss, W. Disteldorf, A. O. Gamer, A. Hilt, in *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim **2016**.
- [51] www.reportlinker.com/p05817774/Global-Formaldehyde-Industry.html
- [52] T. F. O'Brien, T. V. Bommaraju, F. Hine, *Handbook of Chlor-Alkali Technology: Volume I: Fundamentals* (Eds: T. F. O'Brien, T. V. Bommaraju, F. Hine), Springer New York, NY **2005**.
- [53] D.-Y. Lee, A. A. Elgowainy, Q. Dai, *Life Cycle Greenhouse Gas Emissions of By-Product Hydrogen from Chlor-Alkali Plants*, Argonne National Lab, Argonne, IL **2017**.
- [54] *Chlor-Alkali Industry Report-Remaining Safe and Competitive While Achieving Climate Neutrality*, EuroChlor, Brussels **2023**.
- [55] G. Moral, R. Ortiz-Imedio, A. Ortiz, D. Gorri, I. Ortiz, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2022**, *61* (18), 6106–6124. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c04668>
- [56] P. Charoensuppanimit, K. Kitsahawong, P. Kim-Lohsoontorn, S. Assabumrungrat, *J. Clean. Prod.* **2019**, *212*, 893–909. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.12.010>
- [57] W. Simmler, in *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim **2000**.
- [58] M. Urbonavicius, S. Varnagiris, A. Mezulis, P. Lesnicensoks, A. Knoks, C. Richter, D. Milcius, R. Meirbekova, G. Gunnarsson, J. Kleperis, *Int. J. Hydrogen Energy* **2023**. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.09.065>
- [59] F. Qureshi, M. Yusuf, A. A. Pasha, H. W. Khan, B. Imteyaz, K. Irshad, *Int. J. Hydrogen Energy* **2022**, *47* (98), 41397–41420. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.04.010>
- [60] *Wasserstoff-Importstrategie für Deutschland*, Deutscher Wasserstoff- und Brennstoffzellen-Verband, Berlin **2023**.
- [61] P. Häussinger, R. Lohmüller, A. M. Watson, in *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim **2011**.
- [62] J. Niu, H. Liu, Y. Jin, B. Fan, W. Qi, J. Ran, *Int. J. Hydrogen Energy* **2022**, *47* (15), 9183–9200. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.01.021>
- [63] F. Dalena, A. Senatore, M. Basile, S. Knani, A. Basile, A. Iulianelli, *Membranes* **2018**, *8* (4), 98. DOI: <https://doi.org/10.3390/membranes8040098>
- [64] F. Ausfelder et al., *Chem. Ing. Tech.* **2015**, *87* (1–2), 17–89. DOI: <https://doi.org/10.1002/cite.201400183>
- [65] L. Mosca, E. Palo, M. Colozzi, G. Iaquaniello, A. Salladini, S. Taraschi, in *Current Trends and Future Developments on (Bio-) Membranes*, Elsevier, Amsterdam **2020**.
- [66] N. Rambhujun, M. S. Salman, T. Wang, C. Pratthana, P. Sapkota, M. Costalin, Q. Lai, K.-F. Aguey-Zinsou, *MRS Energy Sustainability* **2020**, *7* (1), 33. DOI: <https://doi.org/10.1557/mre.2020.33>
- [67] M. Van Vlierberghe, *Steelmaking Method and Associated Network of Plants*, **2023**.
- [68] N. Wiberg, E. Wiberg, A. F. Holleman, *Anorganische Chemie*, 103rd ed., De Gruyter, Berlin **2017**.
- [69] *DER KOMPASS - Wegweiser ins Wasserstoff-Zeitalter*, acatech, DECHEMA, Berlin, Frankfurt **2023**. www.wasserstoff-kompass.de
- [70] A. Fernandez Pales, P. Levi, *The Future of Petrochemicals Towards More Sustainable Plastics and Fertilisers*, IEA, Paris **2018**. <https://doi.org/10.1787/9789264307414-en>
- [71] J. Andersson, S. Grönkvist, *Int. J. Hydrogen Energy* **2019**, *44* (23), 11901–11919. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.03.063>
- [72] M. Niermann, S. Drünert, M. Kaltschmitt, K. Bonhoff, *Energy Environ. Sci.* **2019**, *12* (1), 290–307. DOI: <https://doi.org/10.1039/C8EE02700E>
- [73] P. Schühle, R. Stöber, M. Semmel, A. Schaadt, R. Szolak, S. Thill, M. Alders, C. Hebling, P. Wasserscheid, O. Salem, *Energy Environ. Sci.* **2023**, *16* (7), 3002–3013. DOI: <https://doi.org/10.1039/D3EE00228D>
- [74] J. Geiling et al., *J. Energy Storage* **2023**, *72*, 108478. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.est.2023.108478>
- [75] V. Dieterich, A. Buttler, A. Hanel, H. Spliethoff, S. Fendt, *Energy Environ. Sci.* **2020**, *13* (10), 3207–3252. DOI: <https://doi.org/10.1039/D0EE01187H>
- [76] T. Gül, D. Turk, S. Bennett, U. Remme, *The Future of Hydrogen – Seizing Today's Opportunities*, International Energy Agency, Paris **2019**.
- [77] News, *Dimethyl Ether Market to Hit Sales of \$8.92 Billion by 2028*, Globe Newswire, **2022**. www.globenewswire.com/en/news-release/2022/12/09/2571028/0/en/Dimethyl-Ether-Market-to-Hit-Sales-of-8-92-Billion-by-2028-India-Germany-and-US-are-the-Largest-Exporter-of-Dimethyl-Ether-SkyQuest-Technology.html
- [78] Y. Kwak et al., *Energy Convers. Manage.* **2021**, *239*, 114124. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2021.114124>
- [79] R. Lentner, M. Richter, R. Kleinrahm, R. Span, *J. Chem. Thermodyn.* **2017**, *112*, 68–76. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jct.2017.04.002>
- [80] *2023 World LNG Report*, International Gas Union (IGU), London **2023**.
- [81] G. Goor, J. Glenneberg, S. Jacobi, J. Dadabhoy, E. Candido, in *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim **2019**.
- [82] J. Glenneberg, H. Offermanns, H. Schlosser, *Nachr. Chem.* **2022**, *70* (7–8), 41–45. DOI: <https://doi.org/10.1002/nadc.20224127010>
- [83] *Handbook of Hydrogen Storage: New Materials for Future Energy Storage* (Ed: M. Hirscher), 1st ed., Wiley-VCH, Weinheim **2010**.
- [84] A. Becker, D. Peters, D. Kemnitz, *Anbau und Verwendung Nachwachsender Rohstoffe in Deutschland*, Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe E.V., Gülzow-Prützen **2023**.
- [85] N. Dahmen et al., in *Proc. 27th EUBCE 2019*, Lisbon **2019**.
- [86] *Langfassung Der Expertenempfehlung Forschungsnetzwerk Wasserstoff*, Projektträger Jülich (PtJ), Jülich **2022**.

DOI: 10.1002/cite.202300221

Regenerativ erzeugter Wasserstoff – Perspektiven in chemischen Wertschöpfungsketten

Gabriela Rodrigues Niquini, Pia Münzer, Mahsa Ebrahim-Moghaddam, Lucas Warmuth, Karla Herrera Delgado, Stephan Pitter, Nicolaus Dahmen, Jörg Sauer*

Review Article: Die zukünftige klimaneutrale chemische Industrie wird auf neue Rohstoffe und Basischemikalien zurückgreifen, für deren Herstellung große Mengen an regenerativ erzeugtem Wasserstoff benötigt werden. Die Veredelung könnte jedoch über im Wesentlichen unveränderte Zwischenprodukte erfolgen, so dass die Herstellung der Produkte nach ähnlichen Verfahren wie heute, aber mit drastisch höheren Effizienzanforderungen an den Wasserstoffverbrauch erfolgen könnte.

