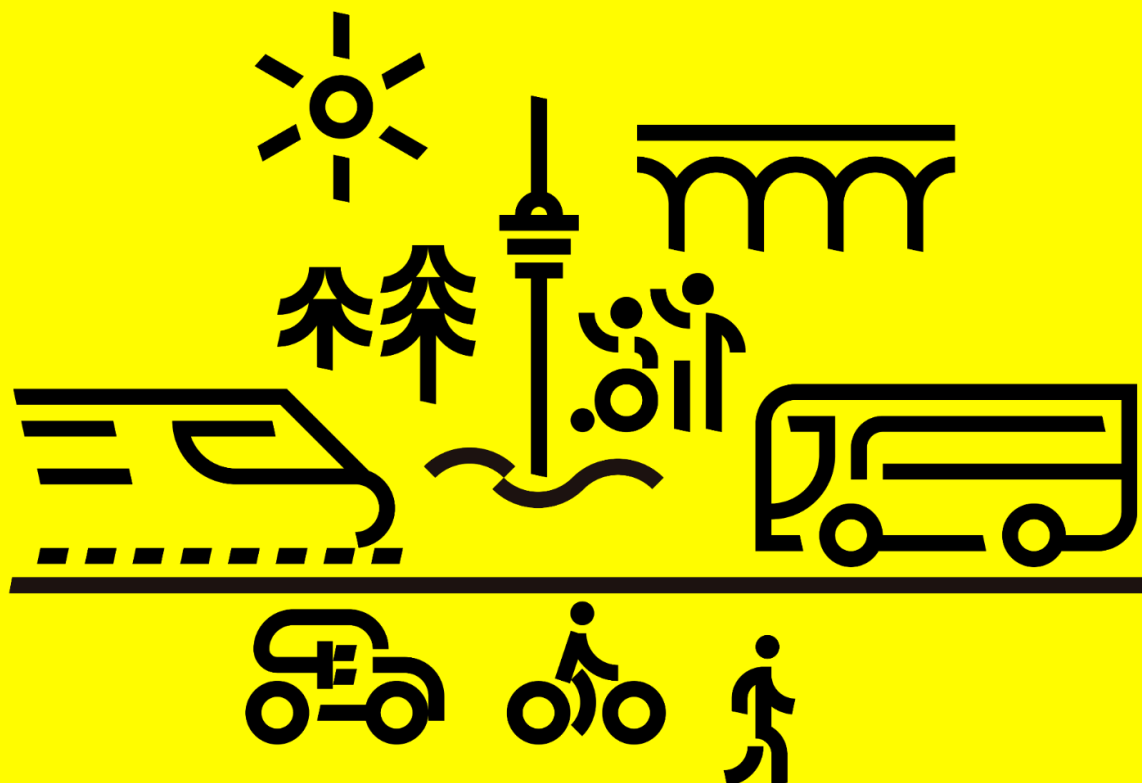




Vorbereitung einer Produktionsinfrastruktur für e- Kerosin und Koppelprodukte für Verarbeitung/Produktion/ Qualitätssicherung und Logistik am Beispiel der MiRO

Abschlussbericht





Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-----------|
| Vorwort..... | 3 |
| 1. Management Summary | 4 |
| 2. Problemstellung und Stand der Technik | 8 |
| 3. Struktur des Projektes | 10 |
| 4. Arbeitspaket A: Bewertung Produktvariabilität Mitteldestillate für variable Bereitstellung re-Diesel vs. re-Kerosin | 11 |
| 4.1. A1: Einflussparameter auf die Mitteldestillat-Fractionen definieren | 11 |
| 4.2. A2: Sensitivitäten und Konsequenzen errechnen | 27 |
| 4.3. A3: Eignung der Kraftstofffraktionen bewerten..... | 36 |
| 5. Arbeitspaket B: Konzeptstudie Infrastruktur für strombasiertes Kerosin von der MiRO-Raffinerie bis zum Anwender | 45 |
| 5.1. Kurzvorstellung der Konzeptstudie zur Entwicklung einer skalierbaren Infrastruktur für Kerosin- Fraktionen unter Berücksichtigung geographischer und technischer Rahmenbedingungen | 47 |
| 5.2. Kernaussagen der Studie | 51 |
| 6. Zusammenfassung | 52 |
| Literaturverzeichnis..... | 55 |
| Abbildungsverzeichnis..... | 57 |
| Tabellenverzeichnis | 58 |
| Anlagenverzeichnis | 58 |

Vorwort

Das Projekt „Vorbereitung einer Produktionsinfrastruktur für e-Kerosin und Koppelprodukte für Verarbeitung/Produktion/Qualitätssicherung und Logistik am Beispiel der MiRO“ wurde durch das Ministerium für Verkehr Baden-Württemberg gefördert und vom 23.12.2024 bis zum 30.11.2025 am Karlsruher Institut für Technologie bearbeitet.

Kontakt

Dr.-Ing. Olaf Toedter
E-Mail: olaf.toedter@kit.edu
Tel. 0721-608 43639

Autoren:

Institut für Kolbenmaschinen (IFKM): Dr.-Ing. Olaf Toedter, Niklas Nagel
Institut für Katalyseforschung und -technologie (IKFT): Prof. Dr. Nicolaus Dahmen, Prof. Dr.-Ing. Jörg Sauer, Dr. Ulrich Arnold, Julian Dutzi, Marc Pfennings, Marius Drexler

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.
KIT – Die Forschungsuniversität in der Helmholtz-Gemeinschaft



1. Management Summary

In dem vorliegenden Projekt „Vorbereitung einer Produktionsinfrastruktur für e-Kerosin und Koppelprodukte für Verarbeitung/Produktion/Qualitätssicherung und Logistik am Beispiel der MiRO“ wurde eine geeignete Infrastruktur für Produktion und Logistik am Beispiel der Mineraloelraffinerie Oberrhein (MiRO) konzipiert und bewertet. Die der Studie zugrundeliegende Annahme ist eine Produktion von erneuerbar erzeugtem Kerosin (re-Kerosin, z.B. auf Basis von Methanol am Standort MiRO) zur Versorgung der Flughäfen Stuttgart (STR) und Flughafen Karlsruhe/Baden-Baden (FKB). Der Produktionshochlauf der Kerosinbedarfe des Landes Baden-Württemberg wurde anhand aktueller Zahlen und Entwicklungen modelliert und den Betrachtungen zugrunde gelegt.

Um sowohl eine flexible Anpassung des Produktspektrums der MiRO an den langfristig sich entwickelnden Bedarf zu ermöglichen, wurden im Projekt die Auswirkungen der Prozessparameter der reFuels-Prozesse auf die Ausbeute der verschiedenen Kraftstoffe sowie die dabei erzielte Produktqualität untersucht.

Entwicklung eines Vorhersagemodells für die Teilproduktverteilung und Qualität der Syntheseprodukte einer re-Kerosin-Synthese

Fischer-Tropsch-Prozesse als auch Methanol-basierte Prozesse sind Syntheseprozesse für re-Kerosin mit hohem Technologie-Reifegrad. Die Variabilität der Produktion wurde ausgehend von vorangegangenen Erfahrungen¹, Ergebnissen der Literatur und experimentellen Untersuchungen Methanol-basierte Prozesse analysiert. Die Wahl der Prozessparameter beeinflusst sowohl die Ausbeute an re-Kerosin in der Summe der Syntheseprodukte, als auch seine Eigenschaften. Basierend auf diesen Analysen wurde ein Modell erarbeitet, dass die Produktspektren für unterschiedliche Prozessparameter vorhersagen kann. Damit wird die Grundlage für eine gezielte, produktflexible Steuerung des Prozesses gelegt. Weiterhin wurde

Optimierung der Ausbeute des re-Kerosins aus der Menge der Teilprodukte

mit Blick auf das im ersten Arbeitspaket erarbeitete Modell untersucht, wie durch gezielte Anpassung der Produktionsparameter und der Produktaufbereitung das Produktspektrum einer

¹ „Forschungsunterstützte Maßnahmen zur Transformation von Anlagen für klimaneutrale Kraftstoffe (reFuels) in den industriellen Maßstab- reFuels DEMO“, Förderkennzeichen VM5-2426-1 /12/1, gefördert durch das Ministerium für Verkehr Baden-Württemberg



e-Methanolbasierten reFuels-Produktion gezielt angepasst und qualitativ optimiert werden kann. Die Analyse der jeweiligen Teilprodukte erfolgte mit Blick auf die Bereitstellung spezifikationsgerechter Kraftstoffe (Kerosin, Diesel und Benzin), sowie die physikalischen Parameter, die besonders beim Kerosin ein Qualitätsmerkmal darstellen. Durch die Integration der Produktqualität in die Untersuchungen wird sichergestellt, dass am Ende ein normgerechtes und somit ein verkaufsfähiges Produkt entsteht.

Das so generierte Wissen um den Prozess und die Produkte trägt dazu bei, die Risiken für eine Umsetzung in größerem Maßstab zu reduzieren und erhöht somit die Chancen für eine erfolgreiche kommerzielle Umsetzung. Mithilfe des Modells kann der Prozess weiterhin im Rahmen zukünftiger Studien gezielt optimiert werden, um die Selektivität zu bestimmten Kraftstofffraktionen sowie die Produktqualität zu steigern.

Konzeptstudie zur Entwicklung einer skalierbaren Infrastruktur für Kerosin-Fractionen unter Berücksichtigung geographischer und technischer Rahmenbedingungen

Basierend auf den Ergebnissen einer bei einem Beratungsunternehmen in Auftrag gegebenen und im kritischen Austausch mit dem KIT und MiRO durchgeführten Studie wurden Konzepte für den Transport, das Blending und die Qualitätssicherung von Sustainable Aviation Fuel (SAF) mit fossilem Kerosin betrachtet. Der Begriff „SAF“ umfasst biobasierte oder strombasierte Kerosinkomponenten. In der Studie wurden sowohl die Effizienz der Logistikkette, wie auch die Liefersicherheit von den Produktionsstandorten bis zu den Flughäfen im Land Baden-Württemberg, bewertet. Dazu wurden zahlreiche Interviews mit relevanten Akteuren aus der Industrie geführt sowie bestehende Regeln und Gesetze evaluiert.

Für den Standort des Kerosin-Blendings wurden vier Möglichkeiten verglichen:

1. Blending @MiRO: Produktion synthetischer Blending-Komponenten (SBC) an der MiRO und Blending des re-Kerosins an der MiRO-Raffinerie,
2. Blending @Tanklager: Produktion synthetischer Blending-Komponenten (SBC) an der MiRO und Blending des re-Kerosins an einem bestehenden Tanklager,
3. MiRO reiner SBC-Produzent: eine reine Produktion synthetischer Blending-Komponenten (SBC) an der MiRO ohne Inverkehrbringung durch die MiRO-Gesellschafter
4. Blending @Airport: Produktion synthetischer Blending-Komponenten (SBC) an der MiRO und die Durchführung von Blending des re-Kerosins am Flughafen.

Das Ergebnis der Studie ist, dass Option 1 mit der MiRO-Raffinerie als Produzent der re-Kerosin Blending-Komponente (SBC-Produzent) und als Dreh- und Angelpunkt unter Berücksichtigung einer Infrastruktur für Kerosin die ökologisch wie auch ökonomisch sinnvollste Möglichkeit darstellt. Dafür muss aber



entschieden werden, wie viel fossiles Kerosin die MiRO selbst herstellen wird oder bereit ist in die Raffinerie zu importieren. Option 2 – Blending in einem nahegelegenen Tanklager ist auch eine realisierbare Alternative. Hierbei werden ein oder mehrere Tanklager in die Blending- und Distributionshubs integriert. Diese Tanklager haben schon Jet-, SAF- und Blending-Kompetenzen und -Kapazitäten und sind an der derzeitigen Kerosinversorgung beteiligt. Option 3 fehlt wegen der Notwendigkeit eines offenen Handels der SBC-Komponenten der Vorteil einer gesicherten Lieferung an STR und FKB. Aufgrund von geringem Platzangebot und Sicherheitsbedenken erweist sich Blending am Flughafen als nicht geeignet und schließt Option 4 aus. Für die Flughäfen Stuttgart und Karlsruhe sind weiterhin Standorte für SAF-Blending wichtig, die sich gut anpassen lassen und nah an den Flughäfen liegen. Für die Umsetzung ist an den jeweiligen Standorten in der Regel eine moderate Investition ausreichend. Der Nutzen liegt in der Flexibilität, Versorgungssicherheit und Redundanz der Versorgung.



Die Projektergebnisse zeigen die realisierbaren Optionen für eine Kerosininfrastruktur zur Versorgung der Flughäfen in Baden-Württemberg am Beispiel der Produktion von SAF-Komponenten am Standort der MiRO-Raffinerie. Gleichzeitig unterstreichen sie die Notwendigkeit einer „First-of-its-Kind“-MtJ-Anlage mit tragfähigem Business Case. Aus heutiger Sicht stellt die Erreichung der Wirtschaftlichkeit dieser Anlage – einschließlich der dafür erforderlichen regulatorischen Rahmenbedingungen – die größte Hürde dar. Ein nachhaltiges Geschäftsmodell gewinnt insbesondere angesichts der langen Zeiträume für Planung, Genehmigung, Bau und Inbetriebnahme an Bedeutung und erweist sich als die anspruchsvollere Herausforderung im Vergleich zu den infrastrukturellen Voraussetzungen.

Weitere Aktivitäten sollten sich daher unter anderem darauf konzentrieren, die kommerziellen und regulatorischen Voraussetzungen für ein tragfähiges, nachhaltiges Geschäftsmodell zu definieren. Hierbei wäre eine Kombination in Baden-Württemberg entwickelter Technologien, bestmöglich unter Nutzung regionaler Rohstoffe (CO₂ oder biogene Ressourcen) mit Partnern aus dem Land anzustreben.

Handlungsempfehlungen

Zur Unterstützung der in diesem Projekt entwickelten Überlegungen für den Aufbau einer Kerosin-Infrastruktur würden wir folgende Handlungsweisen empfehlen:

- **Ein Test-Hochlauf an Kleinflughäfen wie beispielsweise dem Flugfeld Mannheim würde bei geringeren Kosten die mit der Entwicklung einer re-Kerosin-Infrastruktur verbundenen Risiken, technische und organisatorische Hemmnisse aufzeigen.** Durch ein entsprechendes Pilotprojekt könnten Lösungsansätze erarbeitet werden, die als Blaupause für die anderen Flughäfen genutzt werden können. Ein entsprechender Testlauf müsste durch das Landesverkehrsministerium gefördert werden.
- **Es ist weiteres politisches Engagement erforderlich,** um die Regeln für den Import von e-Methanol aus Nicht-EU-Staaten hinsichtlich der Umsetzung der Anforderungen in den Delegierten Rechtsakten zu erleichtern und konkrete Forderungen für den Import zu definieren. (vgl. Aktionsplan reFuels des Ministeriums für Verkehr).
- **Es sind geeignete regulatorische Maßnahmen zu entwickeln, die Investoren helfen, die Kombination technischer und marktwirtschaftlicher Risiken bei „first-of-its-kind-Anlagen“ abzudecken** (vgl. Aktionsplan reFuels)



2. Problemstellung und Stand der Technik

Das Erreichen der in Paris vereinbarten Klimaziele zur Reduktion des CO₂-Abdruckes („carbon footprint“) bedarf bedeutender Veränderungen, besonders jedoch zukunftsfähiger Innovationen im Energiebereich. In Deutschland haben sich hierbei die Sektoren des Energiesystems im Zuge der Energiewende und der Umsetzung des Klimaschutzplans 2050 in unterschiedlichem Maß weiterentwickelt [1–4]

Es besteht große Einigkeit, dass mit erneuerbaren Energien hergestellte regenerative Kraftstoffe im Luftverkehr und in der Seefahrt und evtl. darüber hinaus in Teilen des Bodenverkehrs ein wesentlicher Baustein der Mobilität der Zukunft zur Erreichung der Klimaziele sein werden. Regenerativ bedeutet hier, dass der in den Synthesekraftstoffen enthaltene Kohlenstoff in Form von CO₂ aus der Luft direkt oder indirekt über Pflanzen oder unvermeidbare Emissionen bereitgestellt wird und der Prozess mit regenerativen Energiequellen versorgt wird. Diese Kraftstoffe (reFuels sind die Summe der E-Fuels, fortschrittlichen Biokraftstoffe und Kraftstoffe aus Rest- und Abfallstoffen der Land- und Forstwirtschaft) bilden dann die Voraussetzung für geschlossene CO₂-Kreisläufe.

Nach dem derzeitigen Stand der Studien ist in Deutschland in den nächsten Jahren bis 2050 zunehmend mit einem Rückgang der Nachfrage nach Diesel- und Ottokraftstoffen sowie Heizöl durch die wachsende Elektrifizierung der Fahrzeugflotte und die Umstellung der Heizungssysteme zu rechnen. Gleichzeitig ist ein Markthochlauf strombasierter Kraftstoffe auf Grundlage des regulatorischen Rahmens [5, 6] (ReFUEL EU Aviation) zu erwarten, der jedoch nicht für alle Kraftstoffe und Kraftstoffanwendungen gleichzeitig erfolgen wird.

Diese Entwicklung des Marktes birgt das Risiko, dass einzelne Produktionsanlagen in Raffinerien oder möglicherweise ganze Raffinerien mit ungünstigen Standortfaktoren **nicht mehr kostendeckend betrieben werden** können.

Eine Möglichkeit zur langfristigen Standortsicherung und schrittweisen Transformation ist die Verschiebung des Anlagenverbundes und des Produktportfolios hin zu Produkten, die aus technischer Sicht langfristig nur schwer zu ersetzen sind, wie z.B. die Herstellung von re-Kerosin für die Luftfahrt, kurzkettige e-Olefine als Edukte für die chemische Industrie, aromatenarmes, hochoktaniges Benzin für Hochleistungsanwendungen on- und off-road und paraffinischer e-Diesel für off-Road-Anwendungen.

Ziel des Forschungsvorhabens war es, eine geeignete Infrastruktur für Produktion und Logistik für den sich zeitlich bis 2050 verändernden Produktmix zu beschreiben, sich daraus ergebende Risiken und Variabilitäten aufzuzeigen und die Voraussetzungen für entsprechende zukunftsfähige Infrastrukturmaßnahmen zu schaffen.



Dabei sind Konzepte für den Transport und das Blending von fossilen, biobasierten und strombasierten Kerosinkomponenten einschließlich der Qualitätssicherung zu entwickeln, um eine effiziente Logistik vom Hersteller bis zum Anwender zu gewährleisten.

Bei e-Methanol-basierten Synthesen wird eine Benzin-Fraktion und ein Spektrum an Mitteldestillaten synthetisiert. In den heute am Markt verfügbaren Verfahren entsteht neben e-Kerosin ein Koppelprodukt, das der Kettenlänge von Benzinkomponenten entspricht. Dieselkomponenten entstehen dagegen bei diesen Verfahren nur in untergeordneten Mengen. Die Betriebsparameter der am KIT entwickelten Verfahren zur Kraftstoffherstellung aus e-Methanol wurden in den Analysen so modifiziert, dass der Schwerpunkt der Produktverteilung auf die Herstellung von e-Kerosin und e-Diesel verlagert wurde und gleichzeitig immer noch bedarfsgerecht kleine Mengen hochwertiger Benzinkomponenten entstehen.

Diese Abhängigkeiten und Quereinflüsse unterschiedlicher Parametrisierungen wurden analysiert und mit Blick auf erzielbare Mitteldestillat-Fractionen betrachtet. Eine hier erzielbare Variabilität muss mit der geplanten Produkt-Infrastruktur zusammenwirken und unter den entsprechenden Rahmenbedingungen einsetzbar sein.

3. Struktur des Projektes

Das Gesamtprojekt wurde in zwei übergeordnete Arbeitspakete strukturiert:

- A) Die Bewertung der Produktvariabilität der synthetisierten Mitteldestillate für eine variable Bereitstellung von re-Diesel und re-Kerosin im Vergleich
- B) Eine durch einen Ingenieurdienstleister durchgeführte Konzeptstudie zur Infrastruktur für strombasiertes Kerosin am Beispiel von der MiRO-Raffinerie bis zum Anwender

Im Arbeitspaket A wurden basierend auf aktuell ermittelten Daten die zukünftig zu erwartenden Kerosin-Bedarfe bestimmt. Aufbauend auf Prozessberechnungen und bekannten Ergebnissen der Vorprojekte^{2,3} wurde ein Modell entwickelt, dass es erlaubt den Produktsplit zwischen Kerosin und den anderen Mitteldestillat-Fractionen vorherzusagen. Prozesstechnische Randbedingungen stellen dabei die Eingangsparameter dar.

Die erarbeiteten Gleichungen zur Beschreibung der Produktverteilung wurden experimentell bestätigt und deren Robustheit anhand von Sensitivitätsanalysen bewertet.

Diese Arbeitspakete des Projektes wurden im zeitlichen Ablauf wie in Abbildung 1 bearbeitet:

| | | Jan 25 | Feb 25 | Mrz 25 | Apr 25 | Mai 25 | Jun 25 | Jul 25 | Aug 25 | Sep 25 | Okt 25 | Nov 25 |
|------|--|--|--------|--|--------|--------|--------|---|--------|------------------|--------|-------------------|
| AP A | | Bewertung Produktvariabilität Mitteldestillate für variable Bereitstellung re-Diesel vs. re-Kerosin. | | | | | | | | | | |
| A1 | Einflussparameter auf die Mitteldestillat-Fractionen definieren | Bedarf-Szenarien (IFKM) | | Prozess-Pfade (FT und MtO-OtX) inkl Grenzen (IKFT) | | | | | | | | |
| A2 | Sensitivitäten und Konsequenzen errechnen | | | | | | | Sensitivität f. Synthese (IKFT) | | | | |
| A3 | Eignung der Kraftstofffraktionen bewerten | | | | | | | Sensitivität f. Upgrading/Blending (IKFT) Sensitivität f. Nutzung (IFKM) | | | | |
| A4 | Koordination, Reports und Kommunikation | | | | | | | | | | | |
| AP B | | Konzeptstudie Infrastruktur für strombasiertes Kerosin von der MiRO-Raffinerie bis zum Anwender | | | | | | | | | | |
| B1 | Szenarien für Lager-, Blend- Standorte erarbeiten | | | | | | | | | | | |
| B2 | Qualitätssicherungskonzepte erarbeiten | | | | | | | | | | | |
| B3 | Randbedingungen aus Produktion, Lieferkette und Verfügbarkeit abbilden | | | | | | | | | | | |
| B4 | Bewertungskriterien ableiten | | | | | | | | | | | |
| B5 | Koordination, Vergaben, Reports und Kommunikation | Ausschreibung vorbereiten | | Ausschreibung | | | | | | Zwischen-treffen | | Abschluss-treffen |

Abbildung 1: Gant-Diagramm der Projektstrukturierung und des zeitlichen Ablaufes.

² Ergebnisbericht reFuels

³ Ergebnisbericht reFuels - Demo



4. Arbeitspaket A: Bewertung Produktvariabilität Mitteldestillate für variable Bereitstellung re-Diesel vs. re-Kerosin

In AP A wurde zunächst der zukünftige Bedarf an Kerosin in Baden-Württemberg anhand historischer Daten sowie der erwarteten Entwicklung der Passagierzahlen abgeschätzt. Anschließend wurde eine systematische Untersuchung der Produktvariabilität des untersuchten Prozesses durchgeführt. Diese ist eng mit der Verteilung der Kettenlänge der Zwischenprodukte (Olefine) verknüpft, welche wiederum mit den Syntheseparametern, den verwendeten Katalysatoren und den eingestellten Prozessparametern wechselwirkt. In AP A1 wurde zunächst im Rahmen einer Literaturrecherche grundlegende Informationen zur Darstellung der Kettenlängenverteilung von Fischer-Tropsch- und Olefin Oligomerisierungsverfahren als Referenzprozesse gesammelt. Anschließend wurde ein Modell für die im betrachteten Verfahren anzufindenden Kettenlängenverteilungen erstellt. In AP A2 wurde anschließend im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse der Zusammenhang der Kettenlängenverteilungen mit den prozesstechnischen Einflussparametern untersucht, um die technische Grundlage für eine Anpassung der Produktverteilung an die Bedarfsentwicklung zu legen. Da die Anwendungseigenschaften der Produktströme stark mit der Kettenlängenverteilung und somit den Prozessparametern wechselwirken wurde abschließend in AP A3 eine Bewertung der Produktqualität hinsichtlich der Kompatibilität zu bestehenden Kraftstoffnormen durchgeführt.

4.1. A1: Einflussparameter auf die Mitteldestillat-Fraktionen definieren

4.1.1 Bedarf-Szenarien

4.1.1.1 Kerosinbedarf in Baden-Württemberg

Im Folgenden werden die möglichen Bedarfe anhand der historischen Entwicklungen und üblichen Flugzahlen sowie Kerosinbedarfsentwicklungen in zwei Szenarien extrapoliert. Der Kerosinbedarf in Baden-Württemberg unterliegt starken jährlichen Schwankungen und variiert stärker als die Passagierzahlen, welche sich allerdings deutlich besser voraussagen lassen. Im Schnitt kann im Europäischen Raum mit einem Anstieg des Fluggastaufkommens von ca. 3% pro Jahr gerechnet werden, in den Jahren 2004 bis 2019 gab es in Baden-Württemberg ein jährliches Wachstum knapp über 3%. Bei einer technischen Effizienzsteigerung beim Antrieb von ca. 2% pro Jahr ergibt sich ein prozentualer Mehrverbrauch von ca. 1% an Kerosin.

Der Einbruch der Passagierzahlen durch die Corona-Pandemie konnte in den letzten Jahren noch nicht überwunden werden, auch wenn sich die Zahlen langsam wieder an die von 2019 annähern, wurden diese in Baden-Württemberg und Deutschland noch nicht wieder erreicht, wie in Abbildung 2 zu sehen ist. In den übrigen Ländern der EU wurden 2024 erstmals wieder die Zahlen von 2019 übertroffen. Die



langsamere Erholung des deutschen Marktes lässt sich auf die deutlich stärker gestiegenen Standortkosten zurückführen, insbesondere Start- und Landegebühren [7] Seite 10ff).

Mit der Gesetzgebung der EU vom 18. Oktober 2023 ist die Luftfahrt verpflichtet bis 2050 mindestens 35% des eingesetzten Kerosins aus RFNBO zu beziehen weitere mindesten 35% müssen ebenfalls SAF sein, hier ist vor allem HEFA eine wahrscheinliche Komponente. (ReFuel EU Aviation [6]) Bereits im Jahr 2025 schreibt die EU einen SAF Anteil von 2% vor. Dieser kann allerdings bis 2034 über eine Flexibilisierungsregelung auch außerhalb Baden-Württembergs von den Treibstofflieferanten an anderen EU-Flughäfen verfrachtet werden.

Zur Prognose des benötigten Kerosins im Jahr 2050 wurden die Kennzahlen vom Flughafen Stuttgart und aus ganz Baden-Württemberg zu Rate gezogen. Bei einem Kerosinverbrauch von ca. 300 000 t im Jahr 2019 wären das gut 100 000 t gewesen. Durch die Corona-Pandemie gab es einen drastischen Rückgang an Flügen und folglich am Kerosinbedarf. Dieser Rückgang wurde für die Flughäfen im Land Baden-Württemberg bisher nicht wieder aufgeholt.

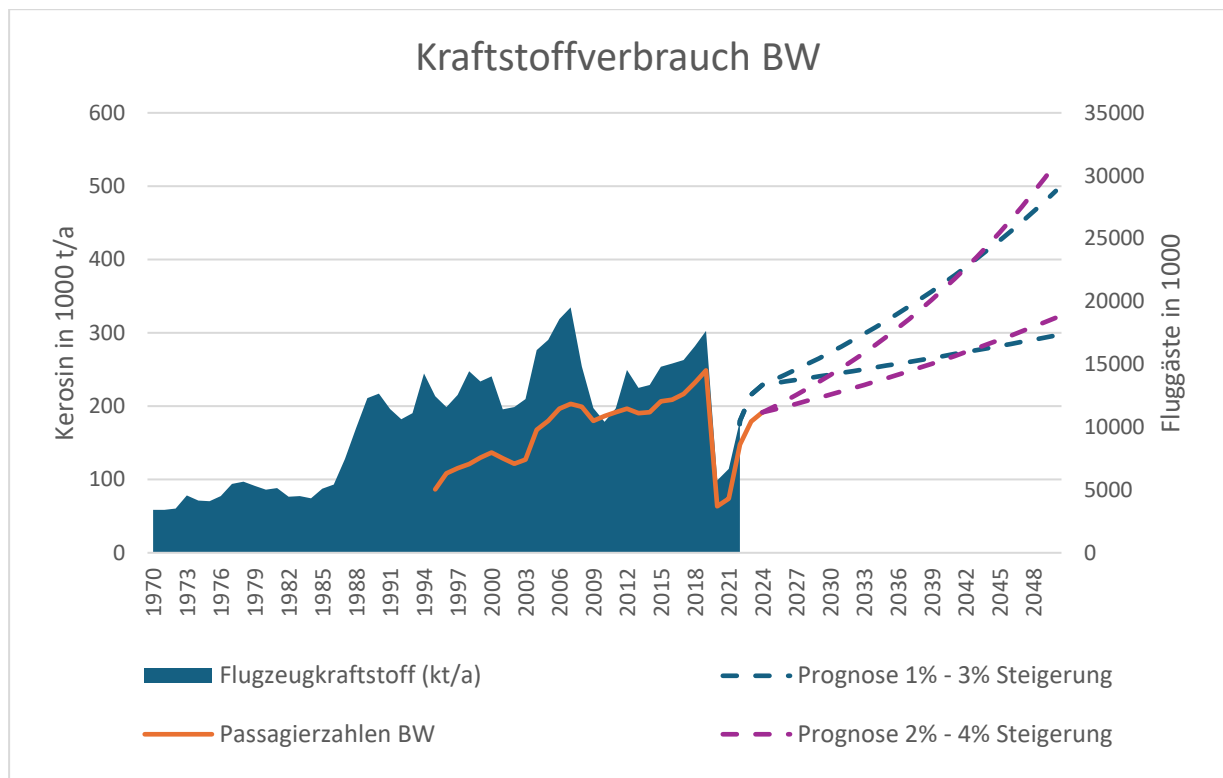


Abbildung 2 Passagierzahlen, Kerosinverbrauch und Prognose über die Jahre 1970 bis 2048 in Baden-Württemberg.

Da eine Betrachtung der Flughäfen im Land etwas zu kurz gegriffen ist werden die größeren, aus Baden-Württemberg gut erreichbaren Flughäfen, welche häufiger als Alternative in Betracht gezogen werden in Abbildung 3 betrachtet. Hier zeigt sich, dass der Flughafen Memmingen als einziger den coronabedingten Einbruch überwinden konnte.

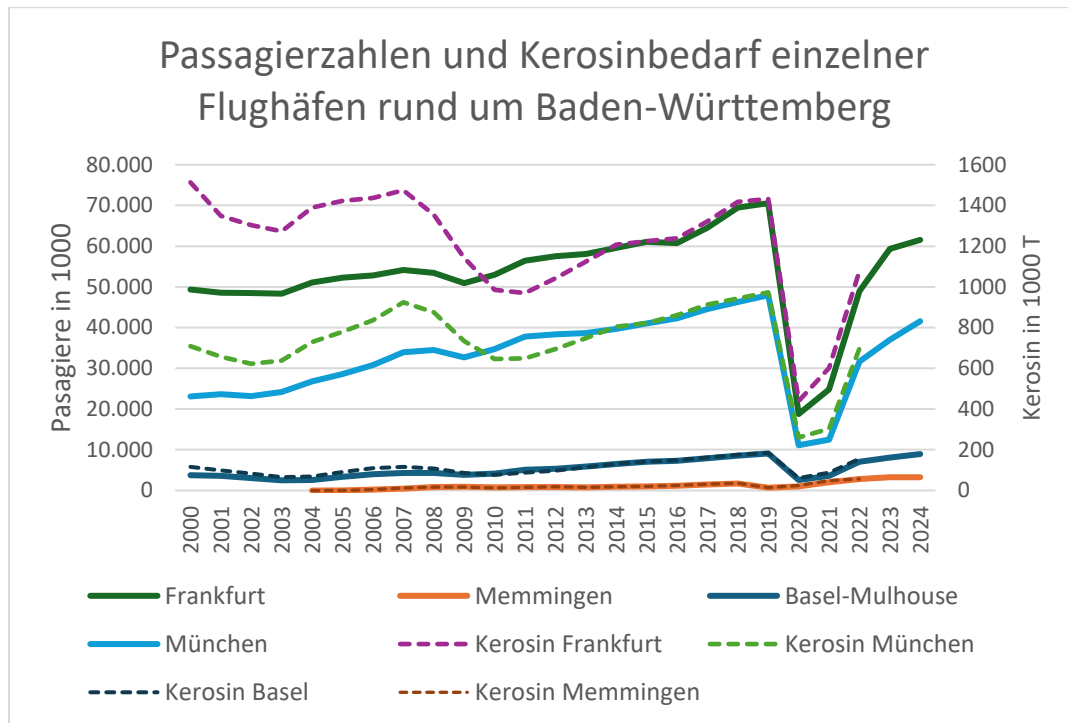


Abbildung 3 Kennzahlen möglicher Ausweichflughäfen [8, 9]

4.1.1.2 Möglicher Bedarf an weiteren Mitteldestillaten

Neben Kerosin liegen auch Diesel und Heizöl im Bereich der Mitteldestillate. Hier sind die Bedarfe deutlich geringeren Schwankungen ausgesetzt und lassen sich vermeintlich auch einfacher vorhersagen. Der generelle Kraftstoff-Bedarf in Baden-Württemberg, wie er in Abbildung 4 zu sehen ist, zeigt deutlich den steigenden Dieselbedarf, ebenfalls ein Mitteldestillat mit in Teilen ähnlichen Eigenschaften wie Kerosin.

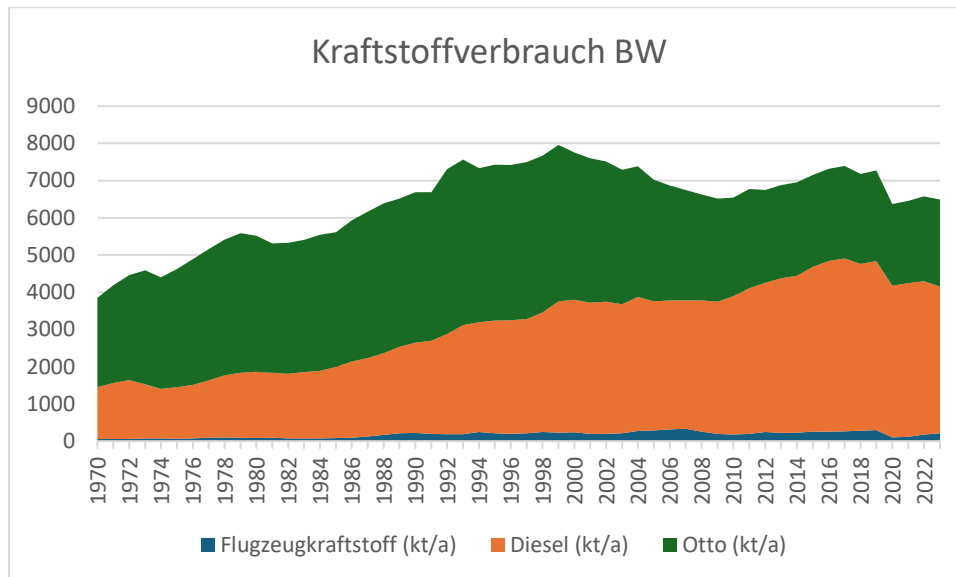


Abbildung 4 Kraftstoffbedarf in Baden-Württemberg über die letzten 50 Jahre.

Im Gegensatz zum Kerosin gibt es beim Diesel möglicherweise eine höhere Zahlungsbereitschaft zu dem aktuell deutlich größeren Gesamtbedarf was besonders in der Hochlaufphase zur Finanzierung einer wirtschaftlich arbeitenden Anlage beitragen kann. Eine präzise Prognose im Bereich des re-Diesel-Bedarfs ist allerdings komplexer, da es die Quoten wie sie in der Luftfahrt von der EU festgelegt wurden nicht gibt. Mit Hydrotreated Vegetable Oil (hydriertes Pflanzenöl, HVO) gibt es bereits eine verfügbare Alternative zum fossilen Diesel. Hier liegen die Preise an der Tankstelle meist ca. 10 Cent/l über denen von fossilem Diesel. Eine besonders große Rolle spielen neben dem Preis noch die Möglichkeit der Anrechnung und die Wirtschaftliche Entwicklung [10]. Der prozentuale Kerosinanteil in Baden-Württemberg ist in Abbildung 5 gezeigt.

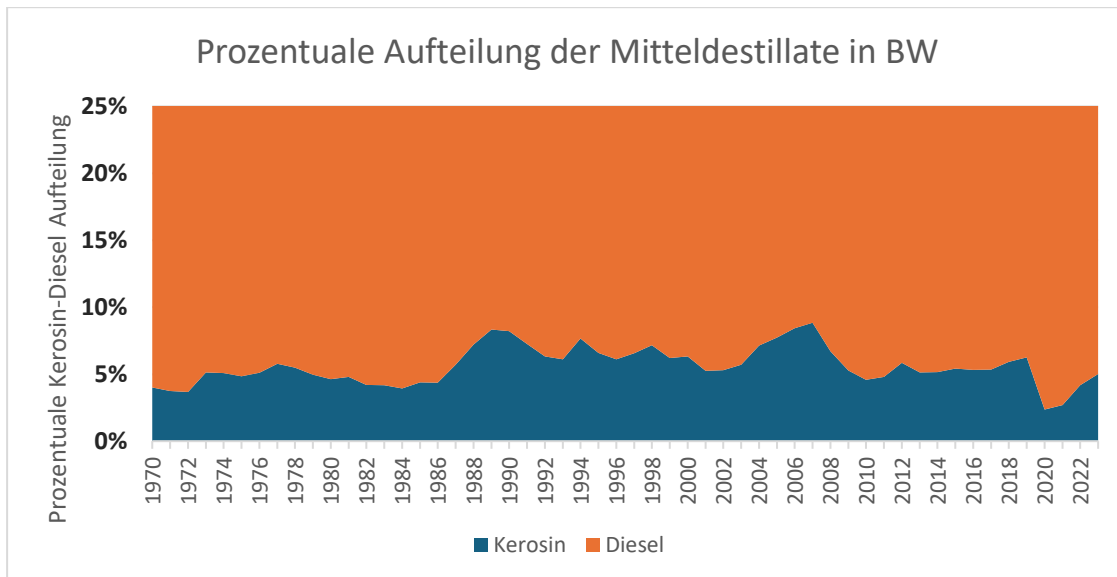


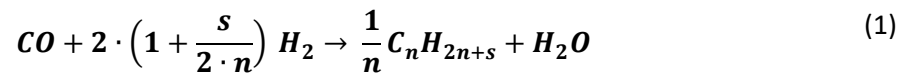
Abbildung 5 Kerosin zu Diesel Verhältnis in den Mitteldestillaten.

4.1.2 Prozess-Pfade (FT und MtO-OtX) inkl. Grenzen

Im Folgenden werden die Einflussparameter auf zwei wichtige Prozesse zur re-Fuels-Produktion (Fischer-Tropsch Synthese und Olefin-Oligomerisierung) und deren Einfluss auf die Produktverteilungen der jeweiligen Prozesse beschrieben. Dar-aus werden Grundlagen und Handlungsbedarfe für den im Projekt betrachteten Prozess zur re-Fuels-Produktion abgeleitet.

4.1.2.1 Grundlagen zur Produktverteilung der Fischer-Tropsch-Reaktion

Die Fischer-Tropsch-Reaktion konvertiert Kohlenmonoxid und Wasserstoff zu Kohlenwasserstoffen mit unterschiedlicher Kettenlängen. Es handelt sich um eine heterogen katalysierte Reaktion, bei der in der Regel Eisen- oder Kobaltkatalysatoren eingesetzt werden. Hauptprodukte der Fischer-Tropsch-Reaktion sind Olefine, Paraffine, Oxygenate und Aromaten [11]. Das zugrunde liegende Reaktionsnetzwerk ist sehr komplex und noch Gegenstand aktueller Forschungsprojekte [12]. Vereinfacht lässt sich die Fischer-Tropsch Reaktion mit folgender Reaktionsgleichung beschreiben (Gleichung (1)). Der Parameter s ist für Paraffine 2 und für Olefine 0. Der Parameter n repräsentiert die Kettenlänge [12].



Im Allgemeinen wird zwischen der Hochtemperatur-Fischer-Tropsch-Synthese (HTFT) und der Tieftemperatur-Fischer-Tropsch-Synthese (LTFT) unterschieden. Die LTFT-Synthese läuft bei Temperaturen zwischen 180 und 250 °C ab und die HTFT-Synthese bei Temperaturen zwischen 300 und 350 °C. Die Hauptprodukte der LTFT-Synthese sind 1-Olefine und Oxygenate. Im Gegensatz zur LTFT-Synthese entstehen bei der HTFT-Synthese längere Kohlenwasserstoffe, die in der Regel Wachse enthalten [13].

Die Beschreibung der Produktverteilung bei der Fischer-Tropsch-Reaktion ist von großem Interesse. Herington und Anderson haben in diesem Zusammenhang die Anderson-Schulz-Flory-Verteilung auf die Fischer-Tropsch-Reaktion angepasst (Gleichung 2).

$$y_n = (1 - \alpha) \cdot \alpha^{n-1} \quad (2)$$

Der einzige Modellparameter in dieser Gleichung ist die Kettenwachstumswahrscheinlichkeit α , die durch die Kettenwachstumsrate $r_{P,n}$ und die Kettenabbruchrate $r_{T,n}$ definiert ist (Gleichung 3).

$$\alpha = \frac{r_{P,n}}{r_{P,n} + r_{T,n}} \quad (3)$$

Die Kettenwachstumswahrscheinlichkeit hängt vom Katalysator und den Prozessparametern (Synthesegaszusammensetzung bzw. H_2/CO -Verhältnis, Druck, Temperatur) ab [12]. Die Auswirkung der Kettenwachstumswahrscheinlichkeit auf die Produktverteilung ist schematisch in Abbildung 6 dargestellt. Im Allgemeinen verschiebt eine Erhöhung der Reaktionstemperatur die Selektivität zugunsten von Kohlenwasserstoffen mit niedriger Kohlenstoffanzahl, d.h. α wird verringert. Eine Verringerung der Temperatur führt umgekehrt zu einer Steigerung von α , so dass die Bildung längerer Kohlenstoffketten begünstigt wird [14, 15]. Ebenso steigert die Erhöhung des Druckes die Kettenwachstumswahrscheinlichkeit α [14, 16]. Die Zusammensetzung des Einsatzgases, insbesondere das H_2/CO -Verhältnis, hat einen erheblichen Einfluss auf die Produktverteilung. Ein höheres H_2/CO -Verhältnis verringert in der Regel die Wahrscheinlichkeit des Kettenwachstums, was zu einer erhöhten Bildung leichter Produkte und einer geringeren Wachsbildung führt. Niedrigere H_2/CO -Verhältnisse begünstigen hingegen die Bildung schwererer Kohlenwasserstoffe [14, 15].

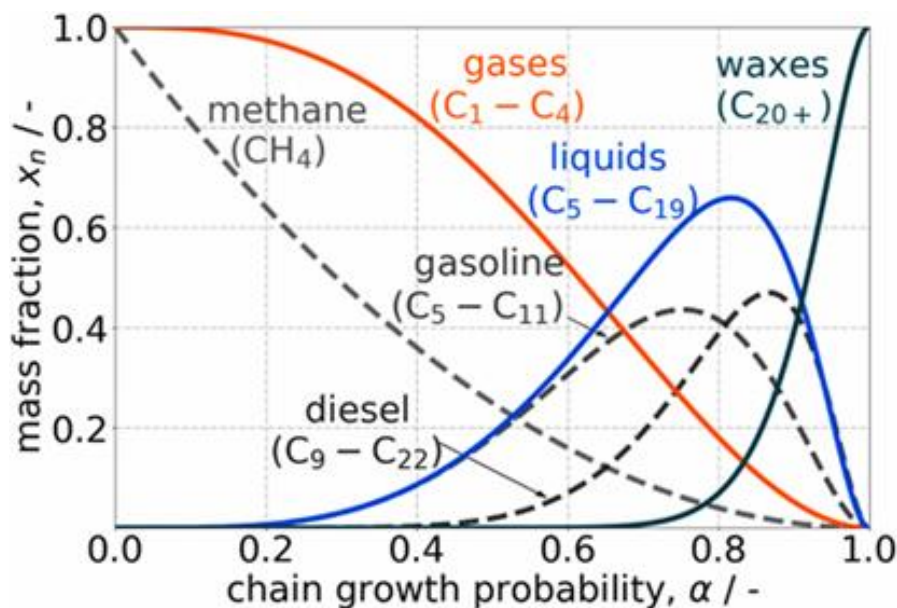


Abbildung 6: Massenanteil der Kohlenwasserstoffe als Funktion der Kettenwachstumswahrscheinlichkeit (Darstellung entnommen aus [13], lizenziert unter CC BY-ND 4.0).

Kleine Kettenwachstumswahrscheinlichkeiten begünstigen gasförmige Produkte. Mit zunehmender Kettenwachstumswahrscheinlichkeit werden die Kettenlängen der Produkte länger und es entstehen flüssige Kohlenwasserstoffe und Wachse [13]. Für die Kettenlängen C_1 , C_2 und C_{10+} wurden Abweichungen von der idealen Anderson-Flory-Schulz-Verteilung festgestellt. Zur Verbesserung der Anderson-Flory-Schulz-Verteilung wurden Superpositionsmodelle eingeführt, um die Produktverteilung der Fischer-Tropsch-Reaktion genauer beschreiben zu können. Diese Modelle bestehen aus zwei verschiedenen Anderson-Flory-Schulz-Verteilungen, die sich überlagern. Im Rahmen dieser Modelle wird eine weitere Kettenwachstumswahrscheinlichkeit α'' eingeführt. Bei kleinen Kettenlängen wird die Verteilungsfunktion von der Kettenwachstumswahrscheinlichkeit α' und bei großen Kettenlängen von der Wachstumswahrscheinlichkeit α'' dominiert. Diese Modelle werden häufig angewendet, um die Abweichungen der Kettenlänge C_{10+} von der idealen Anderson-Flory-Schulz-Verteilung zu beschreiben [12].

4.1.2.2 Grundlagen zur Produktverteilung der Olefin-Oligomerisierung

Die Oligomerisierung ist ein Prozess, bei dem sich kleine Moleküle, sogenannte Monomere, zu kurzen Ketten zusammenschließen, die als Oligomere bezeichnet werden. Diese Ketten sind länger als Dimere oder Trimere, aber kürzer als Polymere und bestehen typischerweise aus wenigen bis mehreren Dutzend sich wiederholenden Einheiten. Im chemischen Kontext beschreibt die Oligomerisierung oft eine Reaktion zur Konvertierung kurzer Olefine in höhere Kohlenwasserstoffe unterschiedlicher Kettenlänge.

Die resultierende Produktverteilung wird im Wesentlichen durch die Prozessparameter Verweilzeit am Katalysator, Druck und Temperatur sowie durch die Feed Zusammensetzung bestimmt.

Werden Edukte eingesetzt, die nur eine Komponente enthalten, so werden überwiegend Produkte mit Kettenlänge gebildet, die ein Vielfaches der Kettenlänge des eingesetzten Eduktes betragen (z.B. beim Einsatz von Propen werden verstärkt Komponenten mit einer Kettenlänge von C₆, C₉ und C₁₂ gebildet). Werden hingegen Olefingemische als Edukte eingesetzt, ergibt sich eine breite Produktverteilung. Die Selektivität zu bestimmten Kettenlängen ist reduziert (Abbildung 7) [17].

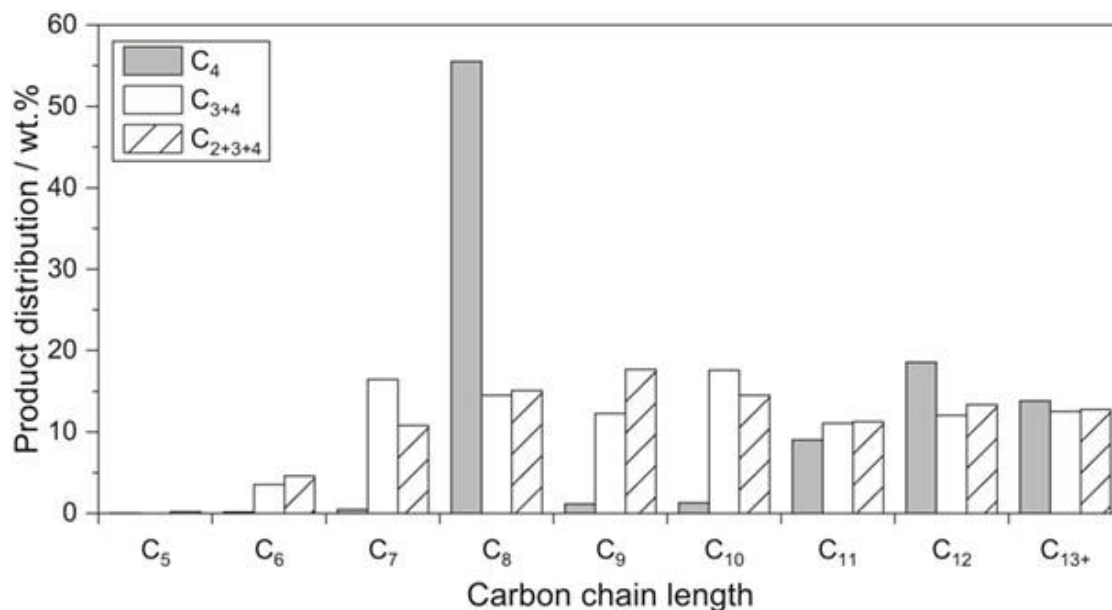


Abbildung 7: Massenanteil der Kohlenwasserstoffe als Funktion der Kettenlänge für verschiedene Feed Zusammensetzungen (Grafik entnommen aus [18], lizenziert unter [CC BY-ND 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nd/4.0/)).

Darüber hinaus haben die Prozessparameter Druck, Temperatur und Verweilzeit einen Einfluss auf die Produktverteilung. Hohe Drücke verschieben die Produktverteilung in Richtung kürzerer Ketten [17, 19]. Des Weiteren begünstigen hohe Verweilzeiten lange Kohlenstoffketten [19]. Niedrige Temperaturen begünstigen die Bildung längerer und verzweigter Produkte in der Produktverteilung doch mit steigender Temperatur nimmt die Selektivität für lange Oligomere ab, da Crackreaktionen stattfinden und kürzere Oligomere gebildet werden [20, 21].

Zur mathematischen Beschreibung der Oligomerisierungsreaktion kann für einkomponentige Eduktströme eine generische Anderson-Flory Schulz-Verteilung verwendet werden (Gleichung (4)). In diesem Kontext beschreibt n die Kettenlänge, W_n die massenbezogene Konzentration, α die



Kettenwachstumswahrscheinlichkeit und x einen Anpassungsparameter. $x = 2$ beschreibt ein Ethen-Ethen, $x = 3$ ein Ethen-Propen, und $x = 4$ ein Propen-Propen-Dimer als leichteste Komponente der Produktverteilung [22].

$$W_n = (n - x - 1)(1 - \alpha)^2 \cdot \alpha^{n-x-2} \quad \text{für } n \geq x \quad (4)$$

4.1.2.3 Handlungsbedarf zur Beschreibung des vorliegenden Prozesses

Wie in den Kapiteln 4.1.2.1 und 4.1.2.2 erläutert, kann die Produktverteilung sowohl des Fischer-Tropsch-Prozesses als auch der Oligomerisierung von einkomponentigen Edukten mithilfe einer (angepassten) Anderson-Flory-Schulz-Verteilung beschrieben werden. Werden jedoch (komplexe) Olefingemische als Edukt eingesetzt, so ist die Beschreibung mithilfe von Gleichung (2) oder (4) nicht mehr zutreffend. Da der Einsatz von Olefingemischen (welche z.B. aus Prozessen wie Methanol-to-Olefins oder DME-to-Olefins stammen können) industriell relevant ist, muss eine neue Gleichung zur Beschreibung der Verteilungen entwickelt werden. Mithilfe einer solchen Modellgleichung kann im nächsten Schritt der Einfluss der Prozessparameter qualitativ und quantitativ beschrieben werden. Zur Entwicklung eines geeigneten Modells zur Beschreibung der Produktverteilung bei der Oligomerisierung wurde zunächst eine strukturierte und systematisch aufgebaute Datenbank erstellt, die 68 Datensätze aus bereits publizierten Studien umfasst (Abbildung 8).

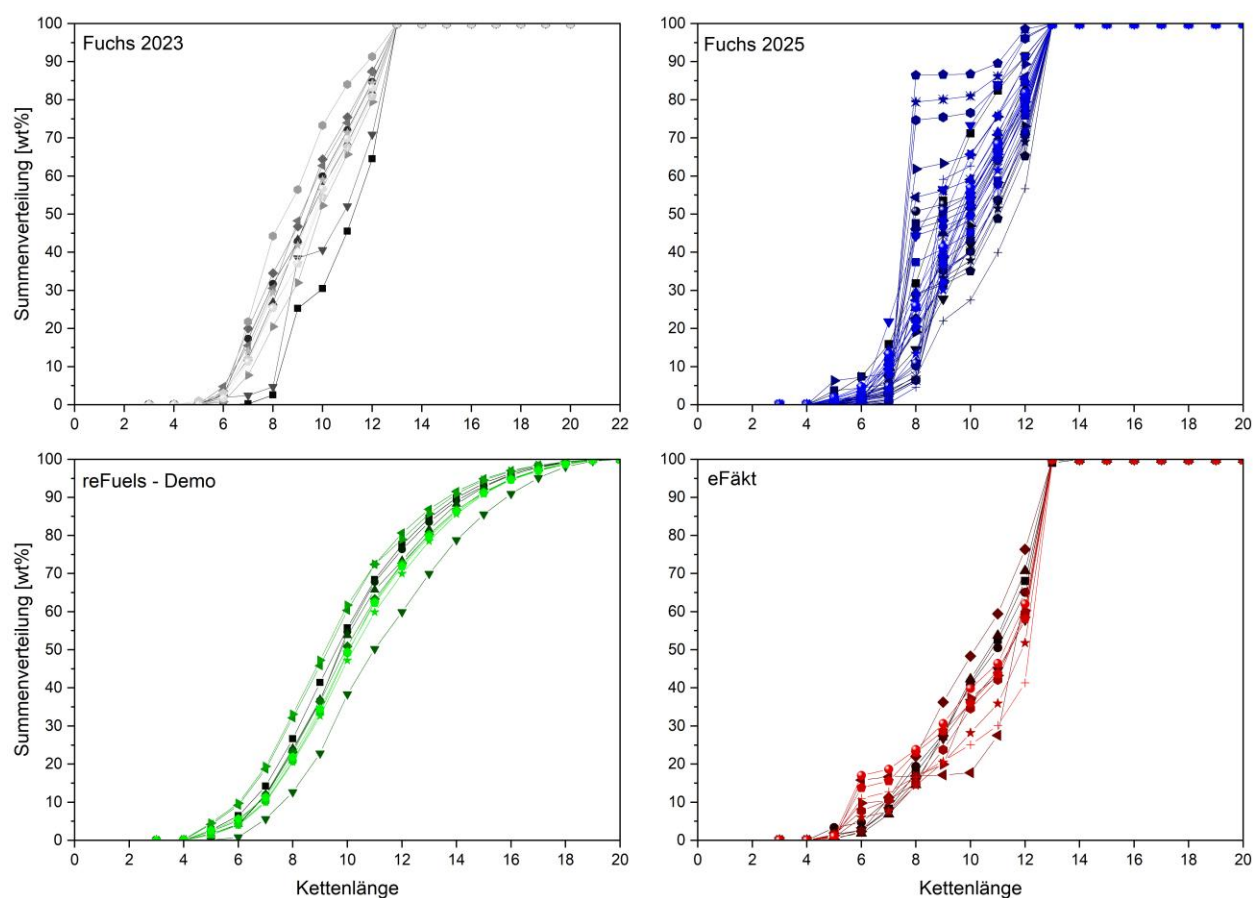


Abbildung 8: In der Datenbank erfasste Produktzusammensetzungen aus vorausgegangenen Projekten⁴ sowie Publikationen [17, 23].

Jeder dieser Datensätze enthält detaillierte Informationen zu den eingesetzten Reaktanden, Katalysatoren, Reaktionsbedingungen (z. B. Temperatur, Druck, Verweilzeit) sowie zur resultierenden Kettenlängenverteilung der Produkte. Die Datenbank bietet damit eine umfassende Grundlage für die Analyse der Zusammenhänge zwischen Prozessparametern und Produktverteilungen. Die dokumentierten Produktverteilungen erfassen in der Regel Kettenlängen bis einschließlich C_{12} . In Einzelfällen lagen jedoch erweiterte Analysedaten bis C_{20} vor, welche durch externe, aufwändige und kostenintensive Auftragsanalytik gewonnen wurden. Um künftig eine größere Unabhängigkeit von solchen externen Analysen zu erreichen und gleichzeitig eine höhere Flexibilität sowie Datenverfügbarkeit im Entwicklungsprozess zu gewährleisten, wurde eine hausinterne Routineanalytik etabliert. Diese ermöglicht eine standardisierte und reproduzierbare Erfassung der

⁴ „Forschungsunterstützte Maßnahmen zur Transformation von Anlagen für klimaneutrale Kraftstoffe (reFuels) in den industriellen Maßstab“; Förderkennzeichen VM5-2426-1 /12/1, gefördert durch das Ministerium für Verkehr Baden Württemberg



Kettenlängenverteilungen über C_{12} hinaus, so dass ebenfalls die Kerosinfraktion (und auch die Dieselfraktion) bewertet werden können. Weitere Einzelheiten zur Analytik finden sich in Abschnitt 4.1.2.4. Im Verlauf des Projekts wurde die ursprüngliche Datenbasis sukzessive um 12 neu generierte Datensätze erweitert. Diese neuen Datensätze erweitern die Parameterbandbreite der Datenbank erheblich, insbesondere im Hinblick auf Variationen der Reaktionstemperatur und der Edukte, wodurch eine Modellierung unter breiteren Prozessbedingungen ermöglicht wird. Die Datengrundlage ermöglicht zunächst eine qualitative Bewertung der Einflüsse verschiedener Prozessparameter auf die resultierenden Produktverteilungen. Aufbauend auf dieser qualitativen Analyse wurde eine quantitative Modellierung angestrebt, mit dem Ziel, verlässliche Vorhersagen über die Produktverteilung unter definierten Reaktionsbedingungen treffen zu können. Diese Modellierung bildet die Grundlage für die gezielte Prozessführung und Produktoptimierung im Kontext der Oligomerisierung.

Da bestehende Modellansätze nicht ausreichend geeignet sind, um die in den Experimenten beobachteten Produktverteilungen adäquat zu beschreiben wurden verschiedene mathematische Ansätze zur Modellierung der Kettenlängenverteilungen untersucht, darunter die Verwendung von Gaußverteilungen, sigmoiden Funktionen sowie eine modifizierte Maxwell-Boltzmann-Verteilung (Gleichung (5)). Die letztgenannte Verteilungsfunktion erwies sich als besonders geeignet, da sie den charakteristischen Verlauf der bei der Oligomerisierung typischerweise auftretenden Dichteverteilung präzise abbildet.

$$W_x = \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{\pi}\alpha}\right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{x e^{-\left(\frac{x^2}{\pi\alpha^2}\right)}}{\alpha} \quad (5)$$

Konkret gibt sie den Anstieg bei niedrigen Kettenlängen, das Maximum im mittleren Kettenlängenbereich sowie den Abfall zu höheren Kettenlängen realistisch wieder. Dadurch ist sie in der Lage, die experimentell bestimmten Verteilungen mit hoher Genauigkeit zu erfassen (Bestimmtheitsmaß $R^2 > 0,85$). Ein weiterer wesentlicher Vorteil dieses Ansatzes liegt in der mathematischen Einfachheit der Modellgleichung, da sie lediglich einen einzigen, physikalisch interpretierbaren Parameter α enthält. Dieser Parameter beeinflusst sowohl die Lage als auch die Breite der Verteilung und steht in direktem Zusammenhang mit den eingesetzten Prozessbedingungen (z. B. Temperatur, Katalysatortyp, Verweilzeit). Somit ermöglicht das Modell eine direkte Korrelation zwischen der Prozessführung und der resultierenden Produktverteilung was vorteilhaft im Hinblick auf eine gezielte Prozessoptimierung und -steuerung ist. Aufgrund dieser Eigenschaften weist die modifizierte Maxwell-Boltzmann-Gleichung eine Ähnlichkeit zu den in Abschnitt 4.1.2.1 und 4.1.2.2 beschriebenen Gleichungsansätzen auf. Gleichung (5) beschreibt die Summenverteilung der Kettenlängen. W_x ist die kumulierte Massenverteilung bis einschließlich der Kettenlänge x ($x = 1, 2, 3, \dots$), „erf“ steht für die Gaußsche Fehlerfunktion (error function) und α ist der Verteilungsparameter. Im Allgemeinen bewirkt eine Erhöhung von α eine Verschiebung des Maximums der Dichteverteilung hin zu höheren Kettenlängen und gleichzeitig eine



Verbreiterung der Verteilung. Mithilfe von Gleichung (5) kann so für jedes Experiment ein α bestimmt werden, mit dem die Produktverteilung passend beschrieben wird (Abbildung 9).

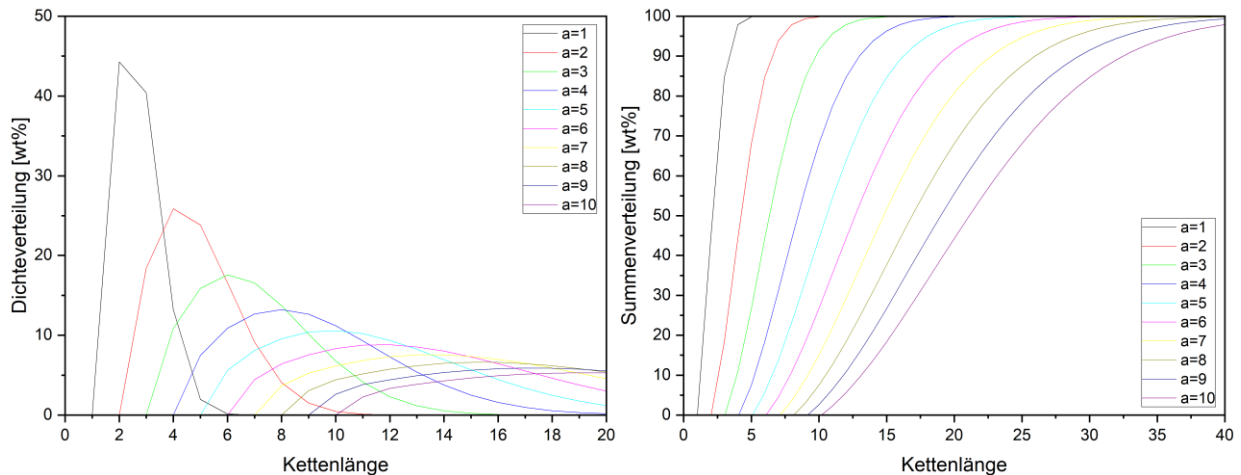


Abbildung 9: Durch die modifizierten Maxwell-Boltzmann-Verteilung modellierte Dichteverteilungen (links) sowie Summenverteilungen (rechts) in Abhängigkeit von α .

Am Beispiel der im Rahmen des Projekt reFuels - Demo durchgeführten Versuche zeigt sich, dass die Modellgleichung eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten Verteilungen aufweist (vgl. Abbildung 10). Die ermittelten α -Werte lagen in diesen Versuchen zwischen 4,3 und 5,2. Die Anpassung der Modellgleichung an die experimentellen Daten ergab ein Bestimmtheitsmaß $R^2 > 0,98$, was die Eignung der Modellierung unterstreicht. Abweichungen zwischen modellierten und experimentellen Werten sind insbesondere für kleine Kettenlängen zu beobachten. Dies ist auf die niedrigen Absolutwerte in diesem Kettenlängenbereich zurückzuführen, wodurch auch kleine Diskrepanzen zu relativ hohen Abweichungen führen.

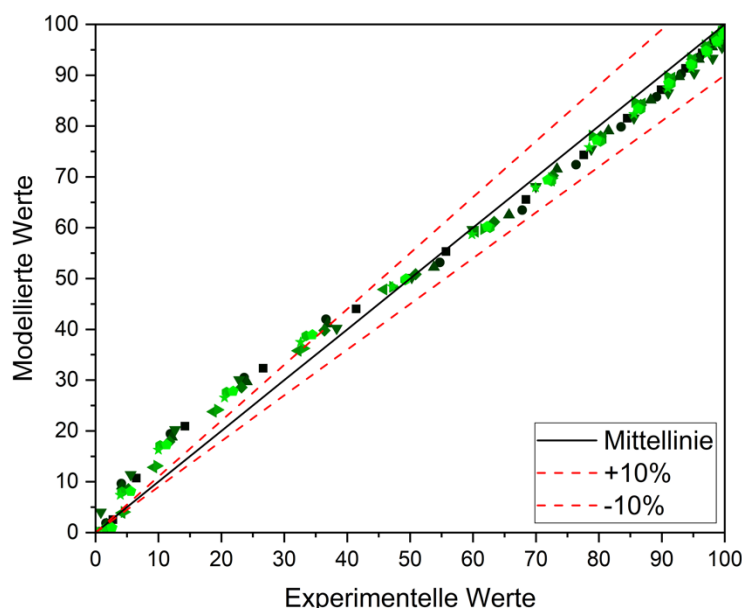


Abbildung 10: Vergleich der experimentell bestimmten sowie der modellierten Verteilungen für die im Projekt reFuels – Demo durchgeführten Versuche.

4.1.2.4 Erweiterung bestehender Analysemethoden zur Charakterisierung isomerenreicher Produktgemische

Die Analyse der Zusammensetzung der flüssigen Produktgemische erfolgte bislang durch einfache Gaschromatographie (GC). Dabei konnten Moleküle bis zu einer Kettenlänge $\leq C_8$ speziesgenau getrennt und quantifiziert werden. Für Moleküle mit Kettenlängen $< C_{12}$ war noch eine Quantifizierung auf Fraktionsebene ohne genaue Speziesidentifikation möglich. Verbindungen mit einer Kettenlänge $\geq C_{12}$ konnten bislang weder getrennt noch quantifiziert werden. Diese Einschränkung stellte in der Vergangenheit kein wesentliches Problem dar, da der Schwerpunkt der Arbeiten auf der Erzeugung und Charakterisierung der Benzinfraktion ($C_5 - C_{10}$) lag. Mit der Neuausrichtung der Prozessentwicklung auf Mitteldestillatfraktionen als Zielprodukt entstand die Notwendigkeit einer Anpassung und Erweiterung der bestehenden Routineanalytik. Nur so können die Produktverteilungen korrekt bestimmt und der Einfluss verschiedener Prozessparameter auf die Zusammensetzung und die physikalisch-chemischen Eigenschaften der Produktfraktionen systematisch und detailliert untersucht werden. Ziel war es, künftig eigenständig, zeitnah und wirtschaftlich Analysenergebnisse zu erzeugen, um Entwicklungszyklen zu verkürzen und Abhängigkeiten von externen Partnern zu reduzieren. Zu diesem Zweck wurden verschiedene Analysemethoden in Zusammenarbeit mit verschiedenen Herstellern umfassend evaluiert und im Hinblick auf die Eignung zur Charakterisierung isomerenreicher Produktgemische wie sie im vorliegenden Prozess anfallen bewertet (siehe Tabelle 1).

Tabelle 1: Übersicht über die bewerteten Analysemethoden sowie Ergebnis der Bewertung.

| Analysemethode | Kontaktierte Firmen | Bewertung |
|---|---|--|
| Gaschromatografie (GC-FID) | IKFT-intern Agilent Technologies | Erweiterbar für Analyse der Kerosinfraktion. Analyse des Rohprodukts bzw. der Dieselfraktion nicht möglich. |
| Gaschromatografie (GC) mit Massenspektrometrie (MS) | IKFT-intern | Geeignet zur qualitativen Identifikation einzelner Spezies innerhalb der Benzin- bzw. Kerosinfraktion. Analyse des Rohprodukts bzw. der Dieselfraktion nicht möglich. Keine Quantifizierung möglich. |
| Reformulyzer M4 (spezielle GC) | Petroleum Analyzer Company (PAC) | Ausschließlich für die Benzinanalytik geeignet; für Mitteldestillate nicht anwendbar. Zusätzlicher Informationsgewinn durch Datenbankgestützte Berechnung von physikalischen und Anwendungseigenschaften. |
| Zweidimensionale Gaschromatographie (GC×GC) | Agilent Technologies Petroleum Analyzer Company (PAC) ASG Analytik-Service AG | Geeignet für die detaillierte Analyse von Mitteldestillaten, geeignete Messmethoden in Literatur vorhanden, Nachweis durch Testung erbracht. |
| Gel-Permeations-Chromatographie (GPC) | Malvern Panalytical Agilent Technologies | Zur Analyse isomerenreicher Produktgemische im Mitteldestillat Bereich nicht geeignet. |
| Hochleistungs-Flüssigchromatographie (HPLC) | Agilent Technologies | Zur Analyse isomerenreicher Produktgemische im Mitteldestillat Bereich nicht geeignet. |
| Simdis XLNC (Spezielle Siedeanalyse) | Petroleum Analyzer Company (PAC) | Geeignet zur Bewertung von Siedeverhalten der Proben; erlaubt jedoch keine Aussagen zur molekularen Zusammensetzung. |

Verschiedene Anbieter, darunter Agilent Technologies, PAC und ASG, empfahlen unabhängig voneinander die Anschaffung eines zweidimensionalen Gaschromatographie-Systems (GC×GC), das gegenüber der klassischen eindimensionalen GC-Analytik eine deutlich höhere Trennleistung bietet. Umfangreiche Tests der vorgeschlagenen Systeme bestätigten die Eignung der GC×GC-Technologie für die Analyse der Produktgemische des untersuchten Prozesses. Alternative Analysemethoden, darunter GPC, HPLC sowie eine spezielle Siedeanalyse und ein GC System der Firma PAC wurde ebenfalls erprobt, haben sich jedoch als ungeeignet erwiesen. Nach intensiver Evaluierung der verschiedenen

Geräteoptionen wurde schließlich ein GCxGC-System der Firma Agilent beschafft und erfolgreich in Betrieb genommen. Abbildung 11 zeigt den Vergleich zwischen der bisherigen, eindimensionalen GC-Analytik sowie der neuen zweidimensionalen GCxGC Analytik für ein Rohprodukt. Ebenso dargestellt ist die Analyse der Kraftstofffraktionen nach der Destillation zur Veranschaulichung der Trennleistung in Abhängigkeit von der Kettenlänge.

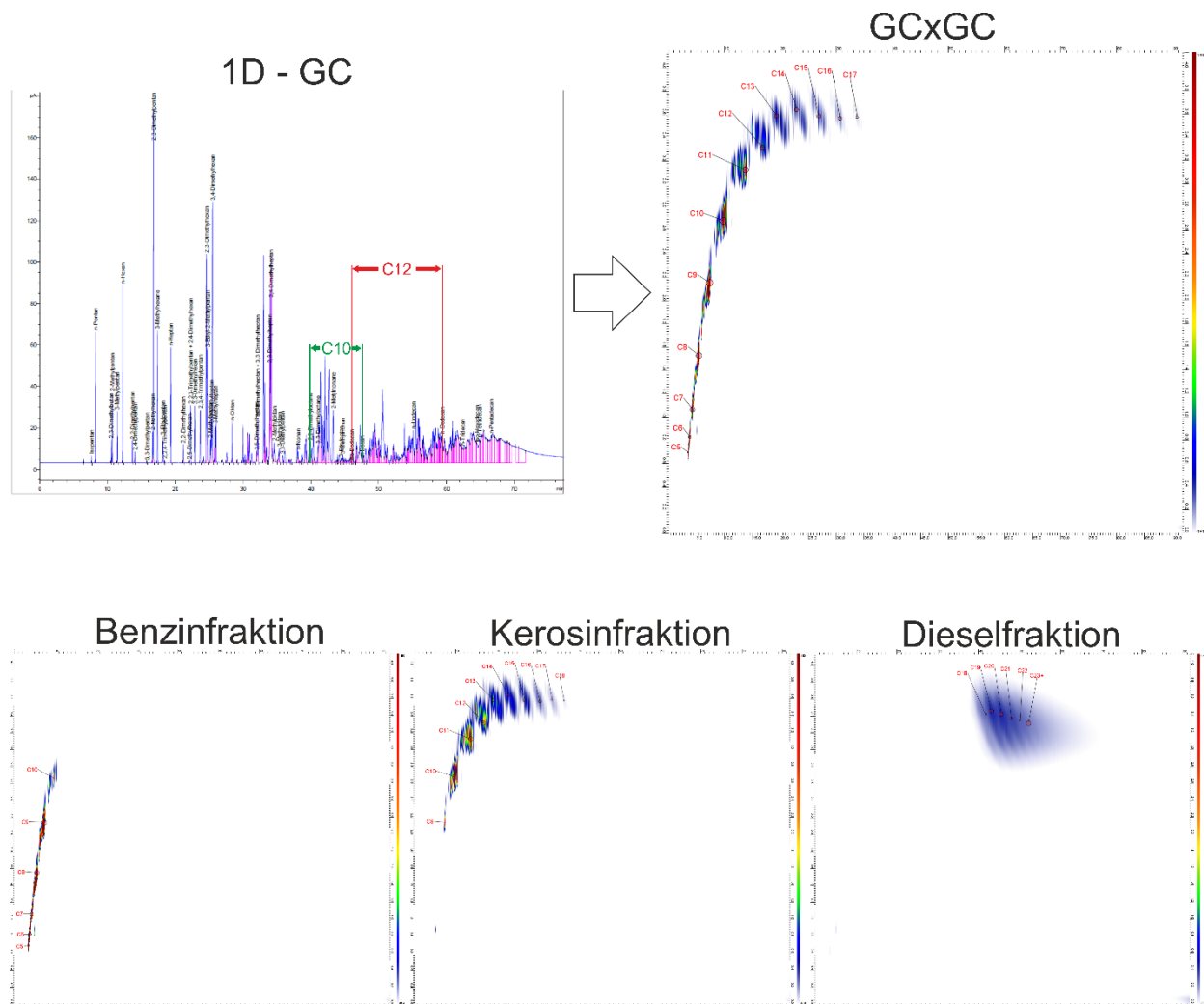


Abbildung 11: Gegenüberstellung von eindimensionaler (oben links) sowie zweidimensionaler GC Analytik (oben rechts) für ein hydriertes Rohprodukt. Analyse der verschiedenen Kraftstofffraktionen nach Produktaufbereitung durch Destillation und Hydrierung (unten).

Zur Analyse wurde eine von Agilent entwickelte standardisierte Methode speziell für die Analyse von konventionellen und synthetischen Flugkraftstoffen mittels GCxGC nach ASTM D8396 verwendet [24]. Durch die Anwendung dieser standardisierten Methode kann die Vergleichbarkeit mit Analysen, die an

anderen Stellen wie Forschungseinrichtungen und externen Analyselaboren durchgeführt wurden, gewährleistet werden, was im Hinblick auf zukünftige Forschungsprojekte und Kooperationen relevant ist. Im direkten Vergleich der Rohprodukt Analyse zeigt sich, dass die erhöhte Trennleistung des GCxGC-Systems eine saubere Trennung und somit Analyse der Kettenlängen bis C_{17} erlaubt. Das bisher verwendete eindimensionale GC-System dagegen ist grundsätzlich nur für Analysen bis C_{12} geeignet, wobei bereits ab C_{10} Überlagerungen der Kettenlängen auftreten, die bei der genauen Bestimmung der Produktverteilungen problematisch sind (vgl. Abbildung 11 oben links). Die Analyse der Produktfraktionen nach Destillation zeigt, dass sowohl die Benzin- als auch die Kerosinfraktion vollständig aufgetrennt und somit analysiert werden können. Für die Dieselfraktion ist eine Trennung bis etwa C_{22} zu erkennen, allerdings findet aufgrund der Vielzahl an Strukturisomeren in diesem Kettenlängenbereich eine Überlagerung statt die eine Analyse erschwert. Im Rahmen zukünftiger Arbeiten könnte noch eine Optimierung der Methode durch leichte Anpassung der Flussrate des Trägergases bzw. der Heizrate erprobt werden um die Trennleistung weiter zu erhöhen und die Analytik der Dieselfraktion zu verbessern. Insgesamt lässt sich festhalten, dass die Anschaffung des GCxGC-Systems eine deutliche Verbesserung der analytischen Fähigkeiten bei der Untersuchung langkettiger, isomerenreicher Produktgemische darstellt und somit einen wertvollen Beitrag zur Neuausrichtung der Prozessentwicklung auf Mitteldestillatfraktionen als Zielprodukte leistet.

4.2. A2: Sensitivitäten und Konsequenzen errechnen

4.2.1.1 Qualitativer Einfluss der Prozessparameter auf α

Es wurde zunächst eine qualitative Analyse des Einflusses einzelner Prozessparameter auf den Wert α durchgeführt. Basierend auf Literaturdaten wurden die relevanten Einflussgrößen identifiziert, darunter die Reaktionstemperatur (T), der Druck (p), die Verweilzeit (ausgedrückt als Weight Hourly Space Velocity, WHSV), der Katalysator bzw. der Si-Anteil im Katalysator (Si) sowie die Zusammensetzung des Eduktgemischs. Letztere wurde durch die mittlere Eduktkettenlänge, bezeichnet als C_{quer} , charakterisiert. In einer systematischen Auswertung der Datenbank wurden vergleichbare Datensätze identifiziert, die Rückschlüsse auf den Einfluss der jeweiligen Parameter auf α zulassen. Diese Datensätze sind in Abbildung 12 dargestellt. Zur besseren Vergleichbarkeit wurde innerhalb jeder Datenreihe eine Normierung des variierten Prozessparameters vorgenommen.

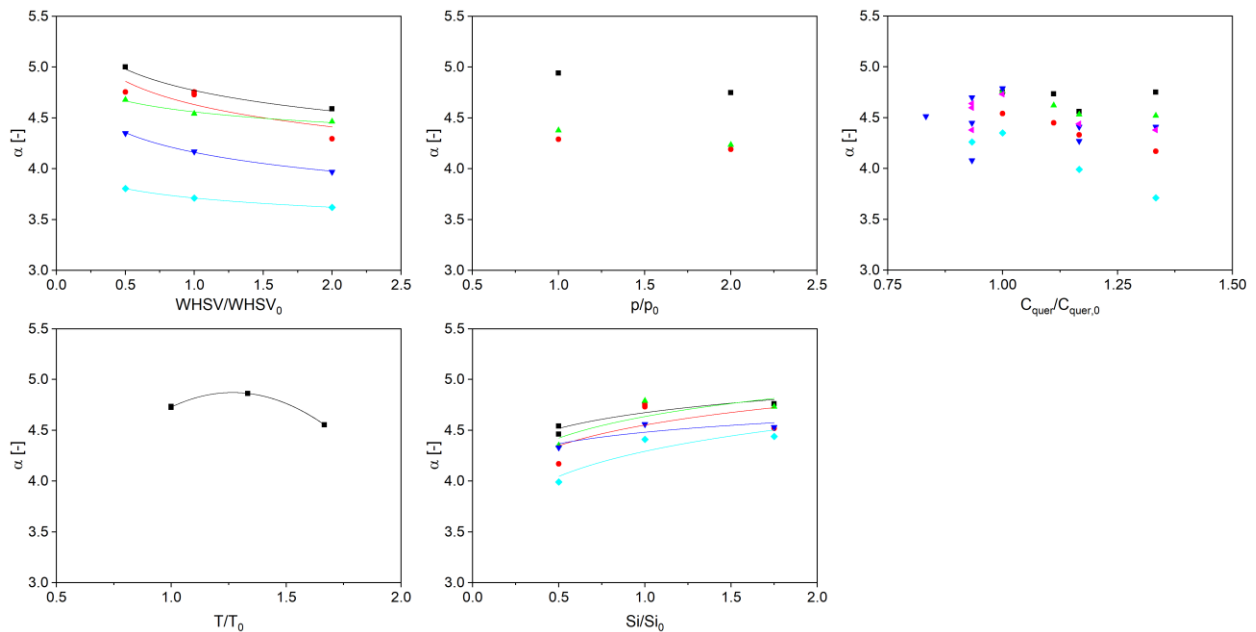


Abbildung 12: Qualitativer Einfluss der Prozessparameter auf α .

Basierend auf den verfügbaren Daten kann der Einfluss der Prozessparameter Temperatur (T), Druck (p) und Verweilzeit (WHSV) auf α eindeutig beschrieben werden. Mit zunehmender WHSV, also einer abnehmenden Verweilzeit, wird eine Reduktion von α beobachtet. Dieser Zusammenhang ist in mehreren Versuchsreihen konsistent erkennbar. Die Folge ist eine verstärkte Bildung kürzerer Ketten und eine Verengung der Produktverteilung. Diese Beobachtung stimmt mit den Ergebnissen von Fuchs et al. [23] überein, die bei der Homo-Oligomerisierung von Buten und Propen eine Abnahme der C_{13+} -Produktfraktion mit steigender WHSV aufzeigen. Der beobachtete Zusammenhang kann mathematisch durch einen Potenzansatz beschrieben werden, wie durch die Fitlinien dargestellt. Auch eine Erhöhung des Reaktionsdrucks führt zu einer Abnahme von α , was ebenfalls in den Versuchen von Fuchs et al. [18] beobachtet wurde. Der Einfluss des Drucks kann aufgrund der fehlenden Varianz in den vorliegenden Daten allerdings nicht detailliert beschrieben werden. Im Gegensatz dazu zeigt die Temperatur einen nichtmonotonen Einfluss: Mit steigender Temperatur nimmt α zunächst zu und erreicht ein Maximum bei ca. $T = 160^\circ\text{C}$. Bei weiteren Temperaturerhöhungen sinkt α wieder deutlich ab. Ein derartiges Verhalten wurde auch von Betz et al. beschrieben, die diesen Trend auf die Deaktivierung des Katalysators durch Ablagerung höhermolekularer Oligomere zurückführen [25]. Die temperaturabhängige Änderung von α lässt sich durch ein Polynom zweiten Grades annähern. Der Si-Anteil im Katalysator zeigt ebenfalls einen deutlichen Einfluss auf α . Eine Erhöhung des Siliziumanteils führt zunächst zu einem deutlichen Anstieg von α . Eine weitere Erhöhung hat hingegen nur einen geringen Effekt, in einigen Experimenten ist sogar eine leichte Abnahme von α erkennbar. Auch dieser Zusammenhang kann durch einen Potenzansatz angenähert werden. Fuchs et al. begründen diesen Effekt mit der Verfügbarkeit von sauren bzw. katalytisch aktiven Zentren in den verschiedenen



Katalysatoren [26]. Der Einfluss der Eduktzusammensetzung hingegen ist nicht eindeutig zu erfassen. Tendenziell ist bei zunehmender Eduktkettenlänge eine leichte Abnahme von α zu beobachten. Das Ausmaß dieser Abnahme ist jedoch von weiteren Parametern abhängig, unter anderem vom Siliziumanteil im Katalysator. Eine mögliche Erklärung für diesen Zusammenhang könnte das verfügbare Porenvolumen der Katalysatoren liefern. Aufgrund des beobachteten Verhaltens einer Katalysatordeaktivierung durch Verblockung der Poren durch gebildete langkettige Oligomere [25] kann ein signifikanter Einfluss des Porenvolumens auf die Fähigkeit von Katalysatoren hohe α Werte zu erreichen abgeleitet werden.

4.2.1.2 Quantitativer Einfluss der Prozessparameter auf α

Um die in Kapitel 4.2.1.1 identifizierten Zusammenhänge in ein quantitatives Modell zu überführen, wurde ein modifizierter Potenzansatz zur Berechnung von α auf Basis der Prozessparameter entwickelt. Ziel des Modells ist die mathematische Beschreibung von α als Funktion relevanter Prozessgrößen (z. B. Temperatur, WHSV, Druck, Si-Anteil). Die zugrunde liegende Modellgleichung ist Gleichung (6).

$$\alpha = b_1 * \left(-3 * \left(\frac{T}{T_0} \right)^2 + 7,68 * \left(\frac{T}{T_0} \right) \right) * \left(\frac{p}{p_0} \right)^{b_2} * \left(\frac{Si}{Si_0} \right)^{b_3} * \left(\frac{WHSV}{WHSV_0} \right)^{b_4} * \left(\frac{C_{quer}}{C_{quer,0}} \right)^{b_5} * QE \quad (6)$$

Hierbei werden die Parameter p , Si , $WHSV$ und C_{quer} mithilfe eines Potenzansatzes eingebunden ($WHSV_0 = 4 \text{ h}^{-1}$, $T_0 = 120 \text{ °C}$, $p_0 = 40 \text{ bar}$, $Si_0 = 1$, und $C_{quer,0} = 3$). Der Einfluss der Temperatur wurde separat anhand der vorhandenen Datenpunkte mittels eines Polynoms zweiten Grades ausgedrückt. Zusätzlich zu den Einflüssen der einzelnen Parameter wird zudem ein Term QE eingebunden (Gleichung (7)), welcher mögliche Quereinflüsse beinhaltet und wie folgt aufgebaut ist.

$$QE = \exp \left(b_6 * \left(\frac{p}{WHSV} \right) * \left(\frac{WHSV_0}{p_0} \right) + b_7 * \left(\frac{WHSV}{C_{quer}} \right) * \left(\frac{C_{quer,0}}{WHSV_0} \right) + b_8 * \left(\frac{Si}{C_{quer}} \right) * \left(\frac{C_{quer,0}}{Si_0} \right) \right) \quad (7)$$

Die Wahl einer exponentiellen Darstellung für QE erweist sich als geeignet, um nichtlineare sowie verstärkende oder abschwächende Wechselwirkungen realitätsnah zu erfassen. Darüber hinaus gewährleistet diese Formulierung die Positivität der Modellwerte und trägt zur numerischen Stabilität bei stark variierenden Parameterverhältnissen bei. Im Rahmen der Modelloptimierung wurden die

enthaltenen Quereinflussterms auf signifikante Beiträge reduziert. Die große Anzahl der Quereinflüsse der Zusammensetzung des Eduktgemischs C_{quer} mit den anderen Prozessparametern unterstreicht dabei die Wichtigkeit dieses Prozessparameters sowie die allgemeine Notwendigkeit einer detaillierten Betrachtung der einzelnen Prozessschritte bei der Verknüpfung mehrerer Prozesse. Zur Quantifizierung der jeweiligen Einflussstärken werden die Parameter b_1 bis b_8 mittels nichtlinearer Regressionsverfahren optimiert. Die Modellanpassung erfolgt unter Einsatz der Software MATLAB mit dem Ziel, eine bestmögliche Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten α -Werten zu erzielen. Abbildung 13 zeigt den Vergleich von experimentell bestimmten sowie durch die Anpassung berechneten α -Werten sowie die absoluten Abweichungen für alle in der Anpassung verwendeten Datenpunkte.

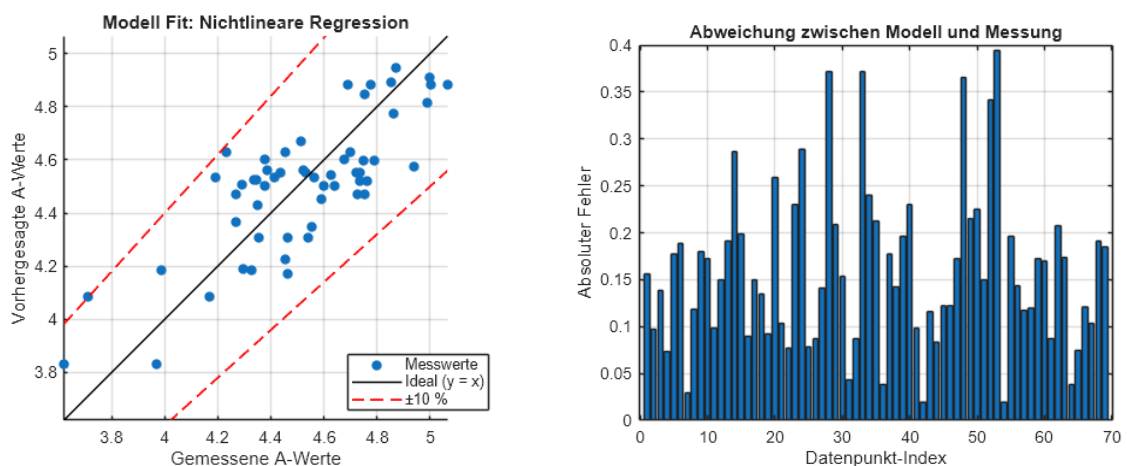


Abbildung 13: Vergleich der experimentellen Daten und der modellierten Werte für α

Wie aus Abbildung 13 ersichtlich ist, bildet das entwickelte Modell den experimentell bestimmten Verteilungsparameter α mit hoher Genauigkeit ab. In sämtlichen betrachteten Fällen konnte eine Abweichung von weniger als 10 % erreicht werden und die maximale absolute Abweichung beträgt weniger als 0,4. Das Bestimmtheitsmaß R^2 liegt bei 0,6, was bedeutet, dass 60 % der Varianz des Verteilungsparameters durch das Modell erklärt werden können. Dieses Ergebnis ist als moderat gut einzustufen, weist jedoch darauf hin, dass ein relevanter Teil der Varianz durch weitere, im Modell nicht berücksichtigte Faktoren bzw. unbekannte und somit nicht abgebildete Quereinflüsse verursacht wird. Alle einbezogenen Regressionsparameter sind statistisch signifikant ($p < 0,05$) was auf die Relevanz der gewählten Modellstruktur hinweist. Die angepassten Modellparameter zur Bestimmung von α sind in Tabelle 2 aufgeführt.

Tabelle 2 Angepasste Modellparameter zur Bestimmung von α auf Basis der Prozessparameter.

| Parameter | Prozessparameter | Wert |
|-----------|---------------------------------------|---------|
| b_1 | - | 0,4653 |
| b_2 | Druck | 0,0527 |
| b_3 | Si | 0,2392 |
| b_4 | WHSV | -0,2762 |
| b_5 | C_{quer} | -0,1634 |
| b_6 | Quereinfluss Druck - WHSV | -0,0618 |
| b_7 | Quereinfluss WHSV - C_{quer} | 0,1285 |
| b_8 | Quereinfluss Si - C_{quer} | -0,0050 |

Die ermittelten Exponenten b_2 bis b_5 bestätigen im Wesentlichen die in Abschnitt 4.2.1.1 qualitativ beschriebenen Zusammenhänge: So führt ein Anstieg der Parameter WHSV sowie C_{quer} zu einer Verringerung von α , was sich in den negativen Vorzeichen von b_4 und b_5 widerspiegelt. Ebenso wurde ein positiver Einfluss des Siliziumgehalts festgestellt, entsprechend ist b_3 größer Null. Im Gegensatz zur qualitativen Analyse zeigt das Modell jedoch keine negative Korrelation zwischen dem Druck und α (b_2). Dieser scheinbare Widerspruch könnte auf eine ungleiche Verteilung der experimentellen Daten zurückzuführen sein, bei der Messungen unter 40 bar Druck gegenüber denen bei 20 bar deutlich überrepräsentiert sind. Diese Ungleichverteilung ist aus Abbildung 6 nicht unmittelbar ersichtlich, könnte jedoch das Modellverhalten beeinflussen. Ebenso hat an dieser Stelle noch der Quereinfluss von Druck und WHSV (b_6) einen Einfluss, welcher den direkten Einfluss des Druckes möglicherweise überdeckt

Mit dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Modell, das auf einer modifizierten Maxwell-Boltzmann-Gleichung in Verbindung mit einem empirisch parametrisierten Verteilungsparameter α basiert, ist es möglich, die Produktverteilung im betrachteten Prozess quantitativ vorherzusagen. Die Modellierung berücksichtigt dabei die Prozessparameter Temperatur, Druck, Katalysator, WHSV sowie die Zusammensetzung des Eduktgemischs C_{quer} . Innerhalb des untersuchten Parameterraums ($T = 120 - 200 \text{ °C}$, $p = 20 - 40 \text{ bar}$, $\text{Si} = 20-70$, $\text{WHSV} = 2 - 8 \text{ h}^{-1}$, $C_{\text{quer}} = 2,5 - 4,0$) liefert das Modell zuverlässige Vorhersagen über zu erwartende Produktverteilungen. Da der Verteilungsparameter α in direktem Zusammenhang mit der Kettenlängenverteilung der gebildeten Kohlenwasserstoffe steht, können daraus auch Rückschlüsse auf die relativen Anteile der Produktfraktionen Benzin, Kerosin oder Diesel gezogen werden. Dies ermöglicht eine gezielte Prozessführung je nach gewünschter Produktzusammensetzung.

4.2.1.3 Sensitivität für Synthese

Auf Grundlage der Parametrisierung des Verteilungsparameters α kann der Einfluss einzelner Prozessparameter in einem Sensitivitätsdiagramm (siehe Abbildung 14) veranschaulicht werden. Dieses erlaubt eine quantitative Bewertung der relativen Änderung von α in Abhängigkeit von gezielten Variationen der Prozessbedingungen. Als Referenzpunkt für die Sensitivitätsanalyse wurden folgende Bedingungen gewählt: $T = 120\text{ °C}$, $p = 40\text{ bar}$, $Si = 40$, $WHSV = 4\text{ h}^{-1}$ und $C_{\text{quer}} = 3$. Dies entspricht einem α_{Referenz} von 4,7.

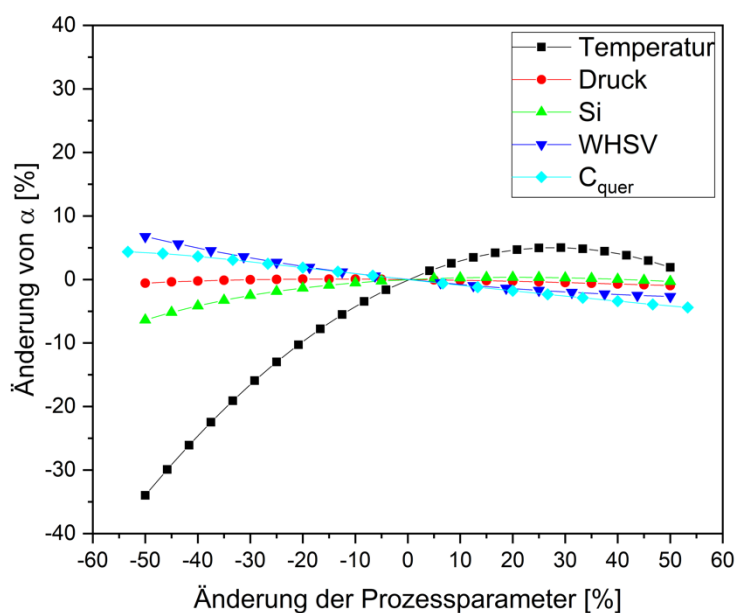


Abbildung 14: Änderung von α bei Änderung der Prozessparameter.

Die Sensitivitätsanalyse zeigt, dass insbesondere die Temperatur einen signifikanten Einfluss auf den Wert von α ausübt. Eine Erhöhung der Temperatur um 50% führt unter sonst konstanten Bedingungen lediglich zu einer marginalen Zunahme von α um etwa 1,9%, während eine Temperaturabsenkung um 50% eine deutliche Reduktion von α um etwa 34% bewirkt. Dies bedeutet eine asymmetrische Sensitivität gegenüber Temperatureinflüssen. Die mittlere Eduktkettenlänge (C_{quer}) sowie die WHSV wirken sich ebenso deutlich auf den Verteilungsparameter aus. Wie aufgrund der negativen Parameter b_4 und b_5 in Tabelle 2 bereits zu vermuten ist zeigt die Analyse, dass diese Prozessparameter negativ mit α korrelieren.

Durch die Modellierung der Kettenlängenverteilung lässt sich bei bekannten Destillationsschnitten in der Produktaufbereitung auch der Massenanteil verschiedener Produktfraktionen berechnen, beispielsweise

Benzin ($\leq C_8$), Kerosin ($C_9 - C_{18}$) und Diesel ($\geq C_{11}$). Abbildung 15 stellt die Ausbeute an Produktfraktionen in Abhängigkeit des Verteilungsparameter α dar. Im Vergleich mit den experimentell bestimmten Verteilungen wird ersichtlich, dass das Modell die realen Werte mit guter Genauigkeit vorhersagen kann. Abweichungen treten insbesondere am Rand des bisher betrachteten Bereichs für α von 1,6 bis 5,2 sowie für den Anteil der Dieselfraktion auf, welcher systematisch überschätzt wird. Um α und damit die Produktfraktionen gezielt einstellen zu können, wird im Folgenden der Einfluss der Prozessparameter auf α und damit auch auf die Produktfraktionen analysiert und beschrieben.

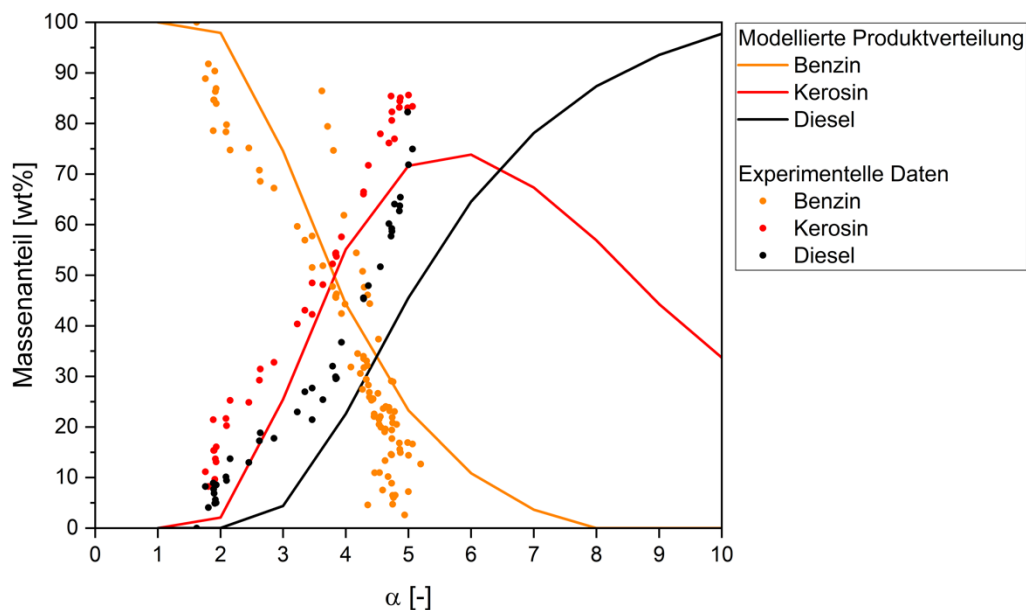


Abbildung 15: Produktanteile in Abhängigkeit von α (Linien: Modell, Punkte: Experimentelle Daten).

Wie aus Abbildung 15 hervorgeht, ist eine maximale Kerosinausbeute bei Werten von $\alpha \approx 5$ bis 6 zu erwarten. Um ausgehend vom Referenzwert $\alpha_{\text{Referenz}} = 4,7$ eine Erhöhung von α zu erreichen und somit die Kerosinausbeute zu maximieren, bietet sich eine gezielte Variation der Prozessparameter an. Beispielsweise kann durch Absenkung der WHSV auf 1 h^{-1} , eine moderate Temperaturerhöhung auf $T = 150 \text{ °C}$ sowie eine Drucksenkung auf $p = 30 \text{ bar}$ eine Steigerung von α um 19,4% auf 5,5 erzielt werden. Eine weitere Reduktion des Drucks auf 20 bar sowie der WHSV auf $0,5 \text{ h}^{-1}$ erlaubt sogar eine Erhöhung von α auf 6,0, was insbesondere dann relevant ist, wenn die Erzeugung von schweren Fraktionen wie Diesel als zusätzliches Produkt erwünscht ist. Soll hingegen die Produktion von kurzkettigen Kohlenwasserstoffen zur Erzeugung von Benzin favorisiert werden, ist eine Reduktion von α auf Werte im Bereich von 1 bis 3 anzustreben. Dies lässt sich beispielsweise durch die Kombination einer Reduktion der Temperatur auf 80 °C , einer Druckerhöhung auf 80 bar, einer Reduktion der WHSV auf $0,5 \text{ h}^{-1}$, eines Katalysators mit reduziertem Si-Anteil sowie einer Erhöhung der mittleren Eduktkettenlänge



auf C_{quer} auf 4 realisieren. Unter diesen Bedingungen würde sich rechnerisch ein α -Wert von 2,4 ergeben, was einer Reduktion um 48% entspricht.

Die modellierten Massenanteile der Kerosinfraktion am Rohprodukt sowie die Kenntnis der genauen Zusammensetzung dieser Fraktion erlaubt im Hinblick auf die Produktaufbereitung auch eine Berechnung des zur Hydrierung der Kerosinfraktion benötigten Wasserstoffs. Abbildung 16 zeigt den Wasserstoffbedarf der Hydrierung über α bezogen auf die erzeugte Menge an Rohprodukt bzw. die Kerosinfraktion.

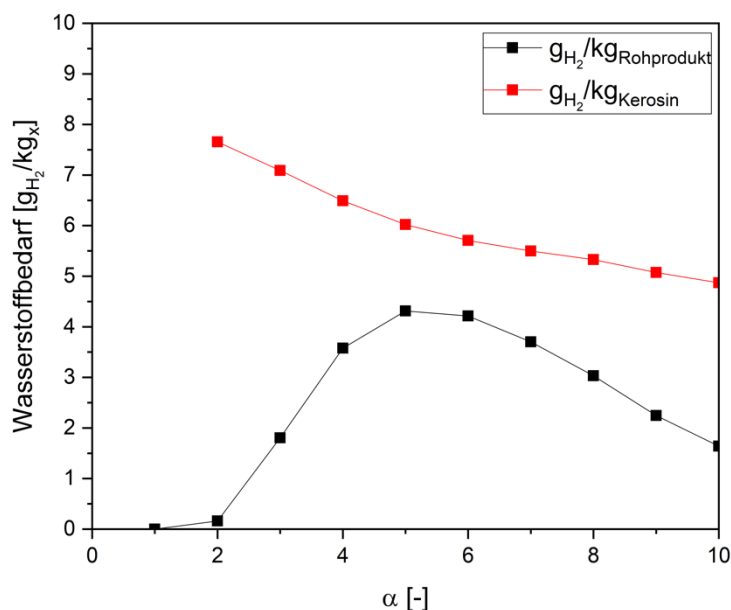


Abbildung 16: Wasserstoffbedarf zur Hydrierung der Kerosinfraktion in der Produktaufbereitung über α bezogen auf die Rohproduktmenge (schwarz) sowie die Kerosinfraktion (rot)

Die Darstellung des Wasserstoffbedarfs bezogen auf die erzeugte Menge an Rohprodukt folgt qualitativ dem Produktanteil von Kerosin im Rohprodukt, da größere Mengen an Kerosin erwartungsgemäß eine Steigerung des Wasserstoffbedarfs zur Folge haben. Der maximale Bedarf von 4,3 $g_{H_2}/kg_{\text{Rohprodukt}}$ ist daher bei einem α von 5, also im Bereich der maximalen Kerosinausbeute, zu finden. Die Darstellung des Wasserstoffbedarfs bezogen auf die erzeugte Kerosinmenge illustriert als sekundären Effekt die Auswirkung der Kettenlängenverteilung im Produkt. Da höhere Werte von α einen Anstieg der durchschnittlichen Kettenlänge mit sich bringen und Wasserstoff zur Hydrierung von Olefinen äquimolar verbraucht wird, sinkt folglich der massenbezogene Bedarf. Da eine Änderung der Kettenlängenverteilung allerdings auch eine Veränderung der Anwendungseigenschaften des Kraftstoffs mit sich bringt, dürfte dieser Effekt im Kontext der Optimierung der Prozessführung eine untergeordnete Rolle spielen.



Auf Basis dieser Modellierung lassen sich weiterhin Vorhersagen zur Effizienz des Prozesses treffen. Unter Annahme derselben Produktaufbereitung wie in Abbildung 15 dargestellt (Benzin $\leq C_8$, Kerosin $C_9 - C_{18}$ und Diesel $\geq C_{11}$) kann mit Hilfe der modellierten Kettenlängenverteilungen die Verteilung des Kohlenstoffs sowie des Energiegehalts berechnet werden. Diese Verteilung entspricht unter Annahme eines vollständigen Umsatzes der Einsatzstoffe den auf die Einsatzstoffe bezogenen Ausbeuten für die jeweiligen Produktfraktionen, so dass die Prozesseffizienz im Hinblick auf die Erzeugung der jeweiligen Zielprodukte bewertet werden kann. Abbildung 17 zeigt die berechneten Ausbeuten der Produktfraktionen bezogen auf Kohlenstoff- und Energiegehalt für die im vorangegangenen Absatz diskutierten Betriebspunkte. Die Umrechnung von Kettenlängenverteilungen in Kohlenstoff- und Energiegehalt erfolgt dabei auf Basis der molekularen Struktur von Olefinen sowie der nach der Methode von Nelson und Seybold aus der Molekülstruktur berechneten Heizwerte [27].

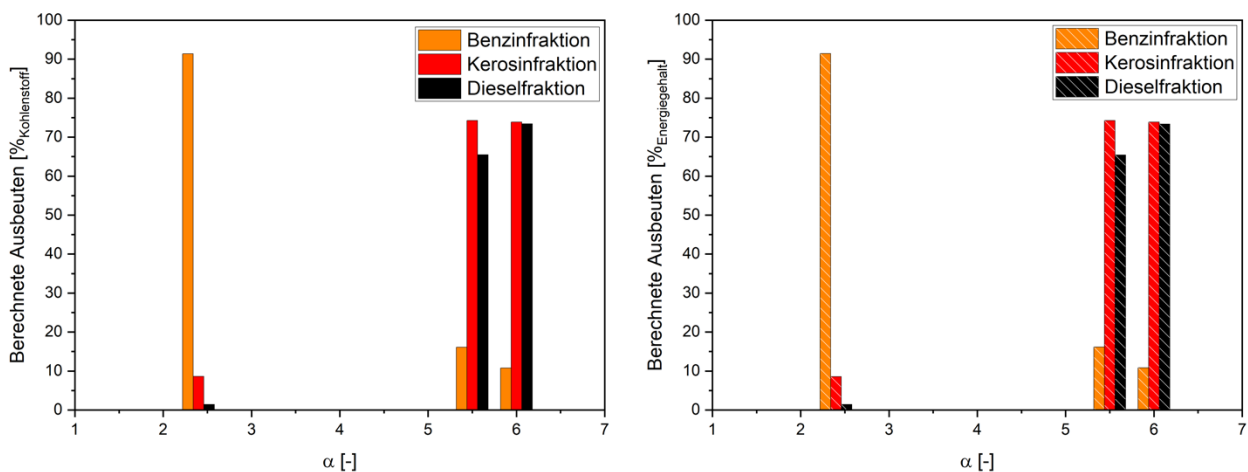


Abbildung 17: Berechnete maximale Kohlenstoff- und Energiegehalt-Ausbeuten für die Kraftstoff-Fraktionen bei den Betriebspunkten $\alpha = 2,4$ (Zielprodukt: Benzin), $\alpha = 5,5$ (Zielprodukt: Kerosin) und $\alpha = 6,0$ (Zielprodukt: Kerosin und Diesel).

Der Vergleich der beiden Graphen zeigt zunächst, dass die Ausbeuten in Bezug auf Kohlenstoff- und Energiegehalt wie erwartet stark korrelieren. Für den Betriebspunkt mit dem Zielprodukt Benzin bei $\alpha = 2,4$ sind laut der Berechnungen hohe Ausbeuten von etwa 90% möglich, was auf eine hohe Effizienz für die Erzeugung von Benzin hinweist. Bei den Betriebspunkten zur Erzeugung von Kerosin bzw. Diesel ($\alpha = 5,5$ und $\alpha = 6,0$) liegen die erzielbaren Ausbeuten mit maximal 74% für Kerosin und 73% für Diesel etwas geringer. Dies lässt sich durch die zunehmende Breite der Produktverteilungen bei höheren Werten von α erklären. Diese Verteilungen beziehen sich allerdings auf einen einzelnen Durchgang durch den Reaktor, wie es in der aktuellen Laboranlage der Fall ist. Im Fall einer industriellen Produktionsanlage wäre von einer optimierten Prozessführung z.B. mit mehreren Reaktionsstufen und Recyclingströmen auszugehen, was mit einer Steigerung der Ausbeute an Zielprodukt und damit der Effizienz verbunden wäre.



Somit zeigt sich, dass das entwickelte Modell eine flexible und präzise Möglichkeit bietet, die Produktverteilung im Hinblick auf verschiedene Zielfraktionen allein auf Basis modellgestützter Simulationen gezielt zu steuern, ohne experimentellen Aufwand. Dies unterstreicht das Potenzial des Modells als Werkzeug zur Prozessoptimierung und zur effizienten Anpassung der Produktzusammensetzung an sich ändernde Markt- oder Anforderungserfordernisse. Die Anwendung des Modells beschränkt sich derzeit jedoch auf den empirisch abgedeckten Bereich. Eine Extrapolation über diesen Bereich hinaus ist prinzipiell denkbar, jedoch mit Unsicherheiten behaftet. Insbesondere ist zu erwarten, dass außerhalb der untersuchten Parametergrenzen neue Einflussfaktoren oder nichtlineare Wechselwirkungen auftreten können, die vom aktuellen Modell nicht erfasst werden. Für eine belastbare Aussage über die Extrapolierbarkeit sind daher weiterführende experimentelle Studien erforderlich, welche die Modellgrenzen validieren und gegebenenfalls eine Erweiterung oder Modifikation der bestehenden Modellstruktur ermöglichen. Langfristig bietet das Modell eine wertvolle Grundlage zur simulationsgestützten Prozessoptimierung. So könnte es beispielsweise in Kombination mit ökonomischen oder ökologischen Zielgrößen in Optimierungsalgorithmen eingebunden werden, um Produktionsbedingungen effizient und zielgerichtet auszulagern.

4.3. A3: Eignung der Kraftstofffraktionen bewerten

Nachdem im vorangegangenen Kapitel der Einfluss der Prozessparameter auf die Produktverteilung analysiert wurde soll im Folgenden der Zusammenhang zwischen Produktverteilung sowie physikalischen Eigenschaften der Kraftstofffraktionen untersucht werden. Auf diese Weise soll es möglich werden, die Prozessbedingungen nicht nur bezüglich der Produktausbeute, sondern auch im Hinblick auf die Produktqualität hin gezielt zu beeinflussen.

Das Siedeverhalten bzw. der Siedeverlauf der erzeugten Rohgemische ist eine wichtige, charakteristische Eigenschaft in Hinblick auf die Produktaufbereitung durch die Destillation. Weiterhin stellt eine gleichmäßig verlaufende Siedekurve ein Qualitätsmerkmal für die Endprodukte, also die Kraftstofffraktionen dar. Gruppenbeitragsmethoden stellen eine einfache und zuverlässige Methode zur Vorhersage von Siedepunkten von Reinstoffen auf Basis der Molekülstruktur dar. Für Stoffgemische mit bekannter Zusammensetzung wie im vorliegenden Fall lässt sich somit ein Siedeverlauf, also die temperaturabhängige Destillationsausbeute modellieren. Dazu wurden die Siedepunkte in Abhängigkeit von der Kettenlänge mit Hilfe der Methode von Stefanis et al. berechnet [28], wobei auf Basis der analytischen Ergebnisse eine Erhöhung des Verzweigungsgrades mit ansteigender Kettenlänge angenommen wurde (Abbildung 18 links oben). Ebenfalls dargestellt ist die Gegenüberstellung der experimentellen und modellierten Siedeverläufe für einige ausgewählte Produktzusammensetzungen aus anderen Studien.

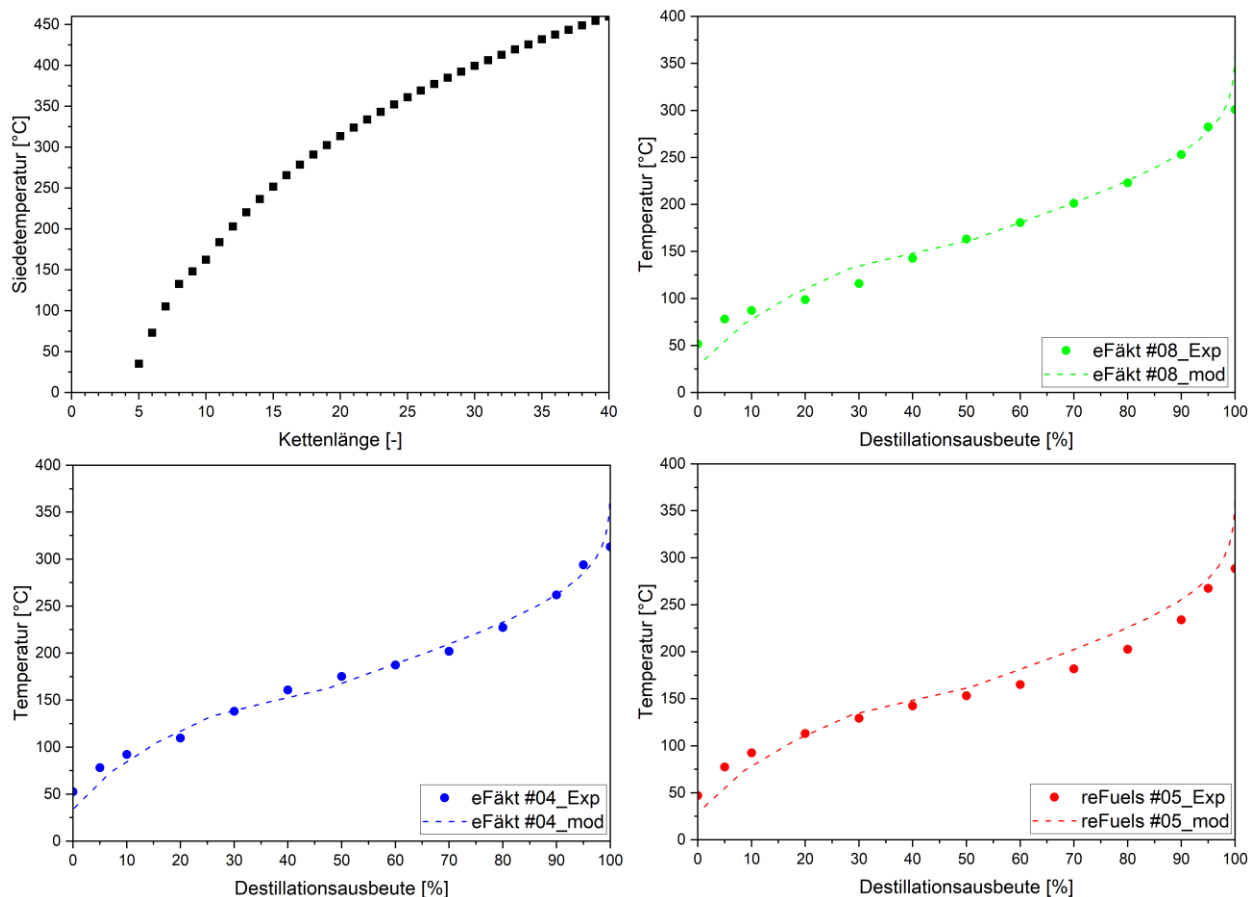


Abbildung 18: Siedetemperatur in Abhängigkeit von der Kettenlänge (oben links) sowie experimentelle und modellierte Siedekurven für einige ausgewählte Rohproduktzusammensetzungen

Der Vergleich der experimentellen und modellierten Siedeverläufe zeigt eine gute Übereinstimmung, was auf eine ausreichende Genauigkeit des Modells hinweist. Leichte Abweichungen, insbesondere im niedrigen Temperaturbereich sind auf Abweichungen der genauen Zusammensetzung und insbesondere des Verzweigungsgrades der Produktgemische durch die unterschiedlichen Reaktionsbedingungen zurückzuführen. Die Modellierung des Verzweigungsgrades in Abhängigkeit der Prozessbedingungen ist zum aktuellen Zeitpunkt aufgrund der Datenlage nicht möglich, stellt jedoch eine sinnvolle Fortsetzung der Arbeiten in zukünftigen Studien dar.

Die Energiedichte von Kraftstoffen ist eine wichtige Eigenschaft, insbesondere in Bezug auf die Anwendung in der Luftfahrt. Eine hohe Energiedichte ist hier besonders wichtig, um hohe Reichweiten mit möglichst geringem Tankvolumen und geringer Masse an Kraftstoff und so eine hohe Effizienz zu erzielen. In diesem Kontext sind Dichte und Brennwert von besonderem Interesse, um den Massen- bzw.

Volumenbezogenen Energiegehalt zu bewerten. Diese beiden Eigenschaften sind für verschiedene Proben in Abbildung 19 über der durchschnittlichen Kettenlänge aufgetragen. Zur Bestimmung der Dichte bei 15 °C wurde ein SVM 3001 CP Viskosimeter (Firma Anton Paar) verwendet.

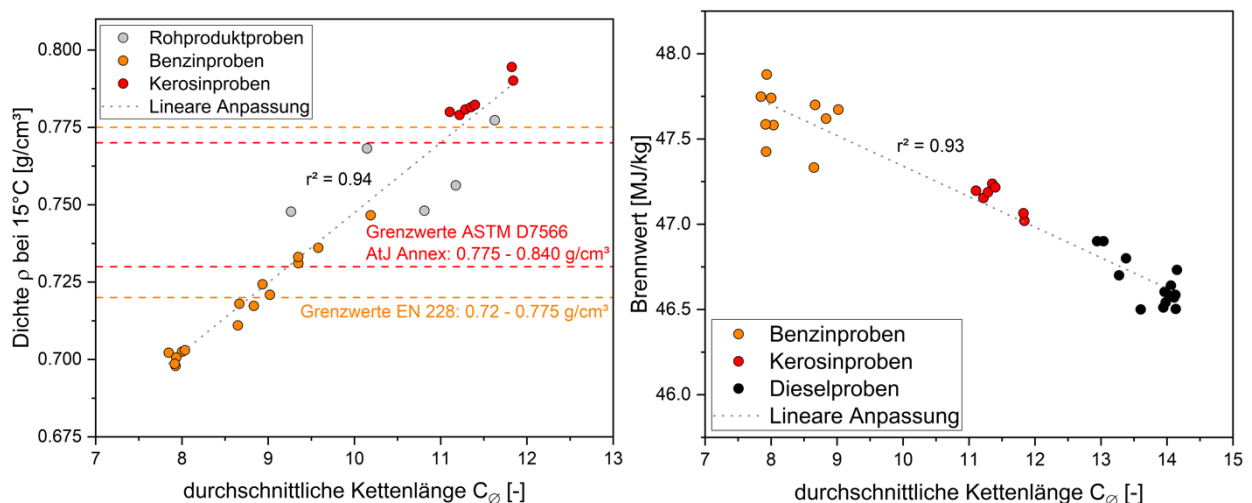


Abbildung 19: Dichte bei 15 °C sowie Grenzwerte nach Norm (links) und Brennwert (rechts) in Abhängigkeit von der durchschnittlichen Kettenlänge für verschiedene Produktfraktionen. Die gepunkteten grauen Linien stellen jeweils lineare Anpassungen der experimentellen Daten dar.

Sowohl für die Dichte als auch für den Brennwert sind deutlich lineare Zusammenhänge mit der durchschnittlichen Kettenlänge des Gemischs zu erkennen. Mit Blick auf die in den Normen vorgeschriebenen Grenzwerte für Benzin und Kerosin wird außerdem deutlich, dass die bislang untersuchten Kerosinproben eine zu hohe, und die Benzinproben überwiegend eine zu geringe Dichte aufweisen. In Bezug auf die Steuerung der Produktaufbereitung kann somit gefolgert werden, dass die Destillationsgrenzen angepasst werden müssen. Der lineare Zusammenhang zwischen Dichte und durchschnittlicher Kettenlänge ermöglicht weiterhin die Abschätzung der durchschnittlichen Kettenlänge analytisch komplexer Proben wie beispielsweise der Dieselfraktionen auf Basis der Dichte, welche messtechnisch einfach zu bestimmen ist. Bezüglich des Brennwerts weisen alle Proben dagegen sehr gute Werte auf.

Der Flammpunkt stellt die niedrigste Temperatur dar, bei der sich oberhalb des flüssigen Kraftstoffs ein zündfähiges Gemisch bildet und ist somit sicherheitstechnisch von großer Bedeutung. Für Kerosin und Diesel sind in den entsprechenden Normen Grenzwerte von 38 bzw. 55 °C vorgeschrieben, um einen sicheren Umgang zu gewährleisten. In Abbildung 20 sind Flammpunkte von Kerosin- und Dieselprouben, welche in vorangegangenen und aktuell laufenden Projekten hergestellt wurden, über der experimentell

bestimmen Temperatur des Siedebeginns dargestellt. Zur Bestimmung der Werte wurde ein Pensky-Martens-Flammpunktprüfer (PMA 500, Firma Anton Paar) verwendet.

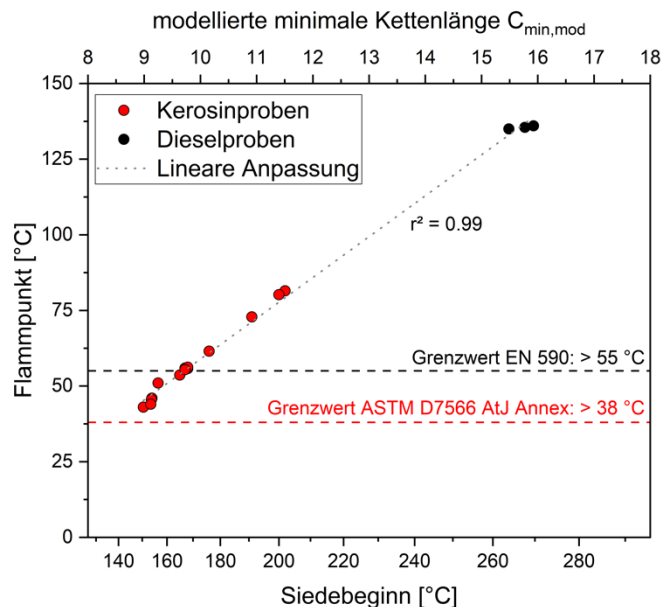


Abbildung 20: Flammpunkt in Abhängigkeit von der Temperatur des Siedebeginns für Kerosin- und Dieselproben. Grenzwerte nach Norm als gestrichelte und lineare Anpassung der Messdaten als gepunktete Linien. Auf der oberen x-Achse ist die dem Siedebeginn nach Abbildung 18 oben links modellierte entsprechende minimale Kettenlänge aufgetragen.

Sämtliche untersuchte Proben liegen oberhalb der in den Normen vorgeschriebenen Werte, wobei im Fall der Dieselproben der Grenzwert weit überschritten wurde. In Bezug auf die Produktaufbereitung bedeutet dies, dass der Anteil niedriger siedender Bestandteile in der Dieselfraktion noch erhöht werden kann. Unter Verwendung des in Abbildung 18 beschriebenen Zusammenhangs zwischen Kettenlänge und Siedetemperatur lässt sich weiterhin auf Basis der Temperatur des Siedebeginns die minimale Kettenlänge der Zusammensetzung der Proben modellieren. Für die Dieselproben könnte im Hinblick auf den Grenzwert für den Flammpunkt die Temperatur des Siedebeginns bis auf etwa 195 °C abgesenkt werden, was einer minimalen Kettenlänge von $C_{\emptyset,mod} = 11$ entspricht.

Zur Beurteilung der Qualität der Benzinfraktion stellt die Oktanzahl ein wichtiges Merkmal dar. Diese beschreibt die Klopfestigkeit des Kraftstoffs, also die Widerstandsfähigkeit gegen unkontrollierte Selbstzündung im Verbrennungsprozess, welche zu Motorschäden führen kann. Die Zusammenhänge zwischen molekularer Zusammensetzung und Oktanzahl sind aufgrund der Vielfalt an chemischen Reaktionen im Verbrennungsprozess allerdings sehr komplex, wodurch es schwierig ist strukturelle Zusammenhänge zu identifizieren. Abbildung 21 zeigt den Zusammenhang zwischen Oktanzahl (RON) und durchschnittlicher Kettenlänge sowie Iso- und Olefinindex, wodurch das Verhältnis zwischen

verzweigten und unverzweigten bzw. olefinischen und paraffinischen Bestandteilen beschrieben wird. Die Bestimmung der Oktanzahlen erfolgte mit Hilfe des Reformulyzer M4 (Firma PAC), welcher die präzise Bestimmung der Zusammensetzung der Benzinfraktion und darauf basierend eine Abschätzung der Oktanzahl mit Hilfe einer integrierten Datenbank ermöglicht.

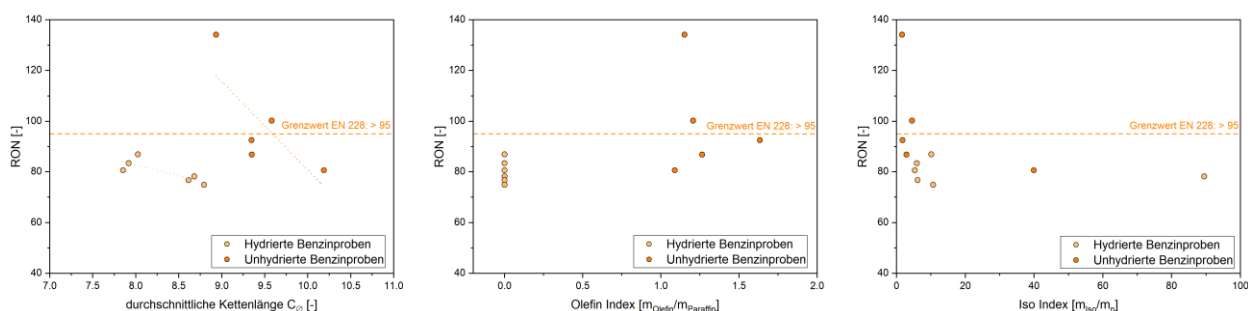


Abbildung 21: Oktanzahl (RON) in Abhängigkeit der durchschnittlichen Kettenlänge (links), vom Iso Index (Verhältnis verzweigter und linearer Komponenten, Mitte) sowie vom Olefin Index (Verhältnis olefinischer und paraffinischer Komponenten, rechts) sowie Grenzwert für Ottokraftstoffe nach DIN EN 228.

Bezüglich der Produktaufbereitung der Proben wurde zwischen unhydrierten und hydrierten Proben unterschieden, da der Olefingehalt einen großen Einfluss auf die Oktanzahl hat. Olefine (ungesättigte Kohlenwasserstoffe) weisen dabei wesentlich höhere Oktanzahlen als die entsprechenden Paraffine (gesättigte Kohlenwasserstoffe) bei gleicher Kettenlänge auf [29, 30]. Dementsprechend liegen die Oktanzahlen der unhydrierten Benzinproben mit höherem Olefin Index erwartungsgemäß in der Regel höher als die der hydrierten Proben (Olefin Index ≈ 0). Gleichzeitig ist aus der Literatur bekannt, dass die Oktanzahl mit steigender Kettenlänge sinkt [29, 30]. Dieser Trend ist auch innerhalb der Gruppen (hydriert/unhydriert) in Abbildung 21 links zu beobachten. Der Einfluss des Iso Index, also des Anteils verzweigter Komponenten, ist dagegen schwieriger zu interpretieren. Aus Literaturstudien ist bekannt, dass verzweigte Moleküle tendenziell höhere Oktanzahlen als lineare Moleküle gleicher Kettenlänge aufweisen [29, 31, 32]. Dieser Trend ist aus den experimentellen Daten nicht ersichtlich, tendenziell sinkt die Oktanzahl sogar mit steigendem Iso Index. Möglicherweise wird der Effekt des Verzweigungsgrades durch andere Einflüsse wie der durchschnittlichen Kettenlänge oder dem Olefin Index überlagert. Es ist jedoch auffällig, dass der Iso Index für hydrierte Proben durchweg niedriger liegt als für unhydrierte Proben, was einen Einfluss der Hydrierung in der Produktaufbereitung impliziert. Aufgrund der komplexen Zusammensetzungen der Gemische ist zur genaueren Aufklärung der Zusammenhänge eine umfassendere Datengrundlage notwendig, es sollten also weitere Untersuchungen angestellt werden. Abschließend lässt sich noch feststellen, dass insbesondere einige der unhydrierten Proben zufriedenstellende Oktanzahlen, teilweise innerhalb der Anforderungen der Norm, aufweisen und eine Anwendung als Ottokraftstoff somit vielversprechend ist.

Zur Beurteilung der Kerosinproben wurden basierend auf den vorangegangenen Untersuchungen im Projekt reFuels – Demo insbesondere die Kälteeigenschaften untersucht. In dieser Studie konnte bereits eine grundlegende Beurteilung von einigen Proben vorgenommen werden, wobei sich insbesondere die Viskosität bei tiefen Temperaturen als kritisch erwiesen hat. Dies ist auf den hohen Anteil an verzweigten Komponenten zurückzuführen, die im Allgemeinen eine Erhöhung der Viskosität im Vergleich zu linearen Ketten bewirken [33]. In Abbildung 22 sind Messwerte für Proben bestimmt bei -20 °C und -40 °C in Abhängigkeit von der Dichte dargestellt. Dazu wurde ein SVM 3001 CP Viskosimeter (Firma Anton Paar) verwendet, welches insbesondere für Messungen in tiefen Temperaturbereichen konzipiert ist. Außerdem wurde auf Basis des in Abbildung 19 identifizierten Zusammenhangs die durchschnittlicher Kettenlänge aus der Dichte der Proben berechnet.

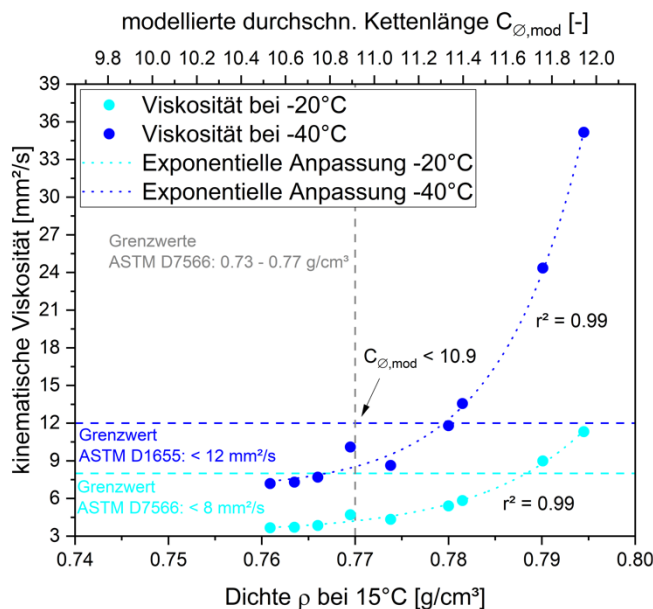


Abbildung 22: Kinematische Viskosität bei -20 °C und -40 °C für Kerosinproben in Abhängigkeit von der Dichte bei 15 °C. Grenzwerte nach ASTM D7566 und ASTM D1655 als gestrichelte und exponentielle Anpassung der Messdaten als gepunktete Linien. Auf der oberen x-Achse ist die auf Basis der Dichte nach Abbildung 19 links modellierte entsprechende durchschnittliche Kettenlänge aufgetragen.

Grundsätzlich ist sowohl für die Viskosität bei -20 °C als auch bei -40 °C derselbe Effekt, nämlich ein exponentieller Anstieg mit zunehmender Dichte zu beobachten. Der Trend einer ansteigenden Viskosität mit steigender Dichte bzw. Kettenlänge entspricht dem erwarteten Verlauf, da eine höhere Masse der Moleküle ein Anstieg der intramolekularen Kräfte zur Folge hat [34]. Für die Viskosität bei -40 °C ist der Anstieg jedoch deutlich stärker ausgeprägt, wodurch der Grenzwert bei -40 °C (ASTM D1655) von deutlich mehr Proben überschritten wird im Vergleich zum Grenzwert bei -20 °C (ASTM D7566). Dies unterstreicht die Notwendigkeit von Tests bei tiefen Temperaturen für diese Art von Proben. Wird zusätzlich die maximale Dichte von 0,77 g/cm³ berücksichtigt ergibt sich eine abgeschätzte maximale

durchschnittliche Kettenlänge von $C_{\varnothing,mod} > 10,9$ um innerhalb der durch die Norm definierten Grenzwerte zu bleiben. Die Werte einiger ausgewählter Kerosinproben sind in Tabelle 3 aufgeführt, um den Einfluss der durchschnittlichen Kettenlängen zu verdeutlichen.

Tabelle 3: Dichte und Kälteeigenschaften ausgewählter Kerosinproben mit durchschnittlichen Kettenlängen im Bereich von 10.5 bis 12.0. Die Einhaltung der in der Norm vorgesehenen Werte wird durch farbliche Kennzeichnung (grün = innerhalb der Norm, gelb = grenzwertig, rot = außerhalb der Norm) verdeutlicht.

| Parameter | Norm ASTM 7566 ATJ-Annex | Probe (Destillationsgrenzen) | | | | |
|---|--------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|--|--|
| | | eFäkt K#06 (130 – 260 °C) | eFäkt K#08 (130 - 260 °C) | eFäkt K#02 (130 – 260 °C) | reFuels - Demo K#02 (150 – 295 °C) | reFuels - Demo K#07 (200 – 295 °C) |
| Dichte bei 15°C [g/cm ³] | 0.73 – 0.77 | 0.761 | 0.766 | 0.774 | 0.780 | 0.794 |
| Kin. Viskosität bei -20°C [mm ² /s] | max. 8 | 3.66 | 3.85 | 4.34 | 5.40 | 11.57 |
| Kin. Viskosität bei -40°C [mm ² /s] | max. 12 (ASTM D1655) | 7.19 | 7.69 | 8.63 | 11.80 | 35.02 |
| T _{min} , Viskosität = 12mm ² /s [°C] | min. - 40 | -51.1 | -49.5 | -47.3 | -40.3 | -21.19 |
| Trübungspunkt [°C] | | < -60 | < -60 | < -60 | < -60 | < -60 |
| Gefrierpunkt [°C] | max. -47 | < -60 | < -60 | < -60 | < -60 | < -60 |
| modellierte durchschnittliche Kettenlänge | - | 10.53 | 10.75 | 11.08 | 11.33 | 11.92 |

Weiterhin lassen sich aus den Daten Rückschlüsse bezüglich des Einflusses der Produktaufbereitung durch Destillation ziehen. Während die im Projekt *reFuels – Demo* produzierten Produktgemische generell zu hohe Dichten aufwiesen konnten durch eine Anpassung der Destillationsgrenzen im aktuell laufenden Projekt *e-Fuels fürs Länd, an dem das KIT beteiligt ist*, Produktgemische mit normgerechten Eigenschaften erzeugt werden. Der Einfluss der Produktionsbedingungen ist allerdings dennoch nicht vernachlässigbar. So wurden drei der in Tabelle 3 aufgeführten Proben unter Verwendung derselben Destillationsparameter produziert, dennoch sind deutliche Unterschiede festzustellen und nur zwei der Proben liegen innerhalb der Grenzen der Norm. Ebenfalls in Tabelle 3 aufgeführt sind die Trübungspunkte sowie Gefrierpunkte der Proben als Maß für die Kältestabilität bezüglich der Bildung von Feststoff. Aufgrund der bemerkenswert tief liegenden Schmelzpunkte von stark verzweigten Kohlenwasserstoffen liegen diese Proben unabhängig von der durchschnittlichen Kettenlänge weit unterhalb der Grenzwerte.

Zur Bewertung der Qualität der Dieselfraktion wurde die Viskosität sowie die Cetanzahl verfügbarer Proben erfasst und evaluiert. Bezüglich der Viskosität sind laut Norm relativ enge Grenzen von 2,5 bis 4,5 mm²/s bei 40 °C vorgesehen. Aufgrund des bisher beobachteten Verhaltens der Viskosität der Produktgemische erscheint eine Evaluation dieser Eigenschaft daher sinnvoll.

Die Cetanzahl ist ein Maß für die Zündwilligkeit von Dieseldieselkraftstoff und verhält sich daher gegensätzlich zur Oktanzahl, d.h. Kraftstoffe mit hoher Oktanzahl weisen eine niedrige Cetanzahl auf und umgekehrt. Da der Dieselmotor im Gegensatz zum Ottomotor auf einer Selbstzündung des Kraftstoffs basiert ist eine hohe Cetanzahl wichtig für die Kontrolle des Verbrennungsprozesses. Während verzweigte Moleküle tendenziell höhere Oktanzahlen als lineare Moleküle gleicher Kettenlänge aufweisen liegt ihre Cetanzahl niedriger, was ungünstig für die Anwendung als Dieseldieselkraftstoff ist [32, 35]. Beide Eigenschaften sind in Abbildung 23 in Abhängigkeit von der Dichte bzw. der modellierten durchschnittlichen Kettenlänge dargestellt.

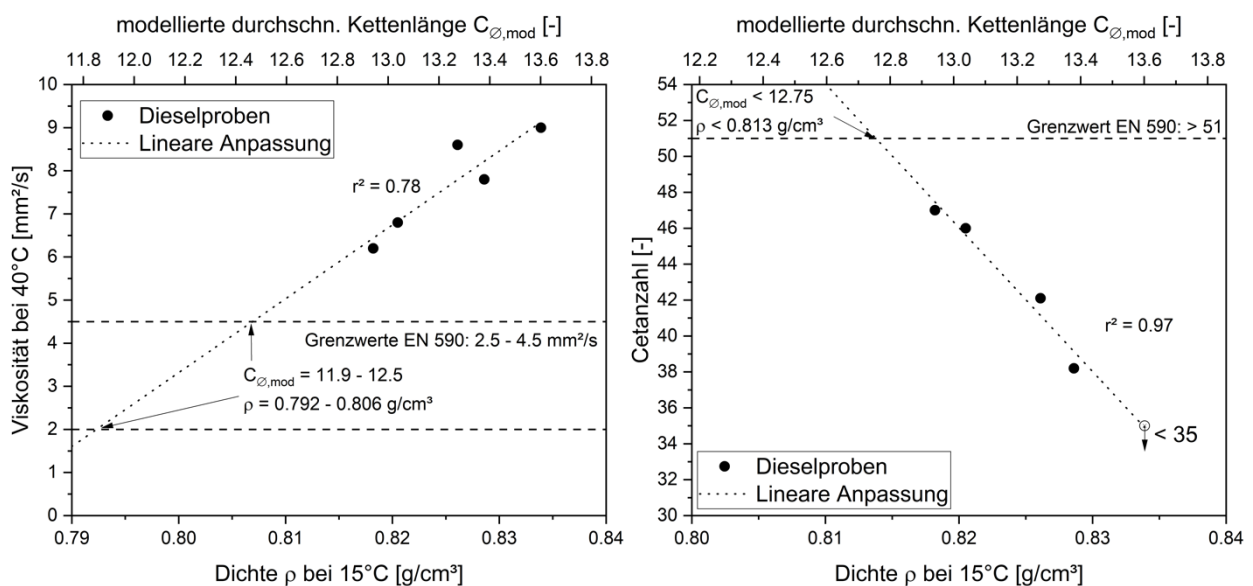


Abbildung 23: Viskosität bei 40 °C sowie Cetanzahl in Abhängigkeit von der Dichte für Dieselproben. Grenzwerte nach EN 590 als gestrichelte, lineare Anpassungen als gepunktete Linien. Auf der oberen x-Achse ist die auf Basis der Dichte nach Abbildung 19 links modellierte entsprechende durchschnittliche Kettenlänge aufgetragen.

Sowohl für die Viskosität als auch für die Cetanzahl lassen sich für die zur Verfügung stehenden Daten lineare Abhängigkeiten von der Dichte bzw. der berechneten durchschnittlichen Kettenlänge feststellen. Beide Parameter liegen weiterhin für alle untersuchten Proben außerhalb des in der Norm vorgesehenen Bereichs. Eine Extrapolation der linearen Anpassung in den Normbereich weist für beide Eigenschaften darauf hin, dass die Produktgemische zu schwer sind, also die durchschnittliche Kettenlänge zu hoch ist. Auf Basis dieser Extrapolation lässt sich eine Reduktion auf einen Wert im Bereich von



$C_{\phi, \text{mod}} = 11,9$ bis $12,5$ abschätzen um die Normgrenzen sowohl für Viskosität als auch Cetanzahl einzuhalten. Da es sich dabei um eine erste Abschätzung handelt und der Normbereich insbesondere für die Viskosität relativ schmal ist, empfiehlt es sich zunächst weitere experimentelle Werte zu generieren und so eine breitere Datengrundlage für eine zuverlässigere Einschätzung aufzubauen.

Bezüglich der Qualität der Benzinfraktion lässt sich festhalten, dass einige der produzierten Proben hinsichtlich der untersuchten Parameter bereits innerhalb der durch die Norm vorgegebenen Grenzen liegen. Grundsätzlich sollte jedoch die Dichte der Benzinfraktion erhöht werden (vgl. Abbildung 19), was beispielsweise durch die Rückführung kurzkettiger Komponenten im Produktionsprozess erreicht werden kann. Eine zu hoch gewählte durchschnittliche Kettenlänge wirkt sich dagegen negativ auf die Oktanzahl aus, sodass eine gezielte Optimierung erforderlich ist. Um eine hohe Oktanzahl zu erzielen, sollte der Kraftstoff außerdem nicht hydriert werden. Innerhalb der Produktaufbereitung muss daher zunächst die Benzinfraktion aus dem Rohprodukt abdestilliert werden.

Auch im Hinblick auf die Kerosinfraktion konnten bereits mehrere normkonforme Produktgemische hergestellt werden. Dies betrifft insbesondere Gemische mit kürzerer durchschnittlicher Kettenlänge, da tendenziell langkettige Gemische in Bezug auf Dichte und Viskosität die Normbereiche überschreiten. Für die Produktaufbereitung erscheinen somit insbesondere die zuletzt gewählten, niedrigeren Destillationsgrenzen vielversprechend (vgl. Abbildung 22, Tabelle 3). Im Gegensatz dazu konnte bislang keine normkonforme Dieselfraktion erzeugt werden. Die durchgeführten Analysen zeigen, dass die untersuchten Gemische zu schwer sind und einen zu hohen Anteil langkettiger Komponenten enthalten. Eine Extrapolation der Messwerte weist darauf hin, dass durch eine Reduktion der durchschnittlichen Kettenlänge auf $C_{\phi, \text{mod}} = 11,9 - 12,5$ die Grenzwerte der Norm potenziell eingehalten werden können. Hinsichtlich des Flammpunktes sollte diese Maßnahme ohne sicherheitstechnische Einschränkungen umsetzbar sein, da ein ausreichend großer Abstand zu den Normgrenzen besteht. Aus prozesstechnischer Perspektive geht die diskutierte Optimierung der Kerosinfraktion Hand in Hand mit derjenigen der Dieselfraktion, da niedrigere Destillationsgrenzen der Kerosinfraktion automatisch eine Verringerung der durchschnittlichen Kettenlänge der Dieselfraktion nach sich ziehen. Insgesamt konnte somit gezeigt werden, dass die durchgeführten Analysen der Anwendungseigenschaften der Produktströme wertvolle Rückschlüsse auf den Herstellungsprozess sowie die optimale Produktaufbereitung ermöglichen.



5. Arbeitspaket B: Konzeptstudie Infrastruktur für strombasiertes Kerosin von der MiRO-Raffinerie bis zum Anwender

Das Ziel der in AP B durchgeführten Konzeptstudie ist die Entwicklung eines tragfähigen Logistikkonzepts für Lagerung, Blending und Verteilung von Sustainable Aviation Fuel (SAF). Als Praxisbeispiel für die Berücksichtigung regionaler Besonderheiten wurde dabei exemplarisch die Produktion von MtJ-SAF in der MiRO-Raffinerie in Karlsruhe sowie eine Versorgung der Flughäfen Stuttgart und Baden-Baden betrachtet. Der Produktionshochlauf von SAF wurde durch die Evaluation der Skalierbarkeit (Basisfall 40 kta SAF → 200 kta bis 2050) berücksichtigt. Regulatorische sowie technische Anforderungen bezüglich Nachhaltigkeit und Qualitätssicherung wurden ebenso betrachtet. Um Praxisnähe und Umsetzbarkeit des erarbeiteten Logistikkonzepts zu gewährleisten, wurden als Teil der Recherche Interviews mit den beteiligten Stakeholdern durchgeführt. Die Unterarbeitspakete sowie die ausformulierten Leitfragen der Studie sind in Tabelle 4 aufgeführt.

Tabelle 4: Unterarbeitspakete und Leitfragen der in Arbeitspaket B durchgeführten Konzeptstudie.

B1: Szenarien für Lager-, Blend- Standorte erarbeiten

-
- Skizzieren des Ist-Zustands der Lieferkette von Kerosin Erzeugung bis zu den Endabnehmern (Flughäfen)
 - *Wie sieht die Lieferkette qualitativ aus, wie viele Zwischenschritte und welche Akteure sind involviert? Wo in Baden-Württemberg wird Kerosin für die Versorgung von Flughäfen gelagert/geblendet?*
 - Identifizierung potentieller Standorte für Lagerung und Blending von MtJ-SAF
 - *Wo in BaWü wird Kerosin für die Versorgung von Flughäfen gelagert? An welcher Stelle wird das Kerosin geblendet?*
 - *Gibt/wird es an den Lager-/Blending Standorten Kapazitäten für MtJ-SAF Jetfuel geben?*
 - Evaluation von Transportoptionen und –kapazitäten
 - *Evaluation verschiedener Transportwege*
 - *Ist die Einbindung einer existierenden Pipelineinfrastruktur möglich bzw. ab welchen Mengen wäre die Errichtung einer neuen Pipeline sinnvoll?*
 - *Welche Lösung ist am wirtschaftlichsten bei welcher Produktionsmenge?*
 - Flughafenlogistik
 - *Wie sieht die Kerosin-Infrastruktur am Flughafen aus?*
 - *Wird es geteilte oder separate Infrastruktur für verschiedene Kraftstoffqualitäten z.B. Blends mit SAF für eine flexible Anwendung geben? Ließen sich durch eine flexible Anwendung Potentiale erschließen?*
 - *Wird eine neue Infrastruktur benötigt?*
 - Erarbeitung von Logistikkonzepten für die Versorgung von Flughäfen in BaWü mit Jetfuel ab MiRO
 - *Erstellen von Szenarien, Auswahl konkreter Standorte und Transportoptionen für den Basisfall (40 kt Jetfuel/a-Anlage) unter Berücksichtigung qualitativer Unterschiede (z.B. Optionen für den Blending Standort)*
 - Potentiale der erarbeiteten Logistikkonzepte
 - *Welche weiteren Endkunden sind an die skizzierten Logistiknetze angeschlossen (Kunden Tanklager, angeschlossene Abnehmer Pipelinenetz)*
-



B2: Qualitätssicherungskonzepte erarbeiten

- Recherche der Akteure
 - *Wer überwacht die Einhaltung der Normen?*
 - *Wer ist von den technischen, personellen, rechtlichen und organisatorischen Voraussetzungen in der Lage, die Abmischung und die Qualitätssicherung für Jetfuel-Blends zu übernehmen?*
 - *Wer übernimmt die Meldung der Mengen Richtung Bundesanstalt für Landwirtschaft und Ernährung (BLE), Nabisy-Eintrag*
- Recherche der Anforderungen
 - *Welche Anforderungen an die Qualitätssicherung von Kerosin bzw. MtJ-Jetfuel gibt es heute (AtJ-SPK Annex 5)? Welche Entwicklungen sind zukünftig absehbar?*
- Identifikation kritischer Parameter
 - *Welche Parameter sind kritisch bzgl. Grenzen der Blendbarkeit, maximaler Beimischmengen?*
- Konzept produktionsnahe Qualitätssicherung
 - *Welche Parameter können/sollten bereits während der Produktion bzw. beim Downstream processing innerhalb der MiRO überwacht werden, wie sehen die entsprechenden Methoden aus?*

B3: Randbedingungen aus Produktion, Lieferkette und Verfügbarkeit abbilden

- Identifikation äußerer begrenzender Faktoren für den Produktionshochlauf
 - *Z.B. Verfügbarkeit der Rohstoffe (erneuerbares Methanol), Bedarf an SAF*
- Skalierungskonzepte für den Produktionshochlauf
 - *Ist das gewählte Logistikkonzept frei skalierbar (von Basisfall bis 200 kt Jetfuel/a-Anlage) oder gibt es Kapazitätsbeschränkungen, z.B. bzgl. der Transportkapazitäten? Wie können diese berücksichtigt werden?*
 - *Wie soll/kann eine sinnvolle Zeitschiene für den Produktionshochlauf aussehen?*

B4: Bewertungskriterien ableiten

- Kosten
 - *Berechnung der mit der Logistik assoziierten Kosten - welche Lösung ist am wirtschaftlichsten bei welcher Produktionsmenge?*
- GHG-Fußabdruck
 - *Berechnung des mit der Logistik assoziierten GHG Fußabdrucks, Überprüfung Konformität zu Anforderungen lt. RED III*
 - *Hat es einen ökonomischen Mehrwert den GHG-Fußabdruck der Logistik maximal zu mindern oder muss nur ein Schwellenwert unterschritten werden?*
- Zusammenfassende Evaluation der Szenarien
 - *Evaluation der Vor- und Nachteile der skizzierten Szenarien*
- Evaluation reale Belieferung mit SAF vs. Zertifikatmodells (Entkopplung von Anrechnung und Nutzung)
 - *Lässt sich durch die Flexibilität eines auf Zertifikaten basierenden Anrechnungssystems ein signifikanter Nutzen erzielen?*

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Studie in Form einer Kurzvorstellung zusammengefasst. Die vollständige Studie mit allen Ergebnissen befindet sich im Anhang.



5.1. Kurzvorstellung der Konzeptstudie zur Entwicklung einer skalierbaren Infrastruktur für Kerosin-Fractionen unter Berücksichtigung geographischer und technischer Rahmenbedingungen

Diese Konzeptstudie analysiert, wie eine Infrastruktur für strombasiertes Kerosin (e-SAF, Sustainable Aviation Fuel) von einem Produktionsstandort, wie der MiRO-Raffinerie in Karlsruhe bis zur Anwendung an Flughäfen in Baden-Württemberg, aussehen kann. Im Fokus stehen die Flughäfen Stuttgart (STR) und Karlsruhe/Baden-Baden (FKB). Untersucht werden die erforderlichen infrastrukturellen Anpassungen für den Hochlauf von SAF sowie skalierbare und nachhaltige Lösungen für Transport, Lagerung und Blending. Blending bezeichnet in diesem Kontext die gezielte Mischung mit fossilem Kerosin zur Einhaltung von Spezifikationsvorgaben internationaler Standards. Ziel der Studie ist die Entwicklung tragfähiger Logistikkonzepte für ein Basisfall von etwa 40 kt/a und einer potenziellen Hochskalierung auf 200 kt/a, unter konsistenter Berücksichtigung technischer Machbarkeit, regulatorischer Nachhaltigkeits-Anforderungen (RED III, ReFuelEU Aviation), Kraftstoff-Standards (ASTM, DefStan), Qualitätssicherung (EI, JIG), sowie praktikabler Umsetzungs-Zeitpläne und kritischer Faktoren. Die Untersuchung verbindet eine breit angelegte Optionensichtung mit einer gewichteten Mehrkriterienbewertung, Szenario- und Sensitivitätsanalysen, um belastbare Handlungsempfehlungen abzuleiten. Weiteres zentrales, methodisches Element ist die Durchführung von Interviews mit Akteuren und Wissensträgern.

Der Ausgangspunkt der Studie ist die bestehende Kerosinversorgung der beiden Flughäfen über regionale Tanklager und Straßenlogistik. Diese historisch gewachsene Infrastruktur bildet die Grundlage für einen effizienten SAF-Hochlauf, da SAF als „Drop-in Kraftstoff“ in das bestehende Jet-A-1-System integrierbar ist. Die Studie zeigt, dass eine Nutzung und gezielte Umrüstung/Erweiterung vorhandener Anlagen (Brownfield-Ansatz) einen schnellen Hochlauf ermöglicht – mit überschaubarem Investitionsaufwand und reduziertem Genehmigungsrisiko im Vergleich zu Greenfield-Neubauten. Der Mehraufwand entsteht durch die Anforderungen, die das Handling der Synthetischen Blending Komponente (Synthetic Blending Component; SBC) verursacht. Ab dem Zeitpunkt des Blendings, der Zertifizierung nach ASTM D7566 und der Freigabe, kann das entstandene SAF wie konventionelles Jet Fuel behandelt werden.

Regulatorisch setzt ReFuelEU Aviation den entscheidenden Rahmen: Nach Auslaufen des Flexibilitätsmechanismus ist ab 2035 die physische Bereitstellung von SAF an jedem Unionsflughafen verpflichtend und muss von den Kraftstofflieferanten ermöglicht werden. Für STR und FKB wird daraus bei moderatem Verkehrswachstum ein e-SAF-Bedarf von 16kt/a in 2035 bzw. 37 kt/a 2040 prognostiziert, was im Basisfall von 40 kt/a gedeckt werden kann. Durch den in der Studie spezifizierten potenziellen e-SAF-Hochlauf auf bis zu 200 kt/a kann auch der prognostizierte Bedarf von 173 kt/a in 2050 vollständig gedeckt werden. Dieses Zielniveau bietet strategischen Puffer gegenüber Nachfrageunsicherheiten und stärkt die Versorgungssicherheit, gegebenenfalls auch über die hier betrachteten Flughäfen hinaus. Zu

SBC: Synthetic Blending Component, manchmal auch "neat SAF" genannt

SAF: Sustainable Aviation Fuel, Nachhaltiger Flugturbinenkraftstoff, hier ab dem Zeitpunkt nach dem Blending und Zertifizierung. Enthält SBC und fossile Jet Fuel Komponente (oder conventional blending components) entsprechend ASTM D7566.



berücksichtigen bleibt die Zeit zur Erreichung der geplanten Kapazität der Produktionsanlage sowie die langfristige Sicherstellung der Versorgung mit e-Methanol und dessen Markt-Entwicklung.

Die Studie vergleicht vier Grundoptionen für die Standortwahl des Blendings:

1. Blending an der MiRO-Raffinerie,
2. an einem bestehenden Tanklager,
3. eine reine Produktion synthetischer Blending-Komponenten (SBC) an der MiRO ohne eigene Inverkehrbringung, sowie
4. die Durchführung von Blending am Flughafen.

Aufgrund von geringem Platzangebot und Sicherheitsbedenken erweist sich Blending am Flughafen (4) jedoch als nicht geeignet und ist nach DefStan 91-091 auch nicht zulässig. Dagegen bilden die MiRO-Raffinerie selbst (1) und sechs ausgewählte, nahegelegene, verkehrsgünstig angebundene Tanklager potenzielle SAF-Blending-Standorte (2) im Raum Baden-Württemberg. Hier lassen sich ASTM-konformes Blending, Qualitätsprozesse (z. B. nach JIG-Praxis) und Nachhaltigkeitszertifizierungen (z. B. ISCC, RSB, REDcert-EU) sowie die Verteilung an die Flughäfen realisieren. Option 3 erweitert den Szenarienraum z. B. durch Transport des SBC an externe, zentrale Blending-Hubs, ggf. per Schiff, und wird in der Studie nicht weiter vertieft, da dies über den Rahmen Baden-Württembergs hinausgeht.

Kurzfristig ist der Transport per Tankkraftwagen (TKW) die pragmatischste Lösung, insbesondere für die letzte Etappe zu den Flughäfen, da sie beide über keine weitere Anbindung verfügen. Die TKW-Versorgung gewährleistet eine schnelle und flexible Startfähigkeit und die aktuelle Taktung der TKW-Abfertigung an MiRO und befragten Tanklagern übersteigt den prognostizierten Bedarf durch Transport des SBC, auch bei einer Hochskalierung. Mit steigenden Volumina gewinnen der Transport per Schiene und Binnenschiff an Bedeutung. Beide Transportmodi senken die spezifischen Emissionen und Betriebskosten, und erhöhen die Skalierbarkeit, erfordern jedoch eine rechtzeitige Sicherung von Kapazitäten (Wagen, Slots, Terminal-Handling), sowie saisonale Resilienz-Maßnahmen bei der Binnenschifffahrt. Pipeline-Lösungen bleiben eine langfristige Option für sehr hohe, stabile Durchsätze. Aufgrund des hohen initialen Investitionsbedarfs, der Genehmigungskomplexität und dafür notwendigen Zustimmung von Grundstückseigentümer*innen sind sie erst nach Etablierung signifikanter Volumina sinnvoll und stellen aktuell keine realistischen Optionen dar. Einige Tanklager verfügen über eine aktive Anbindung an das Central European Pipeline System CEPS, wodurch das SAF auch an weiteren, verbundenen Standorten durch Massenbilanzierung verfügbar wäre.

Zum Vergleich der Optionen wurde ein mehrstufiges Bewertungsverfahren angewandt. Aus einer breiten Longlist wurden Optionen zunächst über harte Kriterien (Lage, aktuelle Produkte, erwartete Expertise) reduziert. Dazu kommen Kriterien wie Investitions- und Betriebskosten, Treibhausgasfußabdruck,



Anschlussfähigkeit an bestehende Infrastruktur, Umsetzbarkeit/Genehmigungen sowie mögliche regulatorische Entwicklungen, wie die Anerkennung eines Book-and-Claim Mechanismus.

Auf dieser Basis empfiehlt die Studie die Option 1 mit der MiRO-Raffinerie als SBC-Produzent und Dreh- und Angelpunkt mit kerosinfähiger Infrastruktur, wobei die Eigenproduktion oder der Import von fossilem Kerosin für das Blending geklärt werden muss, sowie Option 2 mit Einbindung des Blending-Services eines oder mehrerer Tanklager als Blending- und Distributionshubs, die teils bereits über Jet, SAF und Blending Kompetenzen und Kapazitäten verfügen, sowie in die derzeitige Kerosinversorgung involviert sind. Für STR und FKB sind insbesondere die logistisch günstig gelegenen Standorte relevant, die mit überschaubaren Anpassungen schnell ertüchtigt werden können. Pro Standort sind dafür in der Regel moderate Investitionen ausreichend, während der Nutzen in Flexibilität, Versorgungssicherheit und Redundanz steigt. Diese Umwidmungen und Erweiterungen können in kürzerer Zeit umgesetzt werden als die Projektentwicklung und -realisierung einer first-of-a-kind Methanol-to-Jet Anlage.

Sowohl die Spezifikationsanforderungen für das SBC eines anerkannten Pfades, die maximale Blendgrenze mit fossiler Kerosin Komponente (nach ASTM D1655) und die Spezifikationen des Blends, sind in ASTM D7566 beschrieben. Eine Doppeltzertifizierung ist nicht nötig. Der zertifizierte Kraftstoff kann wie konventionelles Jet Fuel (nach ASTM D1655) behandelt werden und die nachgelagerte Qualitätssicherung erfolgt gemäß den etablierten Standards (EI/JIG 1530+1533, JIG 1,2,3, JIG AFQRJOS). Die Qualitätsprüfung wird dabei von akkreditierten Laboren übernommen. Methanol-to-Jet (MtJ) ist aktuell noch kein eigenständiger, zugelassener ASTM-Pfad, die Zulassung zeichnet sich jedoch zeitnah als Ergänzung zu Annex 5 Alcohol-to-Jet mit einer maximalen Blendgrenze von 50 % ab.

Die Nachhaltigkeitszertifizierung nach ReFuelEU Aviation / RED III erfolgt nach EU-weit anerkannten Schemata wie nach RSB, ISCC und REDcert-EU durch deren zugelassene Zertifizierungsstellen. Alle physischen Umschlagspunkte müssen Teil einer zertifizierten Lieferkette sein oder durch entsprechende Massenbilanzierungssysteme abgesichert werden. Entscheidend ist die Nachweisführung über Eigentum und Mengen (klare Trennung zwischen nachhaltigen und fossilen Volumina mit nachvollziehbarer Massenbilanz) bei jedem Übergang, sowie der Ausschluss von Doppelanrechnungen. Gemischte Transporte (z. B. SAF + fossiles Jet, „co-mingling“) sind zulässig, wenn die Massenbilanz-Regeln eingehalten und korrekt dokumentiert werden. Die Meldung an die Bundesanstalt für Landwirtschaft und Ernährung BLE und der Eintrag in die Nabisy-Datenbank erfolgt durch den Inverkehrbringer des Kraftstoffs, gemäß § 37a Bundes-Immissionsschutzgesetz (BImSchG) und 36. BImSchV.

Die Inverkehrbringer verantworten Quoten-Compliance und Meldungen in der Unionsdatenbank gemäß RED III. Flughäfen agieren als Enabler für den Zugang zur Infrastruktur und können in geringem Maße über Entgelt- bzw. Konzessionsmodelle Investitionen und Kapazitätsaufbau für die SAF-Versorgung unterstützen. Airlines benötigen verlässliche, planbares SAF-Angebot; ergänzende freiwillige Zertifikatsmodelle wie Book-and-Claim schaffen zusätzliche Flexibilität, ohne die derzeitigen EU-Pflichten



zu ersetzen. Eine Anerkennung von Book-and-Claim unter ReFuelEU Aviation steht noch aus, wird jedoch von vielen Experten als wahrscheinlich angesehen.



5.2. Kernaussagen der Studie

Die Kernaussagen der Studie lassen sich wie folgt zusammenfassen:

Die geeignetsten Pfade zum SAF-Hochlauf basieren auf der Nutzung und Aufwertung bestehender Infrastruktur.

Die Standortentscheidung für das Blending ist eine Frage der Verfügbarkeit von fossilem Kerosin und der Inverkehrbringer Rolle und weniger eine technische Hürde. Blending am Flughafen kann dabei praktisch ausgeschlossen werden. Kurzfristig und für geringe Mengen SAF eignet sich ein TKW-Transport, ab mittleren Volumina Schiene, insbesondere bei verfügbaren Anschlüssen. Binnenschiffe werden bei größeren Volumina und größeren Distanzen relevant, z. B. bei dem Transport des SBC zu einem Blending-Hub weit außerhalb der Ziel-Region. Pipelines sind eher als langfristige Option bei sehr hohen, stabilen Durchsätzen zu sehen, aufgrund der langwierigen und nicht abzuschätzenden Genehmigungsverfahren jedoch keine realistische Option.

Für eine erfolgreiche Etablierung der SBC-Produktion, des Blendings zu SAF und dessen Verteilung in Baden-Württemberg kann mit geringer Umrüstung auf bestehende Infrastruktur aufgesetzt werden. Dafür bieten sich neben dem Standort MiRO selbst mehrere nahegelegene Tanklager an, gestützt durch verschiedene, etablierte Transportmodi, kurze Distanzen und mögliche Redundanzen. Die Logistik stellt demnach eine verhältnismäßig niedrige Hürde für die Produktion und Verteilung von SAF in Baden-Württemberg dar, die durch verschiedene Transportoptionen und Blendingstandorte sowie kurze Entfernungen gekennzeichnet ist. Für die Produktion selbst sind aber umfangreiche Investitionen erforderlich - nur für Blending und Transport sind geringe Umrüstungen der vorhandenen Infrastruktur ausreichend.



6. Zusammenfassung

In dem vorliegenden Projekt „Vorbereitung einer Produktionsinfrastruktur für e-Kerosin und Koppelprodukte für Verarbeitung/Produktion/Qualitätssicherung und Logistik am Beispiel der MiRO“ wurde eine geeignete Infrastruktur für Produktion und Logistik am Beispiel der Mineraloelraffinerie Oberrhein (MiRO) konzipiert und bewertet. Die der Studie zugrundeliegende Annahme ist eine Produktion von reKerosin (z.B. MtJ-SAF am Standort MiRO) zur Versorgung der Flughäfen STR und FKB. Der Produktionshochlauf der Kerosinbedarfe des Landes Baden-Württemberg wurde anhand aktueller Zahlen und Entwicklungen modelliert und den Betrachtungen zugrundegelegt.

Um sowohl eine Verschiebung des Produktbedarfes als auch eine Flexibilisierung der Infrastruktur erzielen zu können wurden in dem Projekt sowohl die Auswirkungen der Prozessparameter auf die Ausbeute als auch notwendige Aktivitäten zu Qualitätssicherung betrachtet.

Im Projekt wurde eine die Produktverteilung und die physikalischen Produkteigenschaften beschreibende Gleichung aufzusetzen, ausgehend von Prozess-Simulationen der Methanol- basierten Prozessrouten für re-Kerosin (MtJ). Diese Gleichung wurde validiert durch die Analytik von im Labor durchgeführten Synthesen. Anhand der Produktionsparameter der gewählten Prozessroute kann diese Gleichung parametrisiert werden und dann für die jeweilige Produktroute eine Verteilung der Koppelprodukte auf Basis der Prozessparameter beschreiben.

Aus prozesstechnischer Perspektive geht die diskutierte Optimierung der Ausbeute Kerosinfraktion aus der Summe aller Syntheseprodukte Hand in Hand mit derjenigen der Dieselfraktion. Dies ist begründet in dem physikalischen Zusammenhang engerer Destillationsgrenzen mit den physikalischen Eigenschaften der beiden Zielprodukte re-Kerosin und re-Diesel, wie beispielsweise ihrer Dichte oder ihrem Kälteverhalten.

Sowohl für die Viskosität als auch für die Cetanzahl lassen sich für die zur Verfügung stehenden Daten lineare Abhängigkeiten von der Dichte bzw. der berechneten durchschnittlichen Kettenlänge feststellen. Eine Extrapolation der linearen Anpassung dieser Parameter in den Normbereich der Kraftstoffe weist für beide Eigenschaften darauf hin, dass für die untersuchten Proben die Produktgemische vielfach zu schwer sind, also die durchschnittliche Kettenlänge zu hoch ist. Hieraus ergibt sich eine Einschränkung der maximal erzielbaren Ausbeute beispielsweise der Kerosinfraktion auf 50-60% der Summe aller Produkte, um die notwendigen Produkteigenschaften sicherstellen zu können.

Zum Einsatz von re-Kerosin ist zu beachten, dass aktuell eine Beimischungsquote von maximal 50% zu fossilen Kerosin-Komponenten der Qualität Jet A1 zugelassen sind. Nach dem Blendvorgang der re-



Kerosin-Komponente mit dem fossilen Kerosin muss erneut eine Qualitätssicherung durchgeführt werden. Dieser Prozess stellt die Einhaltung aller Parameter der Spezifikation für Jet-A1 sicher.

Für eine Versorgung mit Blends aus re-Kerosin und fossilem Kerosin ist eine Infrastruktur inkl. Lagerung, Blendvorrichtung und angeschlossener Qualitätssicherung notwendig. Zur Analyse der vorhandenen und sinnvoll ausbaubaren Kerosin-Infrastruktur für die Kerosin-Bedarfe in Baden-Württemberg wurde eine Studie an den Entwicklungsdienstleister CBR unterbeauftragt. Basierend auf vielen persönlichen Austauschen und der bestehenden Regulatorik wurden vier Grundoptionen für die Standortwahl des Kerosin-Blendings verglichen:

1. Blending @MiRO: Produktion synthetischer Blending-Komponenten (SBC) an der MiRO und Blending des re-Kerosin an der MiRO-Raffinerie,
2. Blending @Tanklager: Produktion synthetischer Blending-Komponenten (SBC) an der MiRO und Blending des re-Kerosin an einem bestehenden Tanklager,
3. MiRO reiner SBC-Produzent: eine reine Produktion synthetischer Blending-Komponenten (SBC) an der MiRO ohne Inverkehrbringung durch die MiRO-Gesellschafter
4. Blending @Airport: Produktion synthetischer Blending-Komponenten (SBC) an der MiRO und die Durchführung von Blending des re-Kerosin am Flughafen.

Zur Evaluierung der alternativen Optionen wurde ein mehrstufiges Bewertungsverfahren implementiert. Aus einer umfassenden Darstellung aller Möglichkeiten (Longlist) wurden Optionen zunächst anhand strenger Kriterien (Lage, aktuelle Produkte, erwartete Expertise) reduziert. Des Weiteren sind Kriterien wie die Investitions- und Betriebskosten, der Treibhausgasfußabdruck, die Anschlussfähigkeit an bestehende Infrastruktur, die Umsetzbarkeit/Genehmigungen sowie mögliche regulatorische Entwicklungen, wie die Anerkennung eines Book-and-Claim-Mechanismus, berücksichtigt worden.

Auf Grundlage der dargestellten Kriterien kommt die Studie zu dem Schluss, dass die Realisierung von Option 1 mit der MiRO-Raffinerie als SBC-Produzent und Dreh- und Angelpunkt unter Berücksichtigung einer kerosinfähigen Infrastruktur empfohlen werden kann. In diesem Zusammenhang ist es jedoch erforderlich, die Möglichkeiten der Eigenproduktion oder des Imports von fossilem Kerosin für das Blending zu evaluieren.

Des Weiteren wird die Option 2 betrachtet, bei der ein oder mehrere Tanklager außerhalb der MiRO in die Blending- und Distributionshubs integriert werden. Es ist zu berücksichtigen, dass diese bereits über Jet-, SAF- und Blending-Kompetenzen und -Kapazitäten verfügen und in die derzeitige Kerosinversorgung involviert sind.



Die Optionen 3 nimmt wegen der Notwendigkeit eines offenen Handels der SBC-Komponenten den Vorteil einer gesicherten Lieferung an STR und FKB. Aufgrund von geringem Platzangebot und Sicherheitsbedenken erweist sich Blending am Flughafen als nicht geeignet und schließt Option 4 aus.

Für die Flughäfen Stuttgart STR und Karlsruhe FKB sind insbesondere die logistisch günstig gelegenen Standorte von Tanklagern von Relevanz, die mit überschaubaren Anpassungen schnell für die Beimischung von SAF ertüchtigt werden können. Für die Realisierung ist an den jeweiligen Standorten in der Regel eine moderate Investition ausreichend, während der Nutzen in Flexibilität, Versorgungssicherheit und Redundanz ansteigt. Die Realisierung dieser Umwidmungen und Erweiterungen kann in einem kürzeren Zeitraum erfolgen, als die Projektentwicklung und -realisierung einer first-of-a-kind Methanol-to-Jet-Anlage bei der MiRO. Die Betrachtung einer derartigen Anlage war nicht Bestandteil dieser Studie.

Literaturverzeichnis

1. Umweltbundesamt (2025) Treibhausgasminderungsziele Deutschlands
2. Ministerium für Umwelt, Klima und Energiewirtschaft Baden-Württemberg (2017) Monitoring der Energiewende in Baden-Württemberg: Statusbericht 2017
3. (2015) Die Energie der Zukunft: Fünfter Monitoring-Bericht zur Energiewende
4. (2016) Klimaschutzplan 2050: Klimaschutzpolitische Grundsätze und Ziele der Bundesregierung
5. ReFuelEU Aviation Regulation – How does it affect the aviation sector?
6. ReFuelEU aviation
7. (2025) ENTWICKLUNG DES LUFTVERKEHRS IM JAHR 2024: Aktueller Stand und Ausblick 2025
8. Nowakowski, Magdalena (2024) ADV-Monatsstatistik: ADV Monthly Traffic Report
9. EuroAirport (2025) Anzahl der Flugpassagiere am Flughafen Basel-Mulhouse (EuroAirport) von 2000 bis 2024
10. Pricing von HVO100 – Eine erste Zwischenbilanz
11. Bullerdiek N, Neuling U, Kaltschmitt M (2025) Powerfuels. Springer Nature Switzerland, Cham
12. Förtsch D, Pabst K, Groß-Hardt E (2015) The product distribution in Fischer–Tropsch synthesis: An extension of the ASF model to describe common deviations. Chemical Engineering Science 138:333–346. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2015.07.005>
13. Wentrup J, Pesch GR, Thöming J (2022) Dynamic operation of Fischer-Tropsch reactors for power-to-liquid concepts: A review. Renewable and Sustainable Energy Reviews 162:112454. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2022.112454>
14. Chen J, Yang C (2019) Thermodynamic Equilibrium Analysis of Product Distribution in the Fischer-Tropsch Process Under Different Operating Conditions. ACS Omega 4:22237–22244. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b03707>
15. Wang J, Wojciechowski BW (1989) THE INFLUENCE OF KINETIC PARAMETERS ON THE FISCHER-TROPSCH PRODUCT DISTRIBUTION. Fuel Science and Technology International 7:1139–1177. <https://doi.org/10.1080/08843758908962283>
16. Todici B, Ma W, Jacobs G et al. (2014) Effect of process conditions on the product distribution of Fischer–Tropsch synthesis over a Re-promoted cobalt-alumina catalyst using a stirred tank slurry reactor. Journal of Catalysis 311:325–338. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2013.12.009>
17. Fuchs C, Arnold U, Sauer J (2023) (Co -)Oligomerization of Olefins to Hydrocarbon Fuels: Influence of Feed Composition and Pressure. Chemie Ingenieur Technik 95:651 – 657. <https://doi.org/10.1002/cite.202200209>
18. Fuchs C, Arnold U, Sauer J (Co -)Oligomerization of Olefins to Hydrocarbon Fuels: Influence of Feed Composition and Pressure, vol 95
19. Jan O, Song K, Dichiaro A et al. (2019) Oligomerization of supercritical ethylene over nickel-based silica-alumina catalysts. Chemical Engineering Science 197:212–222. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.12.018>

20. Ying L, Zhu J, Cheng Y et al. (2016) Kinetic modeling of C2–C7 olefins interconversion over ZSM-5 catalyst. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry* 33:80–90.
<https://doi.org/10.1016/j.jiec.2015.09.021>
21. Kim YT, Chada JP, Xu Z et al. (2015) Low-temperature oligomerization of 1-butene with H-ferrierite. *Journal of Catalysis* 323:33–44. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2014.12.025>
22. Bube S, Bullerdiek N, Voß S et al. (2024) Kerosene production from power-based syngas – A technical comparison of the Fischer-Tropsch and methanol pathway. *Fuel* 366:131269.
<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.131269>
23. Fuchs C, Arnold U, Sauer J (2025) Synthesis of sustainable aviation fuels via (co-)oligomerization of light olefins. *Fuel* 382:133680. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.133680>
24. Scott Hoy (2004) Hydrocarbon Class Analysis of Conventional and Synthetic Aviation Turbine Fuels by ASTM D8396: Flow-modulated GCxGC-FID using the Agilent Reverse Flow Modulator and 8890 GC
25. Betz M, Fuchs C, Zevaco TA et al. (2022) Production of hydrocarbon fuels by heterogeneously catalyzed oligomerization of ethylene: Tuning of the product distribution. *Biomass and Bioenergy* 166:106595. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2022.106595>
26. Fuchs C, Arnold U, Sauer J Synthesis of sustainable aviation fuels via (co-)oligomerization of light olefins, vol 382
27. Nelson SD, Seybold PG (2001) Molecular structure-property relationships for alkenes. *J Mol Graph Model* 20:36–53. [https://doi.org/10.1016/S1093-3263\(01\)00099-7](https://doi.org/10.1016/S1093-3263(01)00099-7)
28. Stefanis E, Constantinou L, Panayiotou C (2004) A Group-Contribution Method for Predicting Pure Component Properties of Biochemical and Safety Interest. *Ind Eng Chem Res* 43:6253–6261.
<https://doi.org/10.1021/ie0497184>
29. Boot MD, Tian M, Hensen EJ et al. (2017) Impact of fuel molecular structure on auto-ignition behavior – Design rules for future high performance gasolines. *Progress in Energy and Combustion Science* 60:1–25. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2016.12.001>
30. Mehl M, Faravelli T, Giavazzi F et al. (2006) Detailed Chemistry Promotes Understanding of Octane Numbers and Gasoline Sensitivity. *Energy Fuels* 20:2391–2398. <https://doi.org/10.1021/ef060339s>
31. Perdih A (2016) Introduction of Branching Degrees of Octane Isomers. *Acta Chim Slov* 63:411–415.
<https://doi.org/10.17344/acsi.2016.2361>
32. Han W-Q, Yao C-D (2015) Research on high cetane and high octane number fuels and the mechanism for their common oxidation and auto-ignition. *Fuel* 150:29–40.
<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2015.01.090>
33. Jabbarzadeh A, Atkinson JD, Tanner RI (2002) The effect of branching on slip and rheological properties of lubricants in molecular dynamics simulation of Couette shear flow. *Tribology International* 35:35–46. [https://doi.org/10.1016/S0301-679X\(01\)00089-5](https://doi.org/10.1016/S0301-679X(01)00089-5)
34. Carl R. Noller. *Chemistry of Organic Compounds*. 3rd Edition. W.B. Saunders Company
35. Heck SM, Pritchard HO, Griffiths JF (1998) Cetane number vs. structure in paraffin hydrocarbons. *Faraday Trans* 94:1725–1727. <https://doi.org/10.1039/a800861b>

Abbildungsverzeichnis

| | |
|---|----|
| Abbildung 1: Gant-Diagramm der Projektstrukturierung und des zeitlichen Ablaufes..... | 10 |
| Abbildung 2 Passagierzahlen, Kerosinverbrauch und Prognose über die Jahre 1970 bis 2048 in Baden-Württemberg..... | 13 |
| Abbildung 3 Kennzahlen möglicher Ausweichflughäfen..... | 14 |
| Abbildung 4 Kraftstoffbedarf in Baden-Württemberg über die letzten 50 Jahre..... | 15 |
| Abbildung 5 Kerosin zu Diesel Verhältnis in den Mitteldestillaten..... | 16 |
| Abbildung 6: Massenanteil der Kohlenwasserstoffe als Funktion der Kettenwachstumswahrscheinlichkeit (Darstellung entnommen aus Wentrup et al. [IKFT REF 3], lizenziert unter CC BY-ND 4.0). | 18 |
| Abbildung 7: Massenanteil der Kohlenwasserstoffe als Funktion der Kettenlänge für verschiedene Feed Zusammensetzungen (Grafik entnommen aus Fuchs et al. [IKFT REF 7], lizenziert unter CC BY-ND 4.0).. | 19 |
| Abbildung 8: In der Datenbank erfasste Produktzusammensetzungen aus vorausgegangenen Projekten sowie Publikationen [IKFT REF 7,12]. | 21 |
| Abbildung 9: Durch die modifizierten Maxwell-Boltzmann-Verteilung modellierte Dichteverteilungen (links) sowie Summenverteilungen (rechts) in Abhängigkeit von α | 23 |
| Abbildung 10: Vergleich der experimentell bestimmten sowie der modellierten Verteilungen für die im Projekt reFuels – Demo durchgeführten Versuche. | 24 |
| Abbildung 11: Gegenüberstellung von eindimensionaler (oben links) sowie zweidimensionaler GC Analytik (oben rechts) für ein hydriertes Rohprodukt. Analyse der verschiedenen Kraftstofffraktionen nach Produktaufbereitung durch Destillation und Hydrierung (unten). | 26 |
| Abbildung 12: Qualitativer Einfluss der Prozessparameter auf α | 28 |
| Abbildung 13: Vergleich der experimentellen Daten und der modellierten Werte für α | 30 |
| Abbildung 14: Änderung von α bei Änderung der Prozessparameter..... | 32 |
| Abbildung 15: Produktanteile in Abhängigkeit von α (Linien: Modell, Punkte: Experimentelle Daten). ... | 33 |
| Abbildung 16: Wasserstoffbedarf zur Hydrierung der Kerosinfraktion in der Produktaufbereitung über α bezogen auf die Rohproduktmenge (schwarz) sowie die Kerosinfraktion (rot) | 34 |
| Abbildung 17: Berechnete maximale Kohlenstoff- und Energiegehalt-Ausbeuten für die Kraftstofffraktionen bei den Betriebspunkten $\alpha = 2,4$ (Zielprodukt: Benzin), $\alpha = 5,5$ (Zielprodukt: Kerosin) und $\alpha = 6,0$ (Zielprodukt: Kerosin+Diesel). | 35 |
| Abbildung 18: Siedetemperatur in Abhängigkeit von der Kettenlänge (oben links) sowie experimentelle und modellierte Siedekurven für einige ausgewählte Rohproduktzusammensetzungen | 37 |
| Abbildung 19: Dichte bei 15 °C sowie Grenzwerte nach Norm (links) und Brennwert (rechts) in Abhängigkeit von der durchschnittlichen Kettenlänge für verschiedene Produktfraktionen. Die gepunkteten grauen Linien stellen jeweils lineare Anpassungen der experimentellen Daten dar. | 38 |
| Abbildung 20: Flammpunkt in Abhängigkeit von der Temperatur des Siedebeginns für Kerosin- und Dieselpben. Grenzwerte nach Norm als gestrichelte und lineare Anpassung der Messdaten als gepunktete Linien. Auf der oberen x-Achse ist die dem Siedebeginn nach Abbildung 18 oben links modellierte entsprechende minimale Kettenlänge aufgetragen. | 39 |
| Abbildung 21: Oktanzahl (RON) in Abhängigkeit der durchschnittlichen Kettenlänge (links), vom Iso Index (Verhältnis verzweigter und linearer Komponenten, mitte) sowie vom Olefin Index (Verhältnis | |

| | |
|--|----|
| olefinischer und paraffinischer Komponenten, rechts) sowie Grenzwert für Ottokraftstoffe nach DIN EN 228..... | 40 |
| Abbildung 22: Kinematische Viskosität bei -20 °C und -40 °C für Kerosinproben in Abhängigkeit von der Dichte bei 15 °C. Grenzwerte nach ASTM D7566 und ASTM D1655 als gestrichelte und exponentielle Anpassung der Messdaten als gepunktete Linien. Auf der oberen x-Achse ist die auf Basis der Dichte nach Abbildung 19 links modellierte entsprechende durchschnittliche Kettenlänge aufgetragen..... | 41 |
| Abbildung 23: Viskosität bei 40 °C sowie Cetanzahl in Abhängigkeit von der Dichte für Dieselpben. Grenzwerte nach EN 590 als gestrichelte, lineare Anpassungen als gepunktete Linien. Auf der oberen x-Achse ist die auf Basis der Dichte nach Abbildung 19 links modellierte entsprechende durchschnittliche Kettenlänge aufgetragen. | 43 |

Tabellenverzeichnis

| | |
|---|----|
| Tabelle 1: Übersicht über die bewerteten Analysemethoden sowie Ergebnis der Bewertung..... | 25 |
| Tabelle 2 Angepasste Modellparameter zur Bestimmung von α auf Basis der Prozessparameter. | 31 |
| Tabelle 3: Dichte und Kälteeigenschaften ausgewählter Kerosinproben mit durchschnittlichen Kettenlängen im Bereich von 10.5 bis 12.0. Die Einhaltung der in der Norm vorgesehenen Werte wird durch farbliche Kennzeichnung (grün = innerhalb der Norm, gelb = grenzwertig, rot = außerhalb der Norm) verdeutlicht. | 42 |
| Tabelle 4: Unterarbeitspakete und Leitfragen der in Arbeitspaket B durchgeführten Konzeptstudie. | 45 |

Anlagenverzeichnis

Zu diesem Dokument gehören folgende Anlagen:

- Konzeptstudie zur Entwicklung einer skalierbaren Infrastruktur für Kerosin-Fractionen unter Berücksichtigung geographischer und technischer Rahmenbedingungen (14.11.2025, CBR Sustainability Partners)