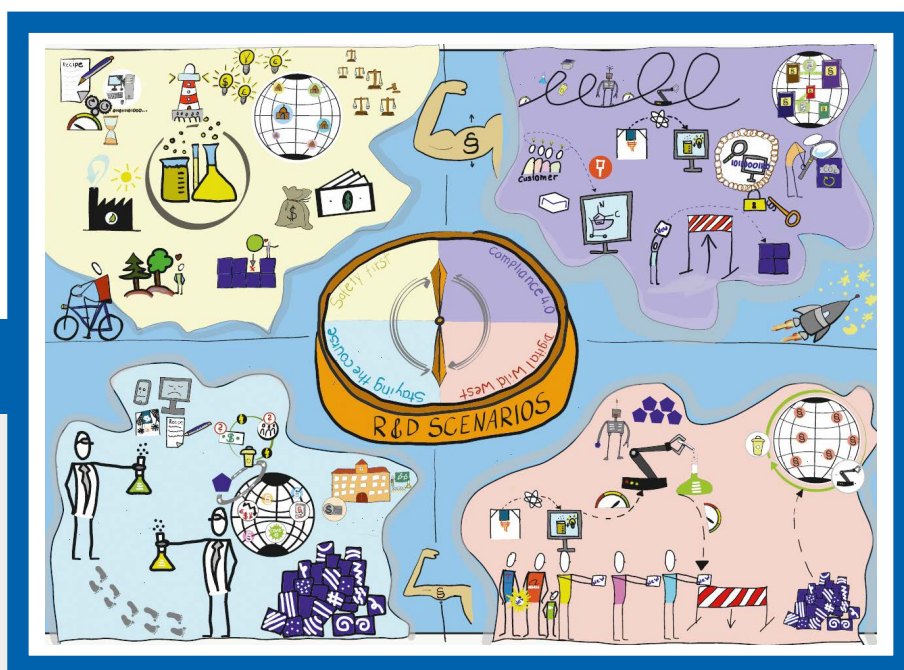


Bunsen-Magazin

Zeitschrift der Deutschen Bunsen-Gesellschaft
für physikalische Chemie



Energy, Circular Economy

Themenschwerpunkt

Editorial

Sustainability – Key Element in
EuChemS Policy

Statement

Wie sich russisches
Erdgas in der deutschen
und europäischen
Energieversorgung
ersetzen lässt

European Green Deal

Ein pragmatischer
Ansatz?

New Institutes

Blue Energy

Haben wir bereits Ihre E-Mail-Adresse?

Wir möchten klimafreundlich arbeiten und Sie gerne auf dem neuesten Stand halten und Ihnen aktuelle Informationen und Neuigkeiten zur **physikalischen Chemie und aus der DBG** liefern.

Dafür brauchen wir Ihre E-Mail-Adresse!

Und so funktioniert's:

Schreiben Sie uns eine Mail an geschaeftsstelle@bunsen.de oder gehen Sie auf www.bunsen.de unter [Login](#) und geben Sie Ihre Mitgliedsnummer und Passwort an. Unter [Meine Mitgliedsdaten](#) tragen Sie Ihre E-Mail-Adresse ein.

Kennen Sie den DBG-Stellenmarkt?

Nutzen Sie für Ihre Stellenausschreibung bunsen.de oder das Bunsen-Magazin

Ihre Vorteile sind:

- Gezielte Ansprache von Fachkräften aus der Physikalischen Chemie
- Kostenfreier Online-Stellenmarkt für Promotionen, Postdocs und Nachwuchsgruppenleitungen

Preise und Formate finden Sie auf www.bunsen.de/stellenmarkt

Sprechen Sie uns gerne an – Sie erreichen uns unter geschaeftsstelle@bunsen.de oder 069 7917-363

IMPRESSUM

Bunsen-Magazin

Heft 3 Jahrgang 24

Herausgeber:
Vorstand der Deutschen
Bunsen-Gesellschaft
Florian Budde
Ralf Ludwig
Ulrich Ott

Schriftleitung:
Katharina Al-Shamery
Institute of Chemistry,
School of Mathematics and Natural Sciences
Carl von Ossietzky University Oldenburg
P.O. Box 2503
D-26111 Oldenburg, Germany
Phone (fax): +49-441-798-3853 (-3089)
Email: katharina.al.shamery@uol.de

Geschäftsführerin der Deutschen
Bunsen-Gesellschaft
Elisabeth Kapatsina
Varrentrappstr. 40-42
D-60486 Frankfurt
Tel.: 069 / 79 17 363
Fax: 069 / 79 17 1363
E-Mail: geschaeftsstelle@bunsen.de

Technische Herstellung:
die printzen GmbH
Gewerbepark 21
D-92289 Ursensollen
Tel.: +49 9628 / 924 89-0
Fax: +49 9628 / 924 89-10
E-Mail: info@dieprintzen.de



Zum Titelbild:
Four possible scenarios for materials R&D in 2030, drawing by
Susanne Marx, BASF. See article by Bernhard von Vacano, Maxi-
milian Hofmann and Carla Seidel page 79.

Das Bunsen-Magazin
wurde auf recyceltem
Papier gedruckt.

Floris Rutjes

Sustainability – Key Element in EuChemS Policy

Dear members of the German Bunsen Society for Physical Chemistry,

Do you know that you are a member of the European Chemical Society, or in short EuChemS? Through your membership of the *Deutsche Bunsen-Gesellschaft*, which is one of the 40 EuChemS member societies, you are also part of EuChemS. In this way, EuChemS represents approximately 120,000 individual chemists from all over Europe. Having its offices in Brussels, EuChemS is active at the European level and I would like to use this occasion to highlight some of our activities, in particular those related to sustainability, a topic that is important to us.

In 2019, the International Year of the Periodic Table, the *EuChemS Periodic Table* was created to address scarcity and societal challenges associated with various elements. You may be familiar with this somewhat strangely shaped iconic Periodic Table (<https://www.euchems.eu/euchems-periodic-table/>), that was meant to draw not only the attention of chemists but also of the general public to sustainability. To keep generating attention for these matters, EuChemS organizes two webinars per year focusing on various aspects of one particular element. After successful webinars on carbon and lithium last year, the next one will be on nitrogen (<https://www.euchems.eu/events/nitrogen-workshop/>) where the sustainable production of food, requiring nitrogen for making fertilizers, will be discussed by scientists, policy makers and members of the European Parliament.

Another activity is the role of EuChemS, represented by myself in my capacity as President, and seconded by EuChemS Secretary-General Nineta Hrastelj, as member of the High-Level Roundtable on the Chemicals Strategy for Sustainability. This is a committee that has been issued by the European Commission and we, representing the academic European chemical community, are an important stakeholder in helping to achieve a successful implementation of the strategy. EuChemS contributes by feeding in perspectives on new and innovative science and technology relevant to effective chemicals management. Equally important, we will emphasize the role of education, since without training world-class scientists and innovators,



we will not be able to develop the required sustainable solutions. For drafting its advice, EuChemS relies on a panel that was recently set-up, consisting of experts in the field of sustainability. Having this panel, and with active support from our members, I am confident that EuChemS can play a relevant role as a member of this roundtable.

A fairly recent EuChemS activity relating to sustainability concerns the global challenge to deal with plastic pollution and waste. Only a few weeks ago, the 5th United Nations Environment Assembly (UNEA-5) took place in Nairobi (Kenya). One of the items on the agenda was to make important steps forward to a new and independent science-policy interface to address waste and pollution at a global scale. In other words, the goal was to establish an Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC)-type platform, supported by governments, industries, and chemical organizations around the world, to install effective global science-based advice mechanisms to mitigate the damaging effects of waste and pollution. EuChemS recently took part in the Burlington Consensus, a panel discussion organized by the Royal Society of Chemistry (RSC), which was aimed at raising awareness and promoting this initiative, thereby unequivocally expressing its support for creating such an intergovernmental panel. Although not yet officially announced in the form of a ratified text, we now know that the outcome of UNEA-5 was positive and that the first preparations will be made later this year to create such a global body to address the pollution and waste challenges.

I hope to have shown that sustainability is an important topic for EuChemS and that many of our activities are related to sustainability in one way or another. I also would like to invite you to have a closer look at our website (<https://www.euchems.eu/>) to see all our activities, many of which are organized by the divisions, working parties and by the European Young Chemists' Network (EYCN). I am aware that quite some members of the German Bunsen Society are actively participating in EuChemS activities, but those who are not I would like to encourage to step in. Bear in mind that you are also a member of EuChemS and that this membership opens up opportunities for you to play a role at the European level. Isn't that an attractive perspective?

Editorial	Floris Rutjes Sustainability – Key Element in EuChemS Policy	65
Statement	Ad-hoc-Stellungnahme, Leopoldina - Nationale Akademie der Wissenschaften - 8. März 2022 Wie sich russisches Erdgas in der deutschen und europäischen Energieversorgung ersetzen lässt	67
European Green Deal	Werner Brinker Von der (Un-) Möglichkeit einer klimaneutralen Energieversorgung in Deutschland	72
	Florian Budde Ein pragmatischer Ansatz?	77
	Bernhard von Vacano, Maximilian Hofmann and Carla Seidel Driving Sustainability of Polymeric Materials	79
	Carsten Gerhardt Eine Heimat für die Circular Economy	83
	Patrick Glöckner and Felix Müller Speciality Chemicals and how they contribute to the Quest for Circular Plastics Solutions	85
New Institutes	Peter H. Seeberger und Matthew B. Plutschack Transformation der Chemie	88
	Martina Neises-von Puttkamer Fuels for the Future	90
	Bernd Rech and Robert Schlögl with the assistance of Steffi Hlawenka (HZB), Katarzyna Skorupska (FHI) and Tobias Sontheimer (HZB) CatLab: Hydrogen and Beyond - Thin-film Catalysts for Sustainable Chemistry with Renewable Electricity	93
	Eva Unger, Steve Albrecht and Antonio Abate HySPRINT: Synergetic Halide Perovskites Material and Device Development for Future Photovoltaics	96
Research	Yuping Wu und Rudolf Holze Batterie oder Superkondensator oder Beides? Die Verschmelzung zweier elektrochemischer Speicheroptionen	100
	Marie Claußen und Saskia Bültena Blue Energy	103
Waste Management	Melanie Wallisch Wohin mit unseren radioaktiven Abfällen?	108
	Frank Wille CASTOR in Warteposition, aber bitte sicher.	112
Tagungen	Ricardo A. Mata and Martin Suhm International Bunsen Discussion Meeting Benchmark Experiments for Numerical Quantum Chemistry	115
Nachrichten	Personalia, DBG-Veranstaltungen, weitere Veranstaltungen	117
GDCh	Auszeichnung für eine Pionierin der Quantenchemie	119

Ad-hoc-Stellungnahme, Leopoldina - Nationale Akademie der Wissenschaften - 8. März 2022

Wie sich russisches Erdgas in der deutschen und europäischen Energieversorgung ersetzen lässt

1. Das Szenario: ein Stopp russischer Gaslieferungen

Der Krieg gegen die Ukraine hat zu einer intensiven Debatte über angemessene Wirtschaftssanktionen der Europäischen Union (EU) gegenüber Russland geführt. Dabei steht auch die Maßnahme zur Diskussion, keine russischen Erdgaslieferungen in die EU mehr zuzulassen. Zugleich könnte Russland jederzeit selbst die Entscheidung treffen, seine Erdgaslieferungen in die EU einzustellen – etwa bei einer Ausweitung der SWIFT-Sanktionen. In beiden Fällen wäre Deutschland stark betroffen.

Diese Ad-hoc-Stellungnahme der Nationalen Akademie der Wissenschaften Leopoldina diskutiert, auf welche Weise und wie schnell russisches Erdgas in der EU und speziell in Deutschland kurz- sowie mittelfristig durch den Einsatz anderer, insbesondere erneuerbarer Energieträger ersetzt werden könnte. Dabei erweist es sich als sinnvoll, die kurz-, mittel- und langfristigen Aspekte der Substitution des russischen Erdgases getrennt zu diskutieren, immer vor dem Hintergrund geostrategischer Überlegungen zur mittelfristigen Transformation der Energieversorgung und mit dem langfristigen Ziel eines resilienten und klimaneutralen europäischen Energiesystems.

Die Stellungnahme kommt zu dem Schluss, dass auch ein kurzfristiger Lieferstopp von russischem Gas für die deutsche Volkswirtschaft handhabbar wäre. Engpässe könnten sich im kommenden Winter ergeben, es bestünde jedoch die Möglichkeit, durch die unmittelbare Umsetzung eines Maßnahmenpakets die negativen Auswirkungen zu begrenzen und soziale Auswirkungen abzufedern.

2. Die Ausgangssituation: Deutschland importiert 50 % seines Erdgases aus Russland¹

Erdgas hat in Deutschland einen Anteil am Primärenergieverbrauch von über 25 Prozent und wird überwiegend für industrielle Prozesse sowie von privaten Haushalten eingesetzt.² Erdgas weist gegenüber Kohle und Erdöl geringere CO₂-Emissionen in Relation zum jeweiligen Brennwert auf und ist daher ein wichtiger Energieträger auf dem Weg zur Klimaneutralität. Erst vor kurzem hat die Europäische Kommission im Rahmen ihrer Energie-Taxonomie Erdgas als notwendig eingestuft, um auf dem Transformationspfad hin zur Klimaneutralität in einer Übergangsphase sowohl den Energiebedarf in der EU kontinuierlich und zuverlässig zu decken als auch eine Stabilitätsreserve zu erlangen.

Die 27 Mitgliedsstaaten der EU importierten im Jahr 2019 insgesamt 4277 Terawattstunden (TWh) an Erdgas, davon 945 TWh an verflüssigtem Erdgas (Liquefied Natural Gas - LNG), der Rest über Pipelines. Davon stammten aus Russland 1768 TWh, 1612 TWh über Pipelines und 156 TWh LNG. Deutschland importierte 882 TWh im Jahr 2019,³ davon etwas mehr als die Hälfte (450 TWh) aus Russland.⁴ Die restliche der in Deutschland verfügbare Menge an Erdgas setzten sich aus Pipeline-Importen aus Norwegen und den Niederlanden sowie zu einem geringen Anteil aus in Deutschland gefördertem Erdgas zusammen.

Deutschland verfügt gegenwärtig über 51 Erdgas-Kavernenspeicher mit einer Kapazität von insgesamt 275 TWh (25 Mrd. m³).⁵ Dies entspricht etwa 30 % des Jahresverbrauchs. Allerdings sind die Speicher zurzeit⁶ nur zu 27 % gefüllt.⁷ Das ist wenig im Vergleich zu früheren Jahren um die gleiche Zeit (50-80 %). Die Mengen entsprechen etwa einem durchschnittlichen Monatsverbrauch, wobei zu berücksichtigen ist, dass in der kalten Jahreszeit der Verbrauch mit ca. 120 TWh pro Monat höher liegt als im Sommer mit ca. 50 TWh.⁸

Autorinnen und Autoren siehe Seite 71
Deutsche Akademie der Naturforscher Leopoldina e. V.
– Nationale Akademie der Wissenschaften –
Jägerberg 1, 06108 Halle (Saale)
Telefon: 0345 – 47 239 – 600
E-Mail: leopoldina@leopoldina.org

¹ Aufgrund verschiedener Kennzahlen und Bezugsgrößen können die hier aufgeführten Zahlen leicht abweichen von anderen Quellen.

² Die Datengrundlagen für die Angaben in Abschnitt 2 sind den folgenden Quellen zu entnehmen: EU Energy in figures: Statistical pocketbook (2021, S. 69, 70) für die Zahlen zu 2019 und: BP Energy statistics (2021) für die Zahlen zu 2020.

³ Zahlen aus: BMWI, Energiedaten, Tabelle 3, siehe: <https://www.bmwi.de/Redaktion/DE/Artikel/Energie/energiedaten-gesamtausgabe.html>

⁴ BP Statistical Review of World Energy 2020, Seite 43. Zahlen für 2019. Angaben sind in m³ mit pauschalisierter Umrechnung in Heizwert (40MJ/m³); daher prozentualer Anteil an der Gesamtmenge verwendet.

⁵ Eine Tochterfirma des russischen Konzern Gazprom erwarb im Jahr 2015 die Gasspeicher von BASF-Wintershall und hält damit jetzt rund 25 % der deutschen Gas-Speicher-Kapazität.

⁶ Stand vom 5. März 2022.

⁷ Aggregated Gas Storage Inventory. Link: <https://agsi.gie.eu/#/>

⁸ BDEW. Link: <https://www.bdew.de/service/daten-und-grafiken/monatlicher-erdgasverbrauch-deutschland/>

Angesichts dieser Ausgangssituation würde das Szenario eines Stopps russischer Erdgaslieferungen in die EU von deutscher und europäischer Seite ein zeitlich gestaffeltes Vorgehen mit Sofortmaßnahmen, einer mittelfristigen Diversifizierung der Energieversorgung und einer Einbettung dieser Maßnahmen in einen glaubwürdigen Transformationspfad hin zu einer nachhaltigen Energieversorgung erfordern.

3. Sofortmaßnahmen: EU-weit koordinierte Erhöhung der Flüssiggas-Importe und stärkere staatliche Regulierung der Übertragungsinfrastruktur bei Reduktion der Erdgas-Nachfrage

Flüssiggas-Importe können theoretisch den Gas-Bedarf ersetzen, ...

Flüssiggas aus verschiedenen Teilen der Welt könnte das russische Erdgas dort ersetzen, wo Gas in der kurzen Frist nicht substituierbar ist. Deutschland verfügt allerdings noch nicht über eigene LNG-Terminals. Deren Aufbau würde vermutlich mindestens 3 Jahre benötigen, wenngleich für drei Standorte Planungen bereits fortgeschritten sind. Zwar könnten Terminals anderer Länder, deren Auslastung in den vergangenen Jahren eher niedrig war, grundsätzlich ohne weiteren zeitlichen Verzug für den Import von LNG nach Deutschland genutzt werden. Doch die Voraussetzungen dafür sind erheblich: Erstens müsste die globale Verfügbarkeit von LNG hinreichend hoch sein – dies dürfte letztlich eine Frage des Preises, langfristiger Lieferverpflichtungen und der internationalen Kooperationsbereitschaft sein. Zweitens müsste die Anbindung der LNG-Terminals an das deutsche Pipelinenetz mit einer ausreichenden Kapazität gewährleistet sein.

Insgesamt haben die in der EU-27 aktuell bestehenden LNG-Terminals (2020) eine Umschlagskapazität von 1715 TWh.⁹ Das entspricht rein rechnerisch etwa den gegenwärtig aus Russland in die EU importierten 1768 TWh an Erdgas und LNG. Ein Teil dieser vorhandenen Kapazität wird aber bereits jetzt für den Gasimport genutzt. Im Jahr 2020 waren dies 798 TWh.¹⁰ Dementsprechend stünden nach einem russischen Lieferstopp, bei dem auch die 156 TWh LNG aus Russland wegfielen, knapp 1100 TWh für Importe aus anderen Weltregionen zur Verfügung. Zudem verfügt die Türkei über weitere LNG Terminals, die helfen könnten, über die existierenden Pipelines Europa zu versorgen.

... aber Transport-Kapazitäten erschweren Flüssiggas-Importe

Rein rechnerisch könnte ein Importstopp des russischen Gases somit kurzfristig zu einem erheblichen Teil kompensiert werden, da rund 1100 TWh an freier Kapazität rund 1768 TWh an bisherigen Importen aus Russland gegenüberstehen. Diese Überschlagsrechnung dürfte allerdings die Obergrenze der kurzfristigen Kompensationsmöglichkeiten darstellen, da aktu-

ell die Transportkapazitäten fehlen, um diese Kompensation vollständig durchzuführen. In der Umsetzungspraxis würden sie schon deshalb deutlich geringer ausfallen. Um eine Versorgung im kommenden Winter unabhängig von der Verfügbarkeit russischen Gases sicherzustellen, müsste zudem die Einspeicherung unterjährig beschaffter Mengen sichergestellt werden. Da sich die Gasspeicher in Deutschland in privater Hand befinden, wären daher geeignete Regulierungsmaßnahmen notwendig. Die Speicherbetreiber tragen ansonsten ein zu hohes wirtschaftliches Risiko. Sind die Gasspeicher gefüllt, könnte Gazprom den Markt schnell mit billigem Gas fluten und damit den europäischen Gasimporteuren einen erheblichen wirtschaftlichen Schaden zufügen. Füllen die Gasimporteure ihre Speicher in Erwartung dieser niedrigen Preise nicht, dann könnte das Angebot verknappt und die Preise weiter in die Höhe getrieben werden.

Flüssiggas sollte durch die EU beschafft werden

Es ist zwar aktuell nur ein Szenario, dass es zu einem Ausfall der russischen Erdgaslieferungen kommen könnte. Doch wäre es unverantwortlich, die Bemühungen um eine weitgehende Substitution der möglicherweise wegfallenden russischen Gaslieferungen erst dann in Gang zu setzen, wenn dieser Fall eintritt. Vielmehr muss dies umgehend geschehen, um die Speicherstände so weit wie möglich vor dem kommenden Winter auffüllen zu können.

Insbesondere ist jetzt zu entscheiden, ob die EU möglichst schnell angesichts eines nicht unwahrscheinlichen Importstopps für russisches Erdgas auf dem Gasmarkt als koordinierter und verbindlich handelnder, gegebenenfalls sogar von den privaten Gasimporteuren das Anlegen von Gasreserven einfordernder Nachfrager auftreten sollte. Denn die teure Beschaffung und Einspeicherung von Gas ist in der gegenwärtigen sehr unsicheren Lage für die Speicherbetreiber riskant und vermutlich wirtschaftlich unattraktiv. Es steht zu befürchten, dass ansonsten die Gasimporteure, die ihre Gasspeicher füllen sollten, um mögliche Lieferausfälle abzufedern, vor dem Eintreten des Importstopps für russisches Erdgas zum Spielball des strategischen Preissetzungsverhaltens russischer Exporteure werden und bei fortgesetzter Lieferung aus Russland auf dem jetzt teurer eingekauften Gas sitzen bleiben. Auf Grund dieser Befürchtung könnten die Gasimporteure sich beim Füllen ihrer Speicher zurückhalten. Dieses Dilemma könnte die EU überwinden, wenn sie kurzfristig eine gemeinschaftliche Strategie entwickelt, um die Importe für Flüssiggas zu erhöhen sowie die Nachfrage nach Erdgas zu reduzieren und somit die Speicher so weit wie möglich vor dem Winter zu befüllen.

Struktur und Nutzung der Übertragungsinfrastruktur könnten staatlich stärker reguliert werden

Da die Energieversorgung ein Element staatlicher Daseinsvorsorge ist, reichen die Optionen für die künftige Gestaltung des europäischen Energieversorgungssystems im Grundsatz von einer vollständig staatlichen Energieversorgung bis hin zu einer rein privatwirtschaftlichen Energieversorgung unter staatlicher Regulierung und Aufsicht. Sinnvoll wäre es nicht zuletzt, dabei Mikromanagement zu vermeiden. Im Mittelpunkt der Überlegungen muss die Übertragungsinfrastruktur stehen, die aus Energiehäfen, Großspeichern und den Übertragungsnet-

⁹ International Group of Liquefied Natural Gas Importers, Annual Report 2021, Addition der Kapazitäten EU27, S. 55-56. Umrechnung Million Tonnen pro Jahr in TWh mit einem Faktor 13.9 TWh/Mt.

¹⁰ International Group of Liquefied Natural Gas Importers, Annual Report 2021, Addition der LNG Importe EU27, S.30. Umrechnung Million Tonnen pro Jahr in TWh mit einem Faktor 13.9 TWh/Mt.

zen („Energieautobahnen“) besteht. Sie könnten weiterhin privat bewirtschaftet werden, dann aber in Struktur und Nutzung stärkerer staatlicher Regulierung unterliegen. Die übrigen systemischen Elemente von Bereitstellung, Wandlung, Verteilung und Nutzung der Energie könnten wie bisher privatwirtschaftlich innerhalb eines klaren und stabilen staatlichen Rahmens organisiert sein.

Wege zur Reduktion der Erdgas-Nachfrage nutzen

Zusätzlich zum Bemühen, ausgefallene Erdgasimporte aus Russland durch Importe aus anderen Bezugsquellen zu ersetzen, stehen als kurzfristige Reaktion verschiedene Möglichkeiten zur Verfügung, die Nachfrage nach Erdgas zu reduzieren. Dazu zählt zunächst der Ersatz von Erdgas durch andere Energieträger, etwa durch eine stärkere Kohleverstromung. Dabei muss der Rückgriff auf den stärkeren Einsatz des fossilen Energieträgers Kohle nicht zu Lasten des eingeschlagenen Transformationspfads hin zur Klimaneutralität gehen: Der europäische Emissionshandel (ETS) legt im Strom- und Industriesektor ohnehin eine Emissionsobergrenze fest. Eine kurzfristig intensivierte Kohleverstromung wird daher zwar zu zusätzlichen Kostenbelastungen für die vom ETS erfassten Unternehmen – und mittelbar über Überwälzungsprozesse Kostenbelastungen für deren Kunden – führen, aber nicht zu einer Erhöhung der europäischen Emissionen. Darüber hinaus sollten kurzfristig umsetzbare Effizienzmaßnahmen in Industrie und Haushalten ergriffen werden

Wenngleich kurzfristige Reaktionen auf einen Ausfall der russischen Gasimporte die Transformation zur Klimaneutralität nicht aufhalten würden, ist jedoch klar, dass dieser Weg unter den aktuell zugespitzten Bedingungen zu höheren Kosten verwirklicht werden müsste, als es ursprünglich zu erwarten war. Da diese Belastungen einkommensschwächere Haushalte tendenziell verhältnismäßig stark trafen, wäre es umso dringlicher, diese Haushalte gezielt dafür zu kompensieren. Dazu wurden bereits zahlreiche Vorschläge vorgelegt; insbesondere bietet sich eine Strategie an, welche die Transformation durch einen umfassenden und europaweit einheitlichen CO₂-Preis für alle Sektoren, Technologien und Emittenten vorantreibt und die dabei entstehenden Einnahmen weitgehend für die sozialverträgliche Kompensation der Transformationsbelastungen nutzt.¹¹

Die Akzeptanz der Maßnahmen durch die Bevölkerung ist ein entscheidender Faktor für die Umsetzbarkeit. Die zusätzlichen Kosten, die sich aus der Beschaffung von Gasmengen auf dem Weltmarkt, der Beschleunigung von Effizienzmaßnahmen sowie durch die Abfederung der Belastungen für Haushalte mit unteren und mittleren Einkommen ergeben, sind leistbar. Deutschland hat ausreichend finanzpolitischen Spielraum.

4. Substitution des russischen Erdgases bei Stromerzeugung und Wärmegewinnung: quantitativ und qualitativ unterschiedliche Herausforderungen

Bei einer Analyse der strategischen Optionen zur kurz-, mittel- und langfristigen Minderung der Abhängigkeit von Erdgasimporten aus Russland ist es sinnvoll, Stromerzeugung und Wärmegewinnung getrennt zu betrachten. Die Hauptnutzung des

russischen Erdgases in Deutschland liegt in der Wärme- und nicht in der Stromerzeugung. Bilanziell ist der Ersatz von Gas zur Stromerzeugung durch erneuerbaren Strom und Kohle bei Erhaltung der Stabilität und Verfügbarkeit des Energiesystems kurz- bis mittelfristig leistbar. Bei der Wärmeversorgung könnte es in strengen Wintern zu Einschränkungen der industriellen Wärmeversorgung kommen. Allerdings könnte die Produktion in einigen Industriesektoren teilweise bereits vorher aufgrund der steigenden Kosten für Erdgas heruntergefahren werden und somit der industrielle Gesamtbedarf an Wärmeversorgung sinken.

Substitution des russischen Erdgases bei der Stromerzeugung

Aus Erdgas wurden im Jahr 2020 in Deutschland mittels 174 TWh thermischer Energie 89 TWh Strom gewonnen.¹² Rein rechnerisch würde russisches Erdgas mit seinem Anteil von etwa 50 % ca. 45 TWh davon decken.¹³ Aus erneuerbarer Energie wurden im Jahr 2020 rund 230 TWh elektrische Energie bereitgestellt, 117 TWh davon aus Windkraft. Somit könnte ein – allerdings nur langfristig realisierbarer – Zubau von knapp 40 % der bisher installierten Erzeugungskapazität für Strom aus erneuerbaren Energien das Problem in der Gesamtbilanz lösen.

Allerdings stellt die Stromerzeugung aus Erdgas derzeit die wesentliche Möglichkeit zum Ausgleich der erheblichen Schwankungen der erneuerbaren Energiequellen dar. Diese Ausgleichsfunktion müsste langfristig durch zentrale und dezentrale Stromspeicher sowie durch aus erneuerbaren Energien gewonnenen (und importierten) Wasserstoff und dessen Rückverstromung übernommen werden. Dafür würden entsprechend Infrastrukturen für die Erzeugung und Speicherung des Wasserstoffes sowie die Übertragung des zusätzlichen Stroms benötigt. Es ist klar, dass diese Lösung in der kurzen und mittleren Frist nicht zur Verfügung stehen kann. Allerdings wäre dieser Umbauprozess zu einem späteren Zeitpunkt ohnehin nötig, um Klimaneutralität der Stromversorgung zu erreichen, und sollte daher so schnell wie möglich in Gang gesetzt werden.

Eine kurzfristige Entlastung ließe sich erreichen, wenn die disponible Leistung der Gaskraft durch disponible Leistung aus heimischer Kohle ersetzt würde, was ohne Änderungen der Infrastruktur sofort möglich ist.¹⁴ Diese Substitution von Gas- durch Kohleverstromung sollte sofort begonnen werden, um Gasmengen einzusparen und entsprechend mehr einspeichern zu können.

¹¹ Siehe hierzu Nationale Akademie der Wissenschaften Leopoldina und Rat für Nachhaltige Entwicklung: Klimaneutralität – Optionen für eine ambitionierte Weichenstellung und Umsetzung. Positionspapier, Juni 2021 (https://www.leopoldina.org/uploads/tx_leopublication/2021_RNE_Leopoldina_Klimaneutralitaet_geschuetzt.pdf)

¹² Zahlen aus: BMWI, Energiedaten, Tabellen 22, 23, siehe: <https://www.bmwi.de/Redaktion/DE/Artikel/Energie/energiedaten-gesamtausgabe.html>

¹³ Daten aus BMWI, siehe: <https://www.bmwi.de/Navigation/DE/Service/Energiedaten/energiedaten.html> (Stand 19.4.2022)

¹⁴ Hierfür stünden prinzipiell auch Atomkraftwerke (AKW) zur Verfügung. Allerdings haben bisherige Studien (u.a. des Bundesministeriums für Wirtschaft und Klimaschutz) ergeben, dass eine Verlängerung der Laufzeiten der AKW infolge der schon erfolgten langfristigen Vorbereitungen zum Abschalten der AKW technisch sehr herausfordernd und ökonomisch sehr aufwendig wäre.

Allerdings verlangsamte sich dadurch die Reduktion des CO₂-Ausstoßes aus der Stromerzeugung, die nach bisheriger Planung vorrangig durch den Kohleausstieg erreicht werden sollte. Für das Jahr 2020 würden in Deutschland 18 Mt CO₂ (für 2021: 10,4 Mt CO₂) aus der Verbrennung russischen Gases eingespart, aber dafür 45 Mt CO₂ (für 2021: 26 Mt CO₂) durch Verbrennung deutscher Kohle emittiert werden.¹⁵ Die hohe Volatilität der Zahlen zwischen den Jahren 2020 und 2021 ergibt sich aus der großen Preiserhöhung von Erdgas.

Da jedoch der Stromsektor dem ETS unterliegt, würde der verstärkte Einsatz der Kohlekraftwerke zur Substitution der Erdgasverstromung keine Steigerung der Emissionen zur Folge haben: Die Emissionen müssten im Geltungsbereich des ETS lediglich anderweitig eingespart werden, was über den Emissionshandel automatisch geschehen würde. Es wäre jedoch unverzichtbar, dass das Fit for 55-Paket konsequent entlang der Vorschläge der Europäischen Kommission umgesetzt wird, um die Klimaziele nicht zu verfehlen. Denn langfristig wird die Transformation zur Klimaneutralität dazu beitragen, die Resilienz der europäischen Energieversorgung zu stärken.

In der mittleren Frist ist es zielführend, am Kohleausstieg 2030 festzuhalten und die Transformationsaktivitäten massiv zu beschleunigen; der Kohleausstieg macht uns auch unabhängiger von russischer Kohle (aktueller Anteil an den deutschen Kohleimporten von 50 %).

Substitution des russischen Erdgases bei der Wärmeengewinnung

Eine größere Herausforderung als der Ersatz russischen Erdgases bei der Stromerzeugung stellt der Ersatz russischen Gases bei der Erzeugung von Prozess- und Heizwärme dar. Die Wärmewirkung des Erdgases kann mittel- bis langfristig durch eine Kombination aus erneuerbarem Strom und Wasserstoff ersetzt werden. Allerdings sind auch hierfür enorme zusätzliche Mengen von heimisch erzeugter sowie importierter Energie sowie eine Umrüstung der Anlagen und Infrastrukturen erforderlich.

In Deutschland wurden im Jahr 2020 für Prozesswärme 210 TWh, für private Wärmeversorgung (Heizung und Warmwasser) 253 TWh und für die Heizung von Industrie- und Geschäftsgebäuden 110 TWh eingesetzt. Von diesen insgesamt 573 TWh stammen knapp 300 TWh aus Russland, gemäß des Anteils von etwas mehr als 50 % an der deutschen Gasversorgung.¹⁶ Grundsätzlich würde auf dem Weltmarkt verfügbares Gas zunächst für Heizzwecke eingesetzt, da aufgrund gesetzlicher Vorgaben und dem Leitfaden „Krisenvorsorge Gas“¹⁷ die Versorgung „geschützter Letztverbraucher“, das sind unter anderem Haushaltskunden, höchste Priorität bei der Versorgung genießt. Eine kurzfristige Umstellung von Haushaltsheizungen auf elektrisch betriebene Wärmepumpen oder andere elektrisch betriebene Heizungen ist nicht möglich.

Ein nicht-kompensierbarer Ausfall von Gaslieferungen hätte somit aller Voraussicht nach Versorgungseinschränkungen bei Industriebetrieben zur Folge. Es ist somit ein Szenario vorstellbar, bei dem im Sommer alle Bedürfnisse der industriellen Produktion erfüllt werden, im Winter jedoch erhebliche Einschränkungen der industriellen Produktion drohen, wenn die bei uns

vorhandenen Erdgasspeicher, die bei vollständiger Füllung den gesamten Bedarf für etwa 90 Tage vorhalten, aufgebraucht wären. Folglich ist eine kurzfristige Besserung dieses Engpasses durch die möglichst schnelle und kontinuierliche vollständige Befüllung der vorhandenen Speicherkapazitäten sowie eine weitergehende mittelfristige Besserung durch die Bereitstellung weiterer Speicherkapazität zu erreichen. Zudem sind ab sofort in den Sommermonaten mit vergleichsweise reichhaltig vorhandenem Gasangebot sämtliche Effizienzmaßnahmen zu ergreifen, die das Befüllen der Speicher befördern.

5. Energiesicherheit: eine langfristige Perspektive

Insgesamt ist ein schneller spezifischer Ersatz von russischem Erdgas durch heimische erneuerbare Energie und den daraus gewinnbaren Wasserstoff nicht möglich. Dieser Ersatz ist zwar gegen Ende des Umbauprozesses des Energiesystems erforderlich, sollte aber den bisherigen Vorstellungen zufolge in großem Stil erst erfolgen, wenn der Ausstieg aus der Kohle abgeschlossen ist. Realistischerweise ist der Verzicht auf Erdgas umsetzbar, sobald entsprechende Mengen an CO₂-arm erzeugtem Wasserstoff verfügbar sind. Dieser kann nur zu einem geringen Anteil heimisch bereitgestellt werden, wenn die erneuerbaren Energien primär die Versorgung mit Strom gewährleisten sollen.

Zudem dürfen keinesfalls die ökonomischen Konsequenzen der veränderten Nachfragevolumina auf dem globalen Gasmarkt außer Acht gelassen werden: Die Verknappung von Erdgas auf den Weltmärkten aufgrund der erhöhten Nachfrage nach behältergebundenem Gas wird voraussichtlich zu erheblichen und langanhaltenden Preiserhöhungen führen. Diese Veränderungen machen es ökonomisch umso sinnvoller, die Ausbildung eines globalen und regional diversifizierten Weltmarktes für grüne Energieträger auf der Basis von Wasserstoff beschleunigt voranzutreiben.

6. Fazit

Die aktuelle Situation macht es erforderlich, den Umbau des Energiesystems noch energischer als bisher schon voranzutreiben. Dies kann durch zwei parallel ablaufende Prozesse erreicht werden: erstens die diversifizierte Internationalisierung der Versorgung und zweitens den stufenweisen Ersatz der Energieträger.

Die politischen, rechtlichen und ökonomischen Rahmenbedingungen für die Akteure des zukünftigen Energiesystems sollten europäisch angelegt werden. Nationale Strukturen sind nur im europäischen Kontext sinnvoll planbar. Dabei sollten

¹⁵ Arbeitsgemeinschaft Energiebilanzen/Umweltbundesamt: Entwicklung der spezifischen Kohlendioxid-Emissionen des deutschen Strommix in den Jahren 1990-2018. Umweltbundesamt 2019. Für die Umrechnung wurden 1,0 kg/kWh für Kohle und 0,4 kg/kWh für Gas angenommen.

¹⁶ Zahlen errechnet aus BMWI Energiedaten, Tabelle 7a und 7b, siehe: <https://www.bmwi.de/Redaktion/DE/Artikel/Energie/energiedaten-gesamtausgabe.html>

¹⁷ BDEW/VKU u.a., Krisenvorsorge Gas. Berlin 2021.

die EU-Mitgliedsstaaten vorangehen, deren Energieversorgung aktuell von Russland besonders abhängig ist. Die Konzeption ist jedoch von Anfang an mit Blick auf die gesamte EU anzulegen. Die hierfür empfohlenen Maßnahmen lassen sich in drei Zeitphasen gliedern:

Sofortmaßnahmen (kommende Wochen und Monate)

- Beschaffung von Flüssiggas auf dem Weltmarkt durch die EU, auch durch Verhandlungen mit Staaten wie Japan, USA und Südkorea
- Stärkere staatliche Regulierung von Struktur und Nutzung der privatwirtschaftlich betriebenen Übertragungsinfrastrukturen einleiten
- Ersatz von Gas durch Kohle im Stromsektor und Beschaffung der hierfür nötigen Kohlemengen
- Unmittelbarer Beginn der Einsparungen beim Gas und des Auffüllens der Speicher als Puffer für den Winter
- EU-weit koordiniert agieren
- Kompatibilität der Notfallmaßnahmen mit bestehenden Marktmechanismen sicherstellen
- Belastungen der Bürgerinnen und Bürger mit niedrigen und mittleren Einkommen sozial abfedern und Unternehmen von Energiesteuern entlasten

Mittelfristige Maßnahmen (binnen eines Jahres)

- Beschaffung einer robusten Reserve an Energieträgern
- Ausbau der LNG-Anlande-Kapazitäten und ausreichende Einbindung der LNG-Terminals in Versorgungsnetze
- Bei LNG-Ausbau so weit als möglich langfristige Nutzbarkeit der Infrastruktur für Umstellung auf Wasserstoffversorgung beachten („H₂-ready“)
- Ertüchtigung des Gasnetzes für höhere Diversität an Einspeisepunkten

Langfristige Maßnahmen (in den nächsten 2-10 Jahren)

- Transformation zur Klimaneutralität beschleunigen, insb. durch
 - o Infrastrukturausbau insbesondere für den Umschlag von Wasserstoff und seinen Derivaten
 - o Wasserstoffimporte
 - o Ausbau der erneuerbaren Energien
- Transformationspfade vor dem Hintergrund der neuen Rahmenbedingungen (insb. hohe Gaspreise für längere Zeit) überprüfen

Die Bundesregierung hat bereits erste weitreichende Entscheidungen auf den Weg gebracht, wie zum Beispiel den Zukauf von Gas für 1,5 Milliarden Euro oder die geplante Regelung zum Befüllen der Gasspeicher. Wichtig in der aktuellen Situation wäre es auch, den geplanten Kohleausstieg 2030 nicht in Frage zu stellen. Er hilft dabei, von russischen Kohleimporten, die 50 % der deutschen Kohleimporte ausmachen, unabhängig zu werden.

Bestehende wirksame Mechanismen zur Reduktion der Treibhausgasemissionen, allen voran der Emissionshandel und seine Weiterentwicklung im Rahmen der Umsetzung des EU Green Deal, dürfen nicht geschwächt werden. Vielmehr bilden bestehende Mechanismen eine gute Grundlage für weitere, beschleunigende Maßnahmen.

Autorinnen und Autoren

Prof. Dr. Robert Schlögl ML, Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft und Max-Planck-Institut für chemische Energiekonversion, Mülheim

Prof. Dr. Ferdi Schüth ML, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim

Prof. Dr. Antje Boetius ML, Helmholtz-Zentrum für Polar- und Meeresforschung, Alfred-Wegener-Institut, Bremerhaven

Prof. Dr. Ottmar Edenhofer ML, Potsdam-Institut für Klimafolgenforschung, Potsdam und Mercator Research Institute on Global Commons and Climate Change, Berlin

Prof. Dr. Veronika Grimm, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

Prof. Dr. Sibylle Günter ML, Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Garching

Prof. Dr. Gerald Haug ML, Nationale Akademie der Wissenschaften Leopoldina

Prof. Dr. Jochem Marotzke ML, Max-Planck-Institut für Meteorologie, Hamburg

Prof. Dr. Wolfgang Marquardt ML, Forschungszentrum Jülich

Prof. Dr. Christoph M. Schmidt ML, RWI – Leibniz-Institut für Wirtschaftsforschung, Essen

Prof. Dr. Ulrich Wagner, TU München und Forschungsstelle für Energiewirtschaft e.V.

Redaktionelle Begleitung

Dr. Christian Anton, Nationale Akademie der Wissenschaften Leopoldina, Abteilung Wissenschaft-Politik-Gesellschaft

PD Dr. Stefan Artmann, Nationale Akademie der Wissenschaften Leopoldina, Präsidialbüro

ML = Mitglied der Leopoldina

Werner Brinker

Von der (Un-) Möglichkeit einer klimaneutralen Energieversorgung in Deutschland

Der Endenergieverbrauch in Deutschland betrug im Jahr 2019 ca. 2400 TWh [1]. Diese Energiemenge muss, wenn die Ziele des Klimaabkommens von Paris von Dezember 2015 erreicht werden sollen und der Endenergieverbrauch in Deutschland im Jahre 2050 in der gleichen Größenordnung liegen sollte, komplett aus erneuerbaren Energiequellen wie z.B. Wasser, Wind, Sonne und Biomasse zur Verfügung gestellt werden. Dieses Unterfangen ist unter den heute geltenden Rahmenbedingungen in Deutschland nicht darstellbar, denn der Zubau von Anlagen für die Gewinnung von Strom aus erneuerbaren Energien schreitet zu langsam voran und die zur Bebauung z.B. mit Windenergieanlagen vorgesehenen Flächen reichen nicht aus.[2] Ca. 30 % der benötigten Energie müssten dann in Form von grünem Strom oder grünem Wasserstoff importiert oder aber durch Investitionen in Energieeffizienz- und Energieeinsparmaßnahmen eingespart werden.

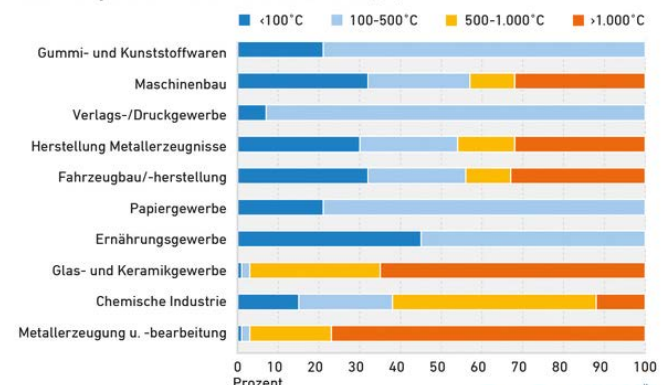
In diesem Beitrag sollen nachstehend einige Überlegungen hinsichtlich solcher Möglichkeiten in den Bereichen Industrie, Verkehr und Haushalt angestellt werden. Diese drei Bereiche sind mit jeweils 25-30 % am Endenergieverbrauch in Deutschland beteiligt. [2] Unter Energieeffizienz wird in diesem Zusammenhang nicht nur der Wirkungsgrad von technischen Anlagen wie z.B. Gasturbinen oder erdgasbetriebenen Brennwertkesseln verstanden, sondern auch der Wirkungsgrad von Elektrolyseuren bei der Herstellung von Wasserstoff aus grünem Strom. Für die Produktion von 1 kWh Wasserstoff durch Spaltung von Wasser in Wasserstoff und Sauerstoff über einen Elektrolyse-Prozess werden 1,6-1,8 kWh Strom benötigt.[3] Der Wirkungsgrad eines Elektrolyseurs beträgt also lediglich 55-60 %.Damit stellt sich die Frage, ob es sinnvoll ist, mittels grünen Stroms mit einem schlechten Wirkungsgrad grünen Wasserstoff zu produzieren und diesen z.B. für Wärmeprozesse in der Industrie einzusetzen oder, ob es nicht sinnvoller wäre, bestimmte Wärmeprozesse in der Industrie zu elektrifizieren, um dadurch u.a. den Zubau von Erzeugungskapazitäten im Bereich Onshore-Wind und PV-Anlagen zu verringern.

Elektrifizierungspotentiale für Prozesswärme in der Industrie

Bild 1 zeigt die entsprechenden Wärmeprozesse in den verschiedenen Branchen der deutschen Industrie. Es wird deutlich,

Industrieller Wärmebedarf nach Wirtschaftszweigen

Nach Temperaturniveaus in Grad Celsius (°C)



Quelle: Ifeu/DLR/ZSW 2010

Stand: 6/2017

© 2017 Agentur für Erneuerbare Energien e.V.



Bild 1: Industrieller Wärmebedarf nach Wirtschaftszweigen Quelle: Ifeu/DLR/ZSW 2010 Stand: 6/2017 ©Agentur für Erneuerbare Energien

dass in einigen Branchen wie z.B. der Kunststoff-, der Papier-, der Ernährungs- oder auch der Druckindustrie die benötigte Temperatur für Prozesswärme weniger als 500 °C beträgt und diese Prozesse somit grundsätzlich sehr gut für eine Elektrifizierung geeignet sind. Dafür stehen folgende Technologien heute schon in industriellem Maßstab zur Verfügung [4]:

- Wärmepumpen	bis	100 °C
- Elektrokessel	bis	160 °C
- Elektrodenkessel	bis	240 °C
- elektrochemische Verfahren		250-2000 °C

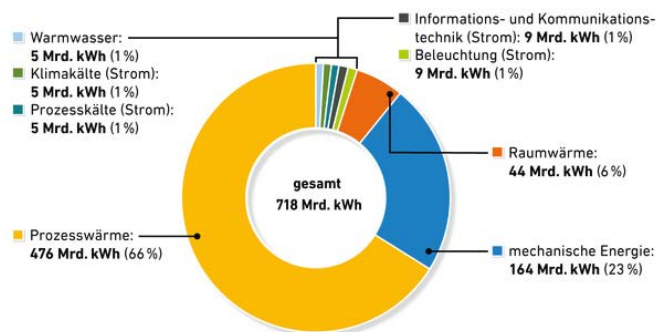
Das mit Hilfe dieser Technologien ermittelte Elektrifizierungspotential der brennstoffbasierten Prozesswärmeerzeugung wurde in früheren Studien mit etwa 180 TWh/a von insgesamt 460 TWh und einer mittleren Leistung an einem Werktag i.H. von 29 GW ermittelt. Für die industrielle Raumheizung und Warmwasserbereitung kommen potentiell weitere 53 TWh/a mit einem Leistungsbedarf von 5-15 GW hinzu. [4]

Bild 2 stellt den Endenergieverbrauch nach Anwendungsbereichen in der Industrie im Jahr 2016 dar. Für den Bereich Prozesswärme wird eine End-Energiemenge von 476 TWh/a und für Raumwärme und Warmwasser insgesamt 49 TWh/a angegeben. Diese Zahlen weichen kaum von denen in [4] angegebenen Daten ab. Daraus ergibt sich, dass das in [4] ermittelte Elektrifizierungspotential für Prozesswärme, Raumwärme und Warmwasser mit etwa 230-240 TWh/a abgeschätzt werden kann. Was hindert die Industriebetriebe also daran, den Weg zu weniger CO₂-Emissionen und höherer Energieeffizienz durch

Hon. Prof. Dr.-Ing. Werner Brinker
An der Bleiche 4, 26180 Rastede
werner.brinker2@ewetel.de

DOI-Nr.: 10.26125/ppp4-hx13

Endenergieverbrauch nach Anwendungsbereichen in der Industrie 2016 in Milliarden Kilowattstunden



Quelle: eigene Darstellung nach BMWi Energiedaten
Stand: 8/2018

© 2018 Agentur für Erneuerbare Energien e.V.



Bild 2: Endenergieverbrauch nach Anwendungsbereichen in der Industrie 2016
Quelle: eigene Darstellung der AEE nach BMWi Energiedaten Stand:8/2018
©Agentur für Erneuerbare Energien

die Anwendung von Strom aus erneuerbaren Energien statt fossiler Brennstoffe zu nutzen?

Die Antwort fällt eindeutig aus: Es ist der große Preisunterschied zwischen einer kWh Öl oder Gas und einer kWh Strom. Der Preis für Erdgas betrug in der Zeit von Jan.-Juni 2021 ca. 3 ct/kWh (5). Der Preis für Strom betrug in der Zeit von Jan.-Dez. 2020 ca. 8-9 ct/kWh [5]. Der Strompreis für Industriekunden war also im Jahr 2020/21 pro kWh etwa drei Mal so teuer wie der Gaspreis. Daran ändert auch die Situation an der Strom- bzw. Gasbörse Anfang dieses Jahres nichts. Am 8. Februar 2022 wurde der Strompreis für das Jahr 2023 mit 14,3 ct/kWh und der Gaspreis mit 5,3 ct/kWh notiert. Da an der Strom- und Gasbörse das „Merit Order“-Prinzip gilt, wonach die Grenzkosten der letzten zur Deckung des Bedarfs benötigten kWh den Preis für die gesamte zu dem Zeitpunkt gehandelte Energiemenge bestimmt, wird sich die Situation nicht ändern, insbesondere dann nicht, wenn auf der letzten Stufe der „Merit Order“-Kurve Erdgaskraftwerke zur Sicherung der Systemstabilität eingesetzt werden müssen. Bei einem Erdgaspreis von 5,3 ct/kWh und einem Wirkungsgrad von 55 % eines modernen Gas- und Dampfturbinen-Kraftwerks ergibt sich ein Strompreis allein auf der Basis des Brennstoffes Erdgas von 9,6 ct/kWh; die entsprechenden Grenzkosten liegen noch darüber.

Der vermehrte Einsatz von Strom aus erneuerbaren Energiequellen für industrielle Prozesswärme am Standort Deutschland ist m.E. nur möglich, wenn kostenbasierter Strom über entsprechende Verträge zwischen Anlagenbetreibern und Industriebetrieben zur Anwendung kommt. Die durchschnittlichen Produktionskosten für Strom aus Onshore-Windanlagen betrugen z.B. im März 2018 zwischen 4 und 8 ct/kWh, für Strom aus PV-Anlagen zwischen 4 und 6 ct/kWh [6].

Verkehr

In diesem Abschnitt wird auf eine umfassende Betrachtung der Sektors Verkehr mit seinen wesentlichen Bereichen Schiffs-, Flug-, Bahn- und Schwerlastverkehr verzichtet. Der Einsatz von Strom aus erneuerbaren Energiequellen soll ausschließlich an

dem Beispiel PKW-Verkehr in Deutschland vorgenommen werden. Gemäß einer Veröffentlichung des Statistischen Bundesamtes aus dem Jahre 2018 betrug der Energieverbrauch für PKW, Benzin und Diesel, 1545 PJ. [7] Diese Energiemenge entspricht 429 TWh. Bei einem Bestand von ca. 48 Millionen PKW zum 1. Januar 2021 und einem vergleichbaren Verbrauch wie im Jahr 2018 ergibt sich eine durchschnittliche Energiemenge von 8950 kWh pro PKW. Mit einer durchschnittlichen jährlichen Fahrleistung pro PKW von 13400 km [8] und einem spezifischen Verbrauch von 20 kWh pro 100 km benötigt ein Elektro-Auto etwa 2700 kWh pro Jahr. Bei 48 Millionen Pkw ergibt das eine Energiemenge von ca. 130 TWh, also lediglich 30 % der in Form von Benzin oder Diesel benötigten Energiemenge. Dieses Verhältnis wird auch durch folgende Tabelle deutlich. Hierin sind die offiziellen Werksangaben mit den Daten eigener Erfahrung/Fahrweise gegenübergestellt.

Auto	Werksangabe	tatsächlich	kWh
BMW iX3	18,9 – 20,5 kWh/100 km	25 kWh/100 km	25/100 km
BMW X3 3.0 i	8,7 – 11,4 ltr./100 km	10 ltr./100 km	87/100 km

(1 ltr. Benzin = 8,67 kWh)

Aus dem Verbrauch in kWh pro 100 km ergibt sich, dass ein Elektro-Fahrzeug gleichen Typs und vergleichbarer Fahrweise lediglich 28 % der Energiemenge eines Fahrzeugs mit Verbrennungsmotor benötigt. Dadurch wird die aus den Daten des Statistischen Bundesamtes ermittelte Relation bestätigt. Der Grund für den großen Unterschied im Energieverbrauch zwischen Elektromotor und Verbrennungsmotor liegt im Wesentlichen in der geringen Energieeffizienz eines Verbrennungsmotors, bei dem eine große Menge Energie in Form von Wärme an die Umgebung abgegeben wird. Allein bezogen auf den Energieverbrauch wäre es also angezeigt, den PKW-Bestand in Deutschland auf Elektro-Fahrzeuge umzustellen, wenn der dafür benötigte Strom aus erneuerbaren Energiequellen bereitgestellt werden kann.

Für 48 Millionen Elektro PKW mit einer jährlichen Fahrleistung von 13 400 km und einem durchschnittlichen Verbrauch von etwa 20 kWh/100 km wird eine Strommenge von etwa 130 TWh benötigt. Das sind 22 % der heutigen Stromproduktion i.H. von 582 TWh, eine Energiemenge, die in den nächsten 30 Jahren eigentlich ohne Probleme zusätzlich aus erneuerbaren Energiequellen zur Verfügung gestellt werden könnte. Die zu installierende Leistung dafür beträgt bei einer Vollast-Struktur von 2000 h etwa 65 GW, was einem Zubau von gut 2,1 GW pro Jahr entspricht. Dieser Wert wird selbst in den schwächsten Jahren des letzten Jahrzehnts übertroffen. Mit der Elektrifizierung des PKW-Verkehrs könnten also ca. 300 TWh Energie aus fossilen Energieträgern bzw. ca. 70 Mio. t CO₂ eingespart werden, wenn durch entsprechendes Last-, Batterie- und Netzmanagement umfangreiches zeitgleiches Laden der PKW verhindert werden kann. Wenn nur 20 % der 48 Mio. PKW zeitgleich eine Ladeleistung von 20 kW beanspruchen, wird das

Stromnetz mit einer Leistung von 192 GW beaufschlagt. Diese Leistung entspricht etwa dem 2-fachen der heute installierten Leistung in Form von konventionellen Kraftwerken.

Private Haushalte

Neben der Industrie und dem Verkehr ist der Bereich „Private Haushalte“ mit weiteren 25 % am Endenergieverbrauch beteiligt. Das entspricht etwa 645 TWh. Davon werden etwa 70 %, d.h. 450 TWh für die Raumwärme benötigt. [9] In Deutschland ist das typische Wohngebäude ca. ein halbes Jahrhundert alt. Etwa zwei Drittel der Wohngebäude sind älter als 35 Jahre. Demnach sind gut 66 % der Wohngebäude bis 1978 gebaut, aber lediglich 10 % voll gedämmt, während ca. 9 Mio. Wohngebäude unzureichend und weitere 7 Mio. Wohngebäude lediglich teilgedämmt sind. [10] Durch eine vollständige Dämmung kann ca. 76 % der für die Raumwärme benötigten Endenergie eingespart werden. [11] Weitere Einsparungen sind möglich, wenn die Heizungsanlage dem Raumwärmebedarf nach vollzogener Sanierung angepasst wird. Dieses kann insbesondere durch den Einbau von elektrisch betriebenen Wärmepumpen in Kombination mit großflächigen Niedertemperatur-Heizkörpern erreicht werden. Die Beheizungsstruktur des Wohnungsbestandes stellte sich im Jahr 2019 wie folgt dar:

Erdgas:	49,5 %
Heizöl:	25,3 %
Fernwärme:	14,0 %
Strom incl. Wärmepumpe:	5,0 %
Feststoffe/Holz/Pellets:	6,2 %

Demnach machen die fossilen Brennstoffe Erdgas und Heizöl fast 75 % des Endenergieverbrauchs für Raumwärme aus [12] und sind damit für ca. 130 Mio. t CO₂ Emissionen jährlich verantwortlich. [13] Durch eine vollständige Dämmung können nicht nur 342 TWh fossiler Energie sondern durch Elektrifizierung des Raumwärmebedarfs auch ca. 130 Mio. t CO₂ jährlich eingespart werden. Die mögliche Einsparung an Endenergie durch die Elektrifizierung des PKW-Verkehrs und durch eine vollständige Dämmung der Wohngebäude beträgt also ca. 642 TWh. verbunden mit einer Reduzierung der CO₂ Emissionen i.H. von ca. 200 Mio. t. Eine solche Einsparung würde dazu führen, dass die in [2] ermittelte in Deutschland produzierbare Energiemenge aus erneuerbaren Energiequellen i.H. von 1770 TWh zur Deckung des Gesamtbedarfs ausreichen würde.

Was also ist im Gebäudebestand zu tun und welche Kosten sind mit den notwendigen Renovierungsmaßnahmen verbunden? Auf der Grundlage von Erfahrungswerten müssen für eine umfassende Renovierung mindestens Kosten zwischen 400 und 650 €/m² angesetzt werden, Stand 2021. [14] Bei einer Gesamt-Wohnfläche in Deutschland von ca. 3,8 Mrd. m² ergäbe sich mit Renovierungskosten i.H. 650 €/m² ein Investitionsvolumen von ca. 2300 Mrd. €. Für die Ermittlung von jährlich erforderlichen Investitionen für die notwendigen Gebäudesanierungen werden hier 400 €/m² angesetzt, da bereits 10 % der Wohngebäude vollgedämmt und fast 40 % teilgedämmt sind. Unter diesen Annahmen ergibt sich ein Investitionsvolu-

men i.H. von insgesamt 1520 Mrd. € bzw. bis zum Jahr 2050 von ca. 54 Mrd. € jährlich. Wenn unterstellt wird, dass die finanziellen Mittel vorhanden sind und die Baumaßnahmen umgesetzt werden sollen, stellt sich vor dem Hintergrund des akuten Fachkräftemangels die Frage, wieviel Fachkräfte zusätzlich für die Sanierung von Wohngebäuden in Deutschland benötigt werden. Zur Beantwortung dieser Frage werden folgende Annahmen getroffen:

Investition:	54,0 Mrd. €/a
Davon:	
Material (40 %):	21,6 Mrd. €/a
Lohn (60 %):	32,4 Mrd. €/a
Lohnkosten:	60 €/h
Arbeitsstunden:	1640 h/a

Aus diesen Annahmen ergibt sich ein zusätzlicher Bedarf an Fachkräften von ca. 330 000. Bei der augenblicklichen angespannten Lage auf dem Markt (Es fehlen z.Zt. ca. 760 000 Facharbeitskräfte) ist der zusätzliche Bedarf an Arbeitskräften für die notwendigen Sanierungsarbeiten nicht zu decken. Das von der Bundesregierung ausgerufene Ziel einer Primärenergieeinsparung von 80 % im Gebäudebestand bis zum Jahr 2050 ist m.E. weder finanziell noch organisatorisch und insbesondere auch wegen des Mangels an Facharbeitskräften unter heutigen Voraussetzungen nicht zu erreichen.

Ausblick

Es ist das erklärte Ziel der alten und neuen Bundesregierung, die Vorgaben des Pariser Klimaabkommens zu erreichen. Die dafür notwendigen Eckpunkte, wie z. B. der Ausbau der Erneuerbaren Energien, der Energie-Einsparung im Gebäudesektor, der Elektrifizierung des Verkehrs etc. sind formuliert. Die in verschiedenen Studien aufgezeigten Wege dorthin, u.a. Fraunhofer ISE Nov. 2021, sind jedoch nicht ausreichend, um den aktuellen Endenergieverbrauch in Deutschland i.H. von 2400 TWh komplett aus Erneuerbaren Energien zu decken. Auch mögliche, mit hohen Investitionen verbundene Maßnahmen lassen eine Energieeinsparung von lediglich 642 TWh erkennen. Aus diesem Grunde setzt die Politik verstärkt auf den Einsatz von grünem Wasserstoff. Da aber für die Produktion von 1 kWh grünen Wasserstoffs etwa 1,6 – 1,8 kWh grünen Stroms notwendig sind, macht es unter energetischen Aspekten wegen noch fehlender Mengen grünen Stroms in Deutschland wenig Sinn, bereits heute grünen Wasserstoff in den verschiedenen Sektoren einzusetzen.

Bis zur Erreichung der Ausbauziele für Erneuerbare Energien ist es unter energetischen Aspekten sinnvoller, den grünen Strom zur weiteren Elektrifizierung z.B. im Bereich der Prozesswärme in der Industrie, der Beheizung von Gebäuden und des Verkehrs einzusetzen. Der z. B. in der Schwerindustrie und in der chemischen Industrie als Rohstoff benötigte Wasserstoff könnte als sog. blauer Wasserstoff, nach Abscheidung und unterirdischer Speicherung des CO₂ in den Erdgaslagerstätten, importiert werden. Die CO₂-Speicherung in Erdgaslagerstätten ist seit vielen Jahren erprobte Praxis in norwegischen Offshore Feldern. Der Import von grünem Wasserstoff aus arabischen Ländern oder auch aus Marokko ist natürlich denkbar, da z. B.

die Stromerzeugungskosten aus PV-Anlagen in Saudi-Arabien im Bereich von 1,5-2 ct/kWh liegen. [15] Es stellt sich nur die Frage, ob es bei energetischer Betrachtung der verschiedenen Verfahrensschritte (Stromproduktion, Meerwasserentsalzung, Elektrolyse, Transport) auch sinnvoll ist.

In Tabelle 1 ist der Energieverbrauch pro Kopf einiger ausgewählter sonnenreicher Länder im Vergleich zu Deutschland und die jeweilige Stromproduktion nach Energieträgern eingetragen.

Land	kg OE*	kWh	Stromproduktion aus fossilen Brennstoffen (%)
Marokko	555	6454	71,4
Spanien	2571	29900	63,0 incl. Kernenergie
Deutschland	3817	44391	56,9 incl. Kernenergie
Saudi Arabien	6905	80305	100,0

Tabelle 1: Energieverbrauch pro Kopf in ausgewählten Ländern
*OE = Öl-Äquivalent

Diese Gegenüberstellung zeigt zwei Dinge sehr deutlich:

1. Marokko hat noch einen deutlichen Nachholbedarf in der Versorgung seiner 38 Millionen Einwohner mit der notwendigen Energie
2. Saudi Arabien hat einen fast doppelt so hohen Energieverbrauch pro Kopf der Bevölkerung wie Deutschland
3. Sowohl Marokko als auch insbesondere Saudi Arabien produzieren zur Zeit ihren Strom weit überwiegend bzw. ausschließlich auf Basis fossiler Energieträger

Daher scheint es mir sinnvoller, dass Saudi Arabien zunächst den überaus hohen Energieverbrauch im eigenen Land durch den Umbau des Systems auf erneuerbare Energieträger voranbringt anstatt mit Strom aus der Sonne Wasserstoff aus entsalztem Meerwasser und anschließender Elektrolyse zu produzieren und mit hohem Energieaufwand und hohen Kosten nach Deutschland zu exportieren. Gleiches gilt auch für Marokko, nämlich erst die Umstellung des Systems auf erneuerbare Energien (Sonne und Wind), dann die Versorgung der einheimischen Bevölkerung mit der notwendigen elektrischen Energie und dann erst aus entsalztem Meerwasser die Produktion von grünem Wasserstoff für den Export nach Europa. Letztere Ideen sind nicht neu und wurden in der Vergangenheit in ähnlicher Form immer wieder geäußert, z. B. von Svante Arrhenius (1895), Nikolaus Laing (1973) oder auch im Rahmen des wieder beendeten Projekts „Desertec“.

Oberstes Ziel in Deutschland muss es also sein, den heimischen Energiebedarf durch verstärkte Nutzung der Einsparpotentiale, durch die Erhöhung des Grades der Elektrifizierung mit grünem Strom und durch einen beschleunigten Ausbau der erneuerbaren Energien zu decken.

Hinsichtlich der heimischen Produktion von Wasserstoff müssen deutlich größere Anstrengungen im Bereich Forschung und Entwicklung z.B. bei der Methan-Pyrolyse unternommen werden, denn diese Technologie hat den Vorteil, dass lediglich 20 % des für eine Elektrolyse erforderlichen Stroms benötigt

werden. Der bei der Methan-Pyrolyse entstehende feste Kohlenstoff könnte in alten Kohlebergwerken endgelagert, vielleicht aber auch zu Kohlefasern verarbeitet und dann bei der Herstellung von Faserbeton verwendet werden.

Fazit

Deutschland wird die klimapolitischen Ziele von Paris mit den bislang eingeleiteten Maßnahmen bei gleichbleibendem Endenergieverbrauch nicht erreichen können. Es muss deutlich mehr Wert auf die Förderung bzw. den Anreiz auf Energiesparmaßnahmen gelegt, die Elektrifizierung einzelner Bereiche vorangetrieben, der Ausbau der erneuerbaren Energien incl. der dafür notwendigen Netz-Infrastruktur beschleunigt und die Ausbildung von Fachkräften verstärkt werden.

Referenzen

- [1] <https://www.umweltbundesamt.de/daten/energie/energieverbrauch-nach-energietraegern-sektoren>
- [2] Werner Brinker: Von der Unmöglichkeit einer klimaneutralen Energieversorgung in Deutschland, Bunsen-Magazin 1/2021 S. 29 – 30
- [3] Wasserelektrolyse – Wikipedia
- [4] Ulrich Wagner, Anna Gruber: Lastverschiebepotential im Wärme-/Kältemarkt nutzen in: Jede Menge Ökostrom, was tun? Hrsg. Werner Brinker, Oktober 2015, S.31
- [5] <https://www.ispex.de/energiemarkt-kommentar-06-2021>
- [6] Stromgestehungskosten – Wikipedia
- [7] Statistisches Bundesamt, Transportleistungen und Energieverbrauch im Straßenverkehr 2005 – 2016, S. 6
- [8] <https://de.statista.com/statistik/daten/studie/246069/umfrage/laufleistung-privater-pkw-in-deutschland>
- [9] https://www.destatis.de/DE/Presse/Pressemitteilungen/2021/08/PD21_383_85.html
- [10] <http://www.zdb.de/zdb-cms.nsf/id/50-jahre-durchschnittsalter-eines-deutschen-wohngebäude-de?open&ccm=900040>
- [11] <https://www.nachhaltiges-bauen.jetzt/waermeverlust-vor-und-nach-der-sanierung/>
- [12] <https://www.unendlich-viel-energie.de/mediathek/grafiken/beheizungsstruktur-im-bestand-und-neubau>
- [13] <https://www.umweltbundesamt.de/daten/klima/treibhausgas-emissionen-in-deutschland/kohlendioxid-emissionen#kohlendioxid-emissionen-im-vergleich-zu-anderen-treibhausgasen>
- [14] <https://n26.com/de-de/blog/was-kostet-eine-hausrenovierung>
- [15] <https://www.klimareporter.de/international/saudis-greifen-nach-der-sonne>

Dr. Werner Brinker

Nach einem Studium des Bauingenieurwesens trat ich meine erste Stelle 1978 in der EWE AG in Oldenburg im Bereich Gastechnik, Gaseinkauf, Gasspeicher, Wärmeversorgung und Abfallwirtschaft an. Parallel zu meiner Berufstätigkeit fertigte ich eine Promotionsarbeit zu einem historischen Thema aus dem Bereich Bauingenieurwesen an der TU Braunschweig an und schloss diese 1990 ab. 1993 wechselte ich zur Preussen Elektra AG nach Hannover in den Bereich Energiehandel und Energiedienstleistungen. 1996 kehrte ich zurück in den Technischen Vorstand der EWE AG, deren Vorstandsvorsitz ich 1998 bis zum Jahr 2015 übernahm. Seitdem habe ich zusätzlich zahlreiche Aufsichtsratsposten unter anderem in Energieunternehmen und -organisationen in Deutschland, Luxemburg und Schweden, zweier Banken und bei Werder Bremen GmbH & Co KG aA innegehabt. Aktuell bin ich als Berater der international tätigen Private Equity Beteiligungsgesellschaft ARDIAN tätig. Für die Wissenschaft habe ich mich engagiert im Aufsichtsrat, bzw. Hochschulrat der Jacobs University Bremen und der Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, in deren Universitätsgesellschaft ich aktuell als Vorsitzender wirke, sowie in der Wissenschaftlichen Kommission Niedersachsens und im Vorstand Stifterverband für die Deutsche Wissenschaft e.V. Dafür wurde ich 2015 mit einer Honorarprofessur der Universität Oldenburg geehrt. Ehrenamtlich war ich ebenfalls in diversen Organisationen tätig gewesen, wovon ich insbesondere den Vorstandsvorsitz im Forum für Zukunftsenergien hervorheben möchte. Von meinen zahlreichen Ehrungen möchte ich insbesondere die Wahl zum Energiemanager des Jahres 2006 erwähnen.

Im Jahr 1992 hat die EWE AG den damals größten Windpark Europas in Betrieb genommen (10 Anlagen a 300 kW). Fünf Jahre später habe ich meine Experten für Nieder- und Mittelspannungs-Stromnetze gefragt: „Können wir den Strom von 100 000 PV-Anlagen oder auch Brennstoffzellen in unser 1 kV-Netz aufnehmen?“ Wie zu erwarten, war die Antwort: „Nein, dafür sind unsere Netze nicht gebaut.“ Daraufhin wurde das sehr umfangreiche Projekt „Smart Grids“ aufgesetzt, das gemeinsam mit der daraus abgeleiteten EWE Strategie Eingang in die im Jahr 2006 veröffentlichten „Bullensee-Thesen“ gefunden hat. Diese Thesen lassen sich in einer einfachen Formel zusammenfassen, nämlich **E 3**, d.h.

- Energieeinsparungen realisieren
- Energieeffizienzen heben
- Erneuerbare ausbauen

Im Jahr 2010 nahm EWE den ersten deutschen Offshore Windpark und 2013 den ersten kommerziellen deutschen Offshore Windpark in Betrieb. Als Vorstandsvorsitzender war ich von diesem Weg hin zu einer klimaneutralen Energieversorgung überzeugt, aber es bedurfte auch der Überzeugung der Mitarbeiter, die teilweise 30-40 Jahre in einem monopolistischen System gearbeitet hatten, das durch Kohle- und Kernkraftwerke bestimmt war.

Sehr hilfreich auf diesem Weg war die Gründung einer Akademie für Führungskräfte, in der nicht nur über Strategien und Führungskonzepte diskutiert, sondern auch über ethische Wertegerüste und moralisches Handeln philosophiert wurde, getreu dem Motto: „Was das Gesetz nicht verbietet, verbietet der Anstand.“ (SENECA, 1.Jh.n.Chr.)

New Member**Alexander Gödde, M.Sc.**

PhD Student
Institute of Electrochemistry
Technische Universität Clausthal



In addition to my research in the field of the interfacial behavior of ionic liquids, I am also fascinated by physical chemistry in everyday life. Be it the use of foaming agents, which I use in the volunteer fire department, so that a fire can be combated more efficiently, or the piezoelectric effect, which not only makes it possible to characterize a surface with AFM (atomic force microscopy) but is also used to create a spark in a lighter. Because I appreciate the Bunsen Society not only for the exchange and for the broadening of the horizon in exciting and stimulating discussions, I also hope to be able to carry these scientific discussions outwards and to show that physical chemistry is more than dry teaching or enthalpy and entropy.

So: May the enthalpy be with you!

Florian Budde

Ein pragmatischer Ansatz?

Der exponentielle wissenschaftliche, technische und ökonomische Fortschritt der Menschheit hat nicht nur zu einer ständigen Verbesserung ihrer Lebensqualität geführt (höhere Lebenserwartung, geringere Armut, geringere Kindersterblichkeit, etc.), sondern auch in einer exponentiell zunehmenden Belastung des Ökosystems Erde: Klimawandel, Rückgang der Artenvielfalt, drohender Wassermangel in vielen Regionen sind nur einige Beispiele für diese Belastung. Natürliche Ökosysteme reagieren auf solche Belastungen, die durch das ungebremste Wachstum des Ressourcenverbrauchs einer einzelnen Spezies verursacht werden, typischerweise mit einem Kollaps und einem Neubeginn.

Die Menschen versuchen nun, sich dieser Entwicklung entgegenzustemmen und ihr Habitat zu bewahren. In diesem Kontext ist der European Green Deal zu sehen, eine Initiative der Europäischen Kommission mit dem Ziel, die Nettoemission von Treibhausgasen bis 2050 auf Null zu reduzieren. Die „Chemicals Strategy for Sustainability Towards a Toxic-Free Environment“ ist wiederum ein Teil dieser Initiative und wurde 2020 veröffentlicht. Zur Implementierung dieser Strategie wurde der „High-Level Round Table on the Chemicals Strategy for Sustainability“ der Europäischen Kommission ins Leben gerufen mit Vertretern von Regierungen, Nichtregierungsorganisationen, Wissenschaft und Industrie (darunter auch der Präsident von EuChemS, zu der auch die Bunsen-Gesellschaft gehört). Dieser Runde Tisch hat zum ersten Mal im Mai letzten Jahres getagt.

Die Ziele der „Chemicals Strategy for Sustainability“ sind durchaus nachvollziehbar und sinnvoll. Das gilt für das Ziel, dass Chemikalien (damit werden nur synthetisch hergestellte Produkte gemeint - natürlich vorkommende Chemikalien werden von der Strategie nicht betrachtet) sicher und nachhaltig „by design“ sein sollen, genauso wie die Forderung nach einem nicht-toxischen Umgang mit diesen Chemikalien während ihres Lebenszyklus. Es wird weiter gefordert, dass dazu die Produktion von Chemikalien „neu erfunden“ werden und die EU größere strategische Autonomie bei der Übersicht dieser Transition haben muss. Mehr Chemikalien sollen als gefährlich klassifiziert und diese dann stärker reguliert werden, Substanzmischungen sollen stärker in die Betrachtung mit einbezogen werden. Gleichzeitig nimmt sich die Kommission vor, die relevante Gesetzgebung zu vereinfachen und zu vereinheitlichen, deren Durchsetzung zu verbessern und die internationale Zusammenarbeit auf diesem Gebiet zu verstärken.

Vor dem Hintergrund von so viel gutem Willen traut man sich kaum die Frage zu stellen, welches Problem hier eigentlich gelöst werden soll. Wie die Kommission zu Beginn ihrer Strategie selbst schreibt, verfügt Europa bereits jetzt über den weltweit wahrscheinlich engsten gesetzlichen Rahmen für die Produktion und den Einsatz von Chemikalien. Ein akuter Notstand, in dem Menschen erkennbar unter den Folgen oder der Verwendung von Chemikalien leiden würden, ist im Moment kaum erkennbar. Dementsprechend wird die Notwendigkeit für die Strategie auch eher prinzipiell (d.h. der Beschreibung von möglichen Gefahren) und präventiv (d.h. deren Abwendung) begründet. Dies gilt auch für die der Strategie zu Grunde liegende „Study for the strategy for a non-toxic environment of the 7th Environment Action Programme“. In der Tat deuten eine Reihe von Studien auf die zunehmende Gefährdung von Menschen durch Chemikalien hin (z.B. endokrine Disruptoren, PFAS). Konkrete Verbesserungsziele oder Meilensteine, deren Erreichung den Fortschritt in der Implementierung der Strategie erkennen lassen würden, sucht man allerdings vergeblich. Die Vorschläge sind eher prozessorientiert und resultieren dementsprechend in neuen bürokratischen Aktivitäten, deren Umfang nur als signifikant angenommen werden kann.

Natürlich lässt sich immer alles noch besser machen. Aber zu welchem Preis? Der eingangs erwähnte Versuch, die Existenz von nichts weniger als der ganzen Menschheit auf neue ökologische Grundlagen zu stellen, ist mit enormen Kosten verbunden. Wie die aktuelle politische Debatte in Deutschland aber auch in der EU und in anderen Ländern zeigt, ist der Übergang weg von einer fossilen Welt nur zu erreichen, wenn insbesondere die Industrienationen in der nördlichen Hemisphäre bereit sind, auf einen signifikanten Anteil ihres Wohlstands, so wie er bisher definiert wurde, zu verzichten. Schon heute kostet die sogenannte EEG-Umlage jeden Bundesbürger gut 300 EUR im Jahr. Das ist aber erst der Anfang. Die aus ökonomische Steuerungsgründen sehr sinnvoll erscheinende Einführung einer CO₂-Steuer würde einen vierköpfigen Haushalt mit weiteren 3.000 EUR netto im Jahr belasten. Da dieses Geld tatsächlich für die vergleichsweise teurere Erzeugung und Verteilung von alternativen Energieträgern ausgegeben werden muss (respektive für Maßnahmen, die den Verbrauch reduzieren, wie z.B. die Hausdämmung), ist es fraglich, ob auch nur ein Teil dieser Steuer für die soziale Umverteilung und damit für die soziale Abfederung der Maßnahmen zu Verfügung stehen wird.

Die Politik scheint inzwischen bezüglich der mit der Energiewende verbundenen Kosten und deren Bezahlung aus guten Gründen sehr sensibel geworden zu sein. Zwar wird noch immer behauptet, dass sich „Ökonomie und Ökologie“ verbinden ließen, die aktuellen Debatten, z.B. über die europaweite Ausdehnung

des Geltungsbereiches einer CO₂-Steuer auf Gebäude und Verkehr, zeugen aber von einer gewissen Ratlosigkeit, inwieweit den Bürgern die damit verbunden Kosten wirklich zugemutet werden können. Selbst wenn die Reduktion der CO₂-Emissionen sicherlich auch zu signifikanten Einsparungen führen wird, müssen doch zunächst die Investitionen finanziert werden, die diese Einsparungen später ermöglichen werden.

Es ist zu erwarten, dass sich diese Debatte in den nächsten Jahren noch weiter verschärfen wird. Tatsächlich verbirgt sich hinter der Diskussion über die Energiewende auch eine Verteilungsdebatte. Die Bevölkerung der nördlich gelegenen Industrieländer, die für den Löwenanteil des CO₂ in der Atmosphäre verantwortlich ist, muss auch den Löwenanteil der ökonomischen Last tragen, wird aber unter den Folgen des Klimawandels vergleichsweise weniger leiden als die Bevölkerung der Länder im Süden. Dringend notwendige multilaterale Einigungen werden schwieriger werden, wenn Regierungen zunehmend versucht sind, den nationalistischen Tendenzen in ihrer Wählerschaft zu folgen, wie das jetzt schon zu beobachten ist. Parallel dazu wird die technologische Revolution weiter voranschreiten.

Damit stellt sich die Frage, ob die Europäische Kommission gut beraten ist, eine an einem Maximalanspruch ausgerichtete Strategie („toxic free environment“) mit einem Fokus auf durchaus mögliche, aber eben nicht aktuelle Probleme und deren Durchsetzung einen enormen bürokratischen Aufwand erfordert, in dieser Form zu priorisieren. Eine Betrachtung der Kosten in Relation zum erwarteten Nutzen, so wie bereits für Bewertung und den Vergleich von verschiedenen Maßnahmen

für die Reduktion von CO₂ vorgeschlagen wurde (etwa die „CO₂ cost abatement curve“) würde einer solchen Initiative sicherlich zusätzliche Glaubwürdigkeit verleihen. Und in der Konsequenz würde sie auch zu einem pragmatischeren Ansatz führen.

Dr. Florian Budde

Dr. Florian Budde ist erster Vorsitzender der Deutschen Bunsen-Gesellschaft. Er war 30 Jahre Unternehmensberater bei McKinsey & Company, Inc., davon die letzten 20 Jahre als Senior Partner.



Unter anderem baute er die Global Chemicals Practice von McKinsey auf, die er viele Jahre lang leitete. Später war er verantwortlich für McKinsey Solutions, die daten- und technologiegetriebenen Beratungsdienste von McKinsey.

Bevor er zu McKinsey kam, arbeitete er in der Abteilung für Grundlagenforschung von IBM, er wurde an der FU Berlin promoviert und hat in München und in Montpellier Chemie studiert.

Publish in PCCP and thus strengthen your DBG!

Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP) is an international journal for the publication of cutting-edge original work in physical chemistry, chemical physics and biophysical chemistry. The paper appears in 48 issues per year. In 2020 PCCP had the second largest market share of international journals for physical chemistry.

PCCP was founded in 1999 by the Bunsen Society together with 18 other European specialist societies and is published by the Royal Society of Chemistry (RSC). As a co-owner, the DBG benefits from the publications by German authors in the magazine.

Current articles and information on submission can be found at www.rsc.li/pccp



Deutsche Bunsen-Gesellschaft
für physikalische Chemie

PCCP



Bernhard von Vacano, Maximilian Hofmann and Carla Seidel

Driving Sustainability of Polymeric Materials

At BASF, “we create chemistry for a sustainable future”. This company purpose, implemented a decade ago, is as current as ever. BASF has committed to an ambitious path towards net-zero CO₂ emissions by 2050, as well as to decoupling growth from resource consumption by advancing the circular economy [1]. Driving sustainability has become a necessity for all industries, with clear needs of customers, regulatory developments like the EU Green Deal and the Chemical Strategy for Sustainability (CSS), and a growing shift towards sustainable investments in finance. The chemical industry, with its systemic role in almost all value chains of the physical world, will need to play a key role by being part of the solution [2].

To achieve climate neutrality, BASF continues to increase efficiency in production and energy usage, while systematically shifting the primary energy input from fossil sources such as natural gas to renewable energies. This is directly evidenced by BASF's recent minority investments into offshore wind parks, the conclusion of long-term green power purchase agreements and the creation of BASF Renewable Energy GmbH, a subsidiary tasked with supplying BASF group with renewable power. These efforts on the energy input side are paired with projects to drive the electrification, such as “power-to-steam” for process heat via electric heat pumps or directly electrically heated furnaces for steam cracking. New large-scale industrial chemical CO₂-free processes are under development, such as CO₂-free hydrogen production via methane pyrolysis, and an increasing amount of biomass is replacing fossil raw material inputs. Beyond own operations, BASF supports its customers in the value chain in achieving their CO₂ emission goals with digital product carbon footprints for all products and “Accelerator” solutions that contribute to sustainability in the application: Enzymes that allow to lower temperatures in laundry, lubricants that decrease energy consumption and are biodegradable in the environment, or water-based polymer dispersions that eliminate organic solvents in coatings or adhesive applications. These solutions are steered on a corporate level, increasing their share (30% of products in 2021), and integrating the principles as guidelines in the innovation chain in Research & Development (R&D). BASF is also creating chemistry for a sustainable future by taking responsibility for plastics recycling and avoiding plastic waste. BASF

is co-founder of the Alliance to End Plastic Waste (AEPW), that has the target to promote solutions for reducing and avoiding plastic waste. ChemCycling™ is a technology driven by BASF to turn mixed plastic waste via pyrolysis into an oil that can replace fossil-derived naphta as feedstock, thus creating new materials with virgin-like properties based on recycled feedstocks.

In this sense, polymeric materials are key enablers of a vast number of sustainable innovations, from composite materials for wind turbines to building insulation. Their own ecological footprint includes emissions from all synthesis and processing steps, together with the respective end-of-life scenario. In a linear economy, incineration with energy recovery is the method of choice, if accumulation in the environment by controlled landfilling or unacceptable littering is to be avoided. Creating a circular economy for polymers [3] and keeping the carbon in the loop as much as possible addresses this in a dual sense: reusing already synthesized building blocks cuts out process emissions, while recycling at end of life avoids incineration. Comprehensive analyses confirm that climate neutrality and circularity for plastics must go together [4]. Scientists in R&D need to be able to integrate all these aspects in their projects to ensure safe and sustainable by design (SSbD) products, in addition to the conventional dimensions of cost / performance / scalability. However, a lot of the novel aspects affect distant steps in the value chain, beyond the immediate customer industry of a chemical company. Many parameters, like future available recycling technologies or regulatory guidelines as well as consumer preferences are still dynamically developing and add several layers of uncertainty.

In the last two years, we worked on shaping a framework that addresses Sustainable Materials for a Circular Economy within the polymer materials community of the company. The vision is to address materials sustainability by developing solutions that close the loops via a technical recycling circle wherever materials can be collected at end of life, or via a biobased, biodegradable loop in those cases, where collection is impossible or not sustainably feasible. Wastes and net CO₂ emissions along the whole lifecycle are avoided (Figure 1). Key research fields include biomass-derived materials, understanding of and design for biodegradability, mitigation of microplastics, enabling solutions for recyclability, and recycling technologies themselves. As cross-cutting activities, SSbD, including specifically circularity by design rules, need to be implemented and digitalization leveraged to manage these complex multiparameter development goals.

To identify how the framework could be set up to be fit for purpose under these circumstances, we ran a scenario thinking [5] exercise with a diverse team of 10 scientists with different professional experience, working for various related technologies in different global research sites of BASF, complemented

Dr. Bernhard von Vacano, Senior Research Fellow
Dr. Maximilian Hofmann, Senior Manager Scouting & Strategy
Dr. Carla Seidel, Senior Vice President
Advanced Materials and Systems Research
BASF SE
Carl-Bosch-Str. 38, D-67059 Ludwigshafen
bernhard.von-vacano@basf.com
maximilian.hofmann@basf.com
carla.seidel@basf.com

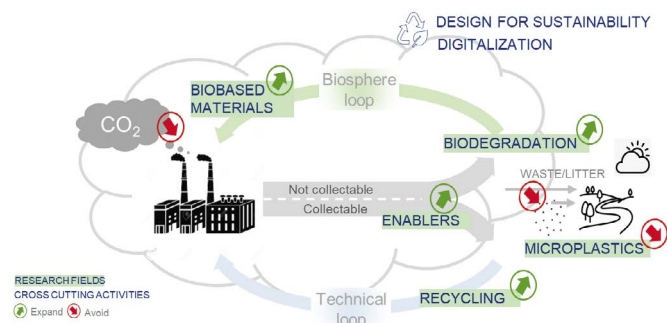


Fig. 1: Research vision for sustainable materials in a circular economy. (Source: BASF)

with input from further company-wide and external experts: In contrast to efforts on a corporate strategic level [5], we aimed to boil it down specifically to the circumstances corporate scientists will experience: How do possible futures of materials R&D for the next decade look like? Scenarios explore possibilities and should be consistent, qualitative descriptions of plausible futures. They reflect different, and potentially contradicting perspectives, opening up a space of options while not aiming at predictions. Scenario development follows a structured process (Figure 2).

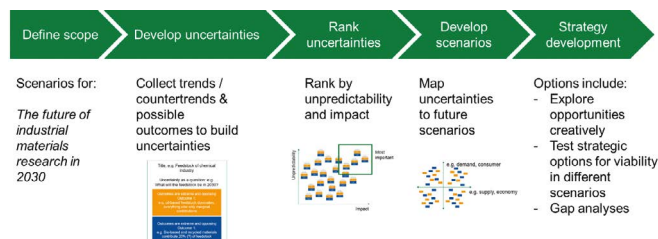


Fig. 2: Scenario development process to explore possible futures of materials R&D in the next decade. (Source: BASF)



Fig. 3: Four possible scenarios for materials R&D in 2030. Drawing by Susanne Marx, BASF.

At the core of the process, collected trends and possible outcomes are grouped along axes that describe the biggest uncertainties and impacts – a bit like in a multivariate principal component analysis for scientific data. We found two main influencing factors that impart uncertainty: The impact and

speed of digitalization of research that affects the HOW, and the development of the regulatory environment that spans the space of WHAT technical solutions will be possible. Figure 3 graphically summarizes the four possible resulting futures, with a more detailed summary of the scenarios in Figure 4.

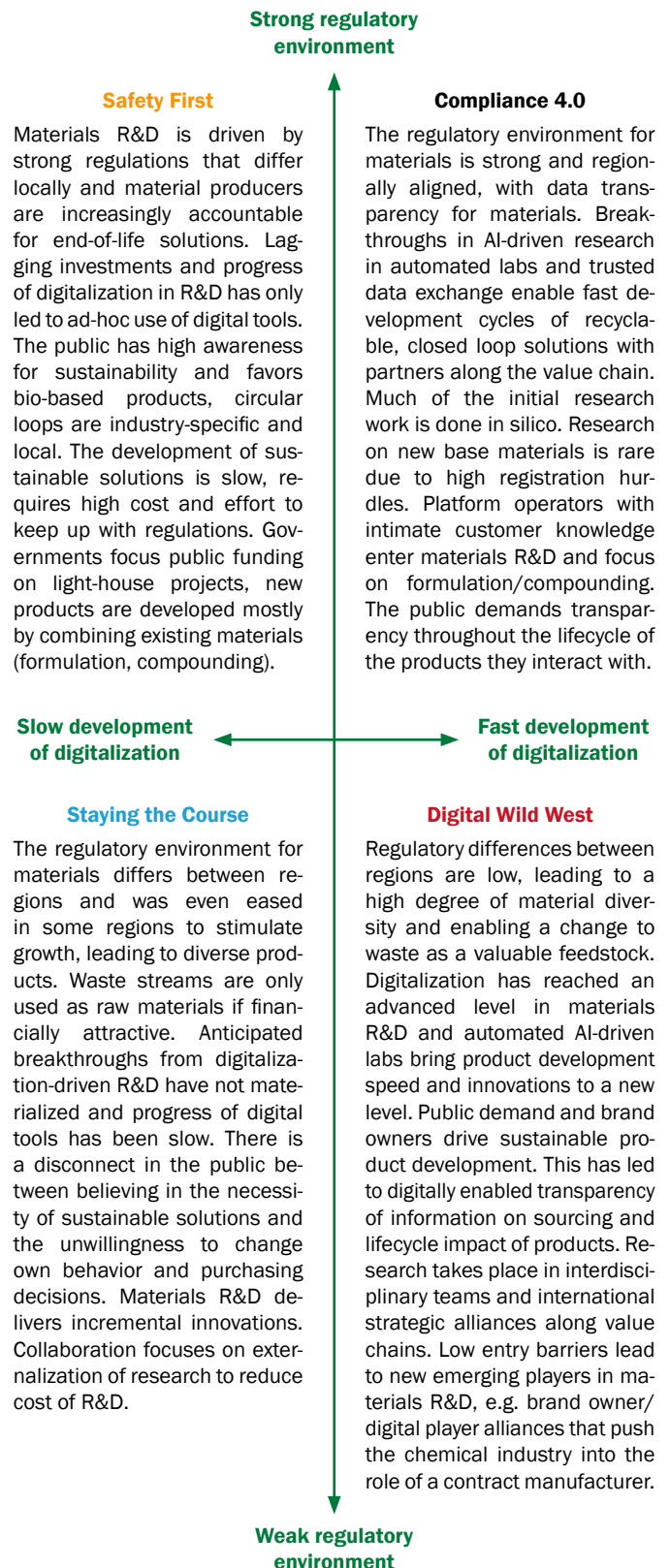


Fig. 4: Possible futures for Materials R&D in 2030.

It is not possible to predict the future, hence, thinking in scenarios is important to prepare an R&D organization for the future of circular materials.

The scenario planning exercise helped to define the framework for the future R&D set-up for sustainable materials. One major challenge, especially in the area of technical recycling processes, is the vast amount of recycling technologies and the unknown requirements from the market, since circular value chains, e.g. for Polyurethane polymer-recycling, need yet to be created. This goes along with high uncertainty, as market requirements and technologies might change rapidly in such a volatile environment. Acting like a start-up, i.e., adapting quickly and pivoting towards new solutions when required is an important way to embrace such uncertainty in research. This is represented by a virtual “Recycling Incubator” we established, in which teams work in an agile manner, using adapted “Scrum” methodology [7]. Exploring recycling technologies for the long-term time horizon is not done by developing chemistries with conventional 2-3 year work plans and fixed milestones, but by running in monthly sprints setting short-term intermediate and learning-focused targets. Frequent feedback from operating divisions, the market and stakeholders is essential to create loops with the elements idea generation, technology exploration, and feedback, with the target to early adjust the research scope when required (Figure 5).

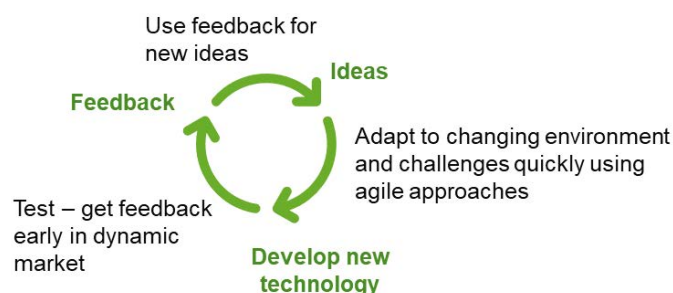


Fig. 5: Learning cycles for research projects in an agile framework. (Source: BASF)

An essential part of the learning cycles is a good overview on new, technical developments outside the company. Technology scouting supports the research community by identifying new trends, technologies and partnerships. Besides screening the academic world, also start-ups, incubators and accelerators play an increasingly important role as areas for new innovations. Tapping into these fields can result in fruitful collaborations. A prerequisite for successfully closing the technical loop, is to have a good understanding of the entire life cycle of the product. It is key to understand not only what is important for the customer, but even more how products will be handled after the End-of-Life (EoL), i.e. how they are disposed, collected, sorted, cleaned and pre-treated before they will undergo the recycling process. The understanding of the value chain or, better, the value circle and the fit of new chemistries into this circle needs to be well established in the research community. Finally, regulations are strongly driving the direction of innovations for creating sustainable materials. Regulations can restrict the use of certain materials but can also give incentives for new technologies. The European Green Deal is re-shaping Europe's economy and elements like the Chemicals Strategy for Sus-

tainability (CSS) require a close dialogue between the chemical industry and policy makers. While innovation for a sustainable and green future is key, this transition needs to be done together and a clear pathway with time to bring the required innovations to success is of high importance [6]. Our approach to tackle these challenges resulted in the above mentioned “Recycling Incubator”, the project framework we use to drive new sustainable, circular material innovations (Figure 6).

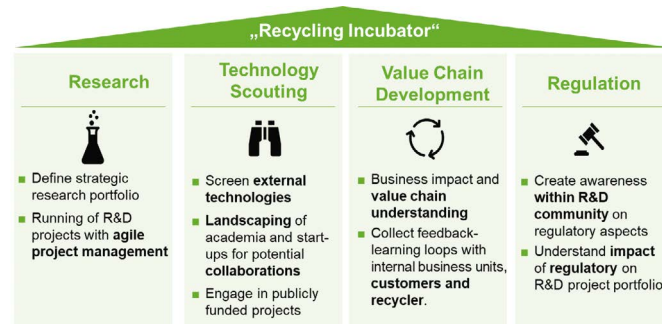


Fig. 6: Recycling Incubator (Source: BASF)

Digitalization is influencing all aspects of materials research, as mirrored in the scenario analysis. More precisely, for BASF digitalization comprises the areas of simulation, lab automation and data science. For example, to calculate the most promising polymer structure from thousands of possibilities, one needs high-performance computers. BASF runs its own supercomputer Quiriosity with a computing power of 1.75 petaflops (1 petaflops equals one quadrillion floating point operations per second), which is equivalent to the computing power of around 50,000 laptops. Simulation, lab automation and data science are targeting to increase the speed of new product developments. Competencies in these fields will quickly become key success factors for future scientists in the chemical industry.

Leveraging ecosystems and partnerships are an important element for innovation. BASF has established a broad network towards the academic world, in which sustainability, recycling and bio-based and bio-degradable polymers are one of the focus topics. Partnering with start-ups is done in different ways, e.g. via Greentown Labs near Boston (USA). Together with Greentown Labs, the largest climatetech start-up incubator in North America, BASF has kicked-off a Circularity Challenge, an initiative calling for start-ups with innovative approaches for sustainability in different areas of the chemical industry [8].

Sustainability, and related, Circularity, will be the major focus of materials research in industry: Closing the loops to cut emissions, achieving net-zero emissions and eliminating waste, while leveraging the many indispensable benefits of polymeric materials, at scale and economically. This exciting journey requires interdisciplinary approaches, systems thinking and collaboration to an extent not seen in the past, and it has already begun. Let's drive sustainability together!

The authors thank Dr. Hanns Hagen Goetzke (BASF) for his leadership in the scenario development, as well as all members of the SMCE team and steering committee for their continued input and support.

References

- [1] <https://www.basf.com/global/en/who-we-are/sustainability.html>, accessed January 20th, 2022.
- [2] Mareike Ahlf: Chemie als Schlüssel, *Bunsen-Magazin* 2021, **1**, 32-34.
- [3] Bernhard von Vacano, Hannah Mangold, Christian Seitz: Kunststoffe im Kreislauf: Die Zeit ist reif, *Chemie in unserer Zeit* 2021, **6**, 374-385.
- [4] Raoul Meys, Arne Kätelhön, Marvin Bachmann, Benedikt Winter, Christian Zibunas, Sangwon Suh, André Bardow: Achieving net-zero greenhouse gas emission plastics by a circular carbon economy, *Science* 2021, **374**, 71–76.
- [5] Herwig Buchholz, Tobias Weitzel, Ciarán McGinley: Scenario Thinking – Four Possible Futures of Sustainability, *Bunsen-Magazin* 2021, **1**, 20-23.
- [6] Martin Bruder Müller: Gemeinsam die Transformation gestalten, *Nachrichten aus der Chemie* 2022, **3**, 3.
- [7] <https://www.scrum.org/resources/what-is-scrum/>, accessed March 20th, 2022.
- [8] <https://greentownlabs.com/basf-and-greentown-labs-announce-startup-finalists-in-the-circularity-challenge/>, accessed March 18th, 2022.

Dr. Maximilian Hofmann

Maximilian Hofmann is leading the Technology Scouting team in BASF's division for Advanced Materials & Systems Research. He is focusing the scouting activities on sustainable materials, circular economy and recycling. Maximilian studied chemistry at the Universities of Tübingen and Heidelberg and was a visiting researcher at the mechanical engineering department of Stanford University, California. He received his PhD in physical chemistry from the University of Heidelberg and joined BASF's polymer research division in 2007. During his BASF career, Maximilian has held different positions, ranging from research over marketing and strategy, thereof for 2 years at BASF's Asian headquarter in Hong Kong, China.

Dr. Bernhard von Vacano

Bernhard von Vacano is a Senior Research Fellow at BASF in the area of Advanced Materials, focusing on circularity, recycling and polymer sustainability topics. He has been leading the global Scouting & Incubation unit as well as strategic collaborations with universities and startups in the respective research division. Bernhard studied chemistry, and physics as an elective subject, in Tübingen, at the University of Wales in Bangor (UK), the Max-Planck Institute for Quantum Optics in Garching and received his PhD in physical chemistry from Marburg University. Having joined BASF in 2008 in the company's polymer physics department, he has since held various positions in research and development in Germany and the USA.

Dr. Carla Seidel

Carla Seidel is a Senior Vice President at BASF and leads the department Material Physics, Analytics & Formulation. She is a member of the board of the German Chemical Society GDCh and of the strategic advisory board on energy topics for the Helmholtz Society. Carla has served in a variety of leadership roles in BASF, including competitive intelligence & strategic planning, heading the personal care ingredients business in Asia Pacific, leading the growth field energy for BASF New Business and as Vice President Acids & Specialties Europe. She had joined BASF as a lab team leader in Central Analytics, Process Research & Chemical Engineering, in 1996, after completing her PhD in analytical chemistry at the University of Hannover, where she also had studied chemistry.

Carsten Gerhardt

Eine Heimat für die Circular Economy

Das Silicon Valley ist zum Inbegriff für den Gründergeist und erfolgreiche Startups der Computerbranche geworden. In Zeiten, in denen es immer mehr um das Schließen von Stoffkreisläufen gehen muss, wird wieder so ein Ort gebraucht: ein Circular Valley®.

Circular Valley®

Standort Rhein-Ruhr-Region:

- Global führende Unternehmen
- Unternehmen der Kreislaufwirtschaft
- Einzigartiges Wissenschaftsumfeld
- Weltoffenheit, hohe Lebensqualität
- Ort der 1. und 2. Industriellen Revolution

Accelerator für Startups:

- Verbindung zu Unternehmen
- Verbindung zur Wissenschaft
- Individuelle Unterstützung

Stiftung Circular Valley®

- Öffentlichkeitsarbeit
- Politikempfehlungen
- Datenbank

Circular Valley® setzt sich für die Vision ein, diese zirkuläre Wirtschaft voranzubringen – mit der erweiterten Rhein-Ruhr-Region als Hotspot. Diese Region mit Großstädten wie Köln, Düsseldorf und Dortmund reicht von Bonn bis Münster und von Krefeld bis Siegen. Sie beherbergt rund 14 Millionen Menschen und ist damit die mit Abstand größte Metropolregion Deutschlands. Und sie ist der perfekte Standort für das Circular Valley®. Fünf Standortfaktoren sprechen auf einzigartige Art und Weise dafür: Erstens handelt es sich um eine wirtschaftlich sehr starke Region. Nirgendwo sonst auf der Welt gibt es eine höhere Konzentration an Weltmarktführern aus verschiedensten Bereichen. Etwa 300 Weltmarktführer sind in weniger als einer Stunde erreichbar. Zweitens sind in der Region bereits die bedeutendsten Unternehmen aus dem Bereich der zirkulären Wertschöpfung in Europa ansässig. Drittens gibt es eine exzellente Wissenschaftslandschaft. Die Dichte an Universitäten, Forschungsinstituten und weiteren wissenschaftlichen Einrichtungen mit einem inhaltlichen Schwerpunkt auf Kreislaufösungen ist so hoch wie nirgends sonst auf der Welt. Viertens ist die Region besonders weltoffen, bietet eine hohe Lebensqualität und ein umfassendes Kulturangebot. Das macht sie attraktiv für Menschen aus aller Welt. Und fünftens ist die Region für ihre Industrietradition bekannt, die bis heute weiterlebt. Sie ist der Ort der ersten und zweiten Industriellen Revolution auf dem Europäischen Kontinent.

Die Probleme sind bekannt: Die Ressourcen sind endlich. Verbrauch und Emissionen sind zu hoch. Trotz aller Bemühungen und Absichtserklärungen, dem Klimawandel entgegenzuwirken, liegen die CO₂-Emissionen bei nahezu 40 Mrd. Tonnen pro Jahr. Hinzu kommen rund 60 Mrd. Tonnen weiterer Emissionen aus den unterschiedlichsten Wirtschaftsbereichen, von Baustoffen bis zum allseits diskutierten Plastik. Das lineare Wirtschaftsmodell ist nicht nachhaltig und somit zum Scheitern verurteilt. Immer mehr Menschen sehen, dass ein Modell des „Take-Make-Use-Dispose“ keine Zukunft hat. Und auch die Verbraucher ärgern sich darüber, dass Produkte früh kaputt gehen, nicht reparabel sind und ihre Bestandteile sich häufig nicht wiederverwenden lassen. Für Verpackungen aus nicht recyceltem Material schwindet das Verständnis. Immer mehr setzt sich nicht nur in der Forschung, sondern auch in der Bevölkerung und der Wirtschaft die Erkenntnis durch, dass größeres Augenmerk auf Zerlegungs- und Verwertungsprozesse sowie alternative Rohstoffe gelegt werden muss. Zumindest ein Teil der Lösung kann darin liegen, Kreise von Rohstoffen zu schließen.

Die gemeinnützige Circular Valley® Stiftung ist Träger des Circular Valley®. Stifter sind neben lokalen Unternehmen wie der Stadtparkasse Wuppertal oder den Stadtwerken, national und international führende Unternehmen wie Bayer, die Barmenia Versicherungsgruppe, Coroplast, die Societe Generale und Vorker. Die Stiftung steht als Kern hinter allen Aktivitäten, um Circular Valley® zu etablieren: von der Einrichtung des Circular Valley® Accelerators über Öffentlichkeitsarbeit bis hin zu Politikempfehlungen. Die Stiftung möchte keinen Lobbyismus betreiben, sondern als Thinktank aus einer neutralen Position heraus im Schulterschluss von Wirtschaft und Wissenschaft Hinweise geben, was die besten Lösungen sind. Daneben baut die Stiftung eine Datenbank über Bedarfe und Angebote von zirkulären Lösungen auf, um auf diese Weise Partner optimal zu vernetzen.

Die Idee zum Circular Valley® und der Stiftung wurde im Gründungsort Wuppertal von Anfang an begeistert und mit großer Unterstützungsbereitschaft aufgenommen. Schnell hat sie weitere Kreise gezogen und wird von Marktführern aus den unterschiedlichsten Industrien unterstützt. Diese kommen nicht nur aus dem Inland, sondern auch bereits aus dem Ausland. Hinter der Idee steht neben den Unternehmen und wissenschaftlichen Einrichtungen mit der Wuppertalbewegung e.V. eine breite bürgerschaftliche Initiative, die unter anderem

den Bau der Wuppertaler Nordbahntrasse ermöglicht und sich dabei einiges an Vertrauen erarbeitet hat. Finanzielle Unterstützung erhält Circular Valley® außerdem vom Land NRW und der EU. Wir haben auf eine starke Unterstützerschaft von Zivilgesellschaft, Unternehmern und Unternehmen aus Wuppertal und dem Umkreis aufbauen können. Aus vielen der unterstützenden Unternehmen sind Partner geworden, die wiederum im Rahmen des Accelerator-Programms Kontakt zu jungen Unternehmen aufbauen, um diese zu unterstützen. Die Partnerunternehmen sind die Stärke von Circular Valley®. Insbesondere auch die Partner aus der Politik. NRW Wirtschaftsminister Prof. Andreas Pinkwart ist Schirmherr von Circular Valley®, und auch Umweltministerin Ursula Heinen-Esser sowie Arbeits- und Sozialminister Karl-Josef Laumann unterstützen das Circular Valley® zusammen mit Ihren Ministerien.

Startups aus aller Welt, die in dem Bereich der Kreislaufwirtschaft aktiv sind, haben zweimal im Jahr die Möglichkeit, sich für das Circular-Valley®- Accelerator-Programm zu bewerben. Nachdem ein Expertengremium die innovativsten und vielversprechendsten davon ausgewählt hat, werden diese nach Wuppertal eingeladen. Dort erhalten sie über den Zeitraum von vier Monaten die Möglichkeit, sich mit den etablierten Partnerunternehmen sowie mit den Partnerforschungseinrichtungen zu verbinden. Sie können Kontakte knüpfen, bekommen maßgeschneidertes Mentoring und Coaching sowie die Gelegenheit, vom Knowhow der mehr als 80 Partner (sowie der anderen Startups) zu profitieren. Zudem werden Workshops zu den vielfältigsten Themen des Business Building angeboten. Von Patentschutz über Personalwesen bis zum Marketing. So unterstützt der Accelerator die Startups und beschleunigt wortwörtlich den Weg zu einer zirkulären Wirtschaft. Hier werden aus Ideen Unternehmen.

Unter den 15 jungen Unternehmen der ersten Kohorte, die vom Frühjahr bis zum Sommer 2021 in Wuppertal waren, war unter anderem Polycare, die aus recycelten Materialien Baublöcke herstellen und dafür jüngst auf dem Klimagipfel in Glasgow mit dem UN-Umweltpreis „Global Call 2021“ in der Kategorie „Kreislaufwirtschaft und industrielle Entwicklung“ ausgezeichnet wurden. Ein weiterer Alumnus des Programms, Plastic Fischer, sammelt mit Hilfe von schwimmende Barrieren Plastik aus Flüssen, um zu verhindern, dass dieses in die Ozeane gelangt. Und Proservation stellt mit Verpackungsmaterialien aus pflanzlichen Abfällen der Getreideindustrie eine Alternative zu Styropor her.

Im Winter 2021-22 hat nun die zweite Kohorte von Startups ein Programm im Circular Valley® absolviert. Aus hunderten von internationalen Bewerbungen wurden 20 Startups ausgewählt. Das massive weltweite Interesse ist ein gutes Zeichen für die zirkuläre Wirtschaft. Auf dem 2. Demo Day von Circular Valley® am 3.3.2022 in der Historischen Stadthalle in Wuppertal haben Startups aus Vietnam, Indien, China, Simbabwe, Nigeria, Uganda, dem Libanon, Lettland, Deutschland, Frankreich, der Schweiz, Brasilien und Ecuador ihre Geschäftsmodelle präsentiert: ROSI Solar aus Frankreich hat es sich zur Aufgabe gemacht, Solarmodule zu recyceln, die nun 20-30 Jahre nach der Markteinführung überall auf der Welt in Kilotonnen ihr Lebensende erreichen. Madaster aus Deutschland

erstellt ein Kataster von verbauten Materialien, um so den Grundstein für Urban Mining im Bausektor zu legen. Seginus aus Ecuador zeigt beispielhaft, wie mit geringen Mitteln eine effektive landesweite Sammlung und ein Recycling von Altteilen funktionieren kann. Wir sind sehr zuversichtlich angesichts der historischen Aufgabe: Vor 200 Jahren lag in der weiteren Rhein-Ruhr-Region der Ursprung der Industrialisierung auf dem europäischen Kontinent. Dort wurde der Geist der linearen Wirtschaft aus der Flasche gelassen. Darum ist es der ideale Ort, um ihn wieder einzufangen.

Wir möchten die fünfte industrielle Revolution dort etablieren, wo auch die erste begonnen hat. So schließt sich ein weiterer Kreis.

Dr. Carsten Gerhardt



© Circular Valley

Nach seinem Studium der Physik und Mathematik sowie Anglistik an der Universität Wuppertal und am Bethel College in Kansas/USA promovierte Carsten Gerhardt in theoretischer

Festkörperphysik an der Universität Laval in Quebec/Kanada sowie der Universität Wuppertal und absolvierte einen Fernstudiengang im Bereich Wirtschaftswissenschaften. Seine berufliche Karriere als Unternehmensberater begann er 1998 mit dem Schwerpunkt auf Unternehmen aus den Bereichen Banken und Versicherungen, Energie, Pharma/Health Care, Industriegüter sowie Nichtregierungsorganisationen.

Gerhardts thematischer Fokus liegt auf den Themen Nachhaltigkeit und Agrarindustrie. Er unterstützt Unternehmen darin, langfristige Wettbewerbsvorteile im Einklang mit sozialer und ökologischer Verantwortung zu erzielen. Daneben begleitet er seit 2008 in verschiedenen Rollen den Deutschen Nachhaltigkeitspreis.

Neben seiner Tätigkeit als Unternehmensberater ist Gerhardt Initiator und Vorsitzender der Wuppertalbewegung e.V., einem Verein zur Steigerung der Lebensqualität in Wuppertal. Hierzu gehört unter anderem die Reaktivierung der stillgelegten Bahnstrecke „Nordbahntrasse“ durch Wuppertal als Fuß-, Rad- und Inline-Skating-Weg. Damit engagiert er sich auch privat sehr unmittelbar für ein Projekt zum Thema Nachhaltigkeit. Seit 2020 engagiert sich Gerhardt für die Positionierung des Rhein-Ruhr-Gebietes als Circular Valley® – eine Region, in der global führende Lösungen für die Zirkuläre Wertschöpfung entwickelt werden.

Patrick Glöckner and Felix Müller

Speciality Chemicals and how they contribute to the Quest for Circular Plastics Solutions

Abstract

The chemical industry is realizing the importance of recycling already since many years, in diverse fields circular processes are already established. The current need for sustainable products in the context of the latest UN and EU initiatives leads to a more focused approach. Evonik bundled all its circular plastics activities in a global program which provides the market solutions to enable the transition from linear to circular plastic value chains. Specialty chemicals improve the efficiency and quality of different recycling technologies to enable economically and ecologically reasonable plastic applications, which meet the quality expectations of consumers as well.

The market view

The growing production of polymers in the last decades has resulted in a lot of advanced applications of polymeric materials which can improve in the food industry with advanced packaging food safety, shelf life, optical presentation, and other desirable properties, in the manufacture of vehicles weight, shape and performance. Still the growth of polymer production, reaching a global volume of 368 mio. t in 2019 according to Plastics Europe statistics [1] has caused concern globally. Especially the microplastics quantities in the oceans can be a real challenge for the survival of mankind, but as well plain burning of polymers for energy recovery is contributing to the CO₂ production and thus to global warming in a significant way.

2022 is called by the United Nations the International Year of Basic Sciences for Sustainable Development [2]. This together with important initiatives like the Circular Economy Action Plan (CEAP) [3] of the EU is seen as a main driver for current research and real actions. The EU plan wants the decoupling of economic growth and resource consumption by establishing a Circular Economy. In this context the polymeric materials are in focus as they have a higher potential for an efficient and successful reworking as concrete or metals. This is acknowledged as well in China which plans to install a rigid plastics recycling system in the next five years.

The EU is now preparing legislation for compulsory usage of recycled materials in diverse plastics applications, in packaging as well as in the automotive industry, as these applications account for a major part of polymer consumption. PET bottles need to have a 25 % share of recycled material by 2025 and this seems to be viable as already many producers of bottled waters do this successfully and consumers accept this. The consumer goods manufacturers therefore see the opportunities of the usage of ecological safer materials and develop complex sustainability strategies, aligning themselves with international and local political initiatives. The packaging sector with its share of nearly half of the global polymer consumption is leading in this quest for a circular economy now, but performance polymers get as well more in focus even if their lifetime is much longer.

The demand from consumers for sustainable products is now well above the availability of materials. The share of bioplastics is globally still around 1 %. Recycled materials are only available in limited quantities and production capacities. The legal framework is still under discussion, which makes large investments impossible. There are as well ongoing discussions on the best way of polymer recycling, as there are now diverse technologies available, via mechanical or chemical processes. With this, the demand of the ever-growing polymer industry needs to be filled as the classic raw material, crude oil, will be less dominant in the years to come.

The role of Specialty Chemicals for the Circular Plastics World

Polymers are complex blends of the basic chemical material and a lot of additives which decide on properties during production and in the final product. The basic materials PE, PP, PS, PUR, PVC, and PET amount for more than 80 % of the polymer usage in Europe. [1] The differentiation of the material properties is done by additives which are added during the production process. A PUR based product can be the dashboard or the seat cushion in a car, this shows the impact of additives. The specialty chemicals industry is therefore not focused on the large volume basic raw materials but on effects with low dosage of materials. [4] In the past, the focus was on improved properties, from antistatic additives to softening covering an immense range of effects. [5] Additives for improving stability of polymer systems already started to add sustainability effects to the offering already a long time ago, as they improved the lifetime of the finished good. The specialty chemicals industry developed exciting solutions, still on a more insular way

Dr. Patrick Glöckner and Dr. Felix Müller
Evonik Operations GmbH
Paul-Baumann-Strasse 1, D-45772 Marl
Patrick.gloeckner@evonik.com, Felix.mueller@evonik.com

www.evonik.com

as they focused on special niches. [4, 6] Now we are in the position to connect this map of small islands to a large area of competence and by that contribute to the circular plastics concepts in a more thorough way. At Evonik we chose to set up a global program for this.

With this experience, the specialty chemicals industry can drive now as well the options for circular plastics models as it did in the past in the linear production chain. Looking at the different ways to turn the linear route into a circular one, we see the opportunities as in fig 1.

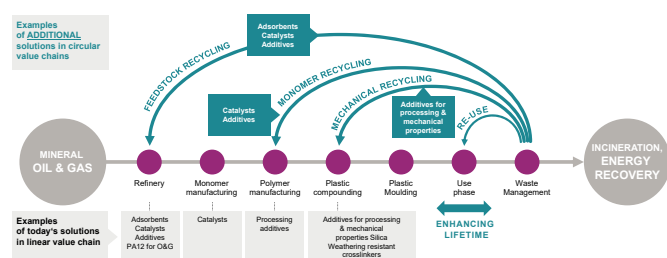


Fig. 1: Options for the transfer of linear compounding of polymeric systems to circular processes

Recycling Technologies

Diverse recycling technologies have been developed in the last years to recover material with a focus on low energy consumption. The easiest way is mechanical recycling of thermoplastic polymers, a pure physical process. Especially pure polymers in a defined closed system as the PET-bottle in food or the bottles of household cleaning agents which are produced even transparent from recycled PP from waste are good examples, which are strongly pushed by the Consumer Goods industry. [7] The chemical recycling is still on the way to get established but the share of products is growing which are made from polymers which are heavily contaminated or dyed, or as duroplasts not ready to melt again.

Mechanical Recycling

The introduction of collection systems of polymeric packaging material has been established in many countries, in Germany already since 1991. In the beginning, a large portion of the material was incinerated for energy recovery, but in the last decade the recycled quantities have doubled to 10 mio t in the EU, mainly by mechanical recycling. [1]. This requires improved processes for a competitive efficiency, a high yield and a quality of the recycled material which is accepted by the value chain from producer to consumer. A schematic mechanical recycling process is depicted in figure 2. Among the functional additives required in such a set up are defoamers for the used water and special surfactants for the removal of labels etc. Drying aids, superspreading surfactants, are used to remove water from the cleaned plastic material, thus allowing a finishing of the material with low energy consumption. [8] Malodor control is another feature required to form acceptable granulates which

can be used for high value packaging. [9] Melting properties can be adjusted as well to qualify the material for use in a modern packaging unit. [10]

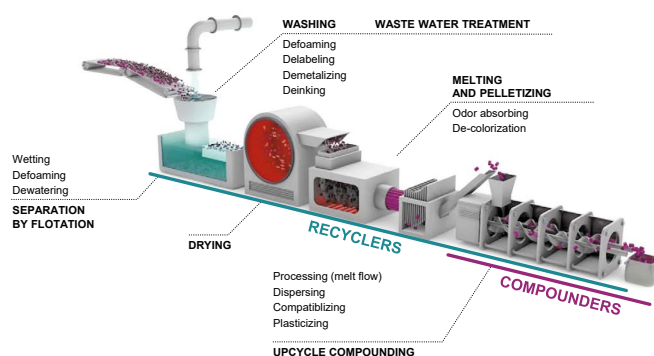


Fig. 2: Specialty chemicals involved in the mechanical recycling process

Chemical Recycling

For those materials which are not available to simple mechanical recycling, chemical processes are under development to bring back to polymers into a monomeric form which can be polymerized again. This can be pyrolysis to the simple ethylene or propylene molecule, but there are as well other chemical recycling processes. A good example for a solvolysis process is the recycling of polyurethane, which can be split into the diamine and diol where it was made from. As application, mattresses can be considered: It sounds reasonable to guess the average lifetime of a mattress in Europe to be about 10 years, this means that about 40 million mattresses are prone to recycling in Europe every year. In the past, incineration or landfill were the usual fate of an old mattress. The hydrolysis of the polyurethane foam of these mattresses using special catalysts and additives can recover the raw materials under mild conditions and without undesirable side products. The process is currently in the upscaling with a leading polyurethane producer. [11]

As well in the upscaling is the pyrolysis process which is done usually at more than 400 °C and low oxygen conditions, the polymer chains will be cut down to short chain hydrocarbons and are ready for further transformation. [12] Pyrolysis is best suited to handle PE and PP, as well in mixtures. While pyrolysis today is focused mostly on fuel production, chemical companies investigate the process to make naphtha, which can be fed into petrochemical plants and become polyethylene and polypropylene again. Still, for PVC is pyrolysis not yet viable, and PET can cause problems in pyrolysis units and should better be treated mechanically. Diverse catalysts are the key specialty chemicals which support this process.

Conclusion

As with all topics in the field of sustainability there is in the world of circular plastics not one magic bullet which solves all issues of mankind. Circular Plastics starts with any individual which should take care with his or her consumption of poly-

mers and the treatment and sorting of waste materials and ends with new complex chains of cooperation of different industries to find together solutions for the polymer wastes, one of the major topics for a sustainable future. [13] The industries along the value chains involved need to join forces to solve the issues which are still there. Science is needed as well, with new effects and properties required to make products finally sustainable and acceptable for the consumer world.

References

- [1] Plastics Europe: (https://plasticseurope.org/de/wp-content/uploads/sites/3/2021/11/Plastics_the_facts-WEB-2020_versionJun21_final-1.pdf)
- [2] UN document (<https://undocs.org/en/A/RES/76/14>)
- [3] Circular Economy Action Plan (https://ec.europa.eu/environment/pdf/circular-economy/new_circular_economy_action_plan.pdf)
- [4] Felix Müller, Patrick Winter, Volker Schlicht, Andrea Tietze, Werner Michel, Lotus Effect, in Handbook of Cleaning, Ingegard Johansson and Ponisseril Somasundaran, ed. Elsevier, Amsterdam 2007, 791-811.
- [5] Felix Müller, Stefan Silber, Polysiloxanes Chapter 10.25 in Polymer Science: a Comprehensive Reference, Vol. 10, Rainer Höfer, ed. Elsevier, Amsterdam 2012, 443-452.
- [6] Burghard Grüning, Janet Kosiek, Felix Müller, Georg Schick, Oliver Thum Sustainable Solutions with Surfactants, *HPC today* 2007, **4**, 20-23.
- [7] Werner & Mertz GmbH, (<https://initiative-frosch.de/verpackungen/>)
- [8] Rene Hänsel, Ewald Sieverding, Michael Ferenz, Gerd Windbiel, Andrea Jakobi, EP 3106033
- [9] Jörg Peggau, Thomas Böhmer, Felix Müller, Development and Analytics of Odor Absorbers, *Tenside, Surfactants, Detergents* 2004, **41**, 282-286.
- [10] Mark Holmes, The Additive Route to improved recycled Plastics, *Plastics Recycling World* 2021, **3-4**, 39-45 (<https://content.yudu.com/web/1rl19/0A42x3p/PRWMarApr21/index.html>)
- [11] Arkadi Maisels, Andreas Hiller, Franz-Georg Simon, Chemisches Recycling für Kunststoffe: Status und Perspektiven, *Chem. Ing. Tech.* 2021, **93**, 1742-1750
- [12] Alexander Tullo Plastic has a problem; is chemical recycling the solution? *C&EN* 2019, 39/97 (<https://cen.acs.org/environment/recycling/Plastic-problem-chemical-recycling-solution/97/i39>)
- [13] Patrick Glöckner, *NMWP-magazine*, 2021, 2

Dr. Patrick Gloeckner

Patrick Gloeckner is head of Evonik's circular plastics program which bundles all activities around plastic recycling across the entire company. The specialty chemical company provides a comprehensive additive portfolio for mechanical recycling to improve process efficiency and quality of the resulting recyclates. In feedstock recycling Evonik's enabling technologies make processes more robust and remove all kinds of contaminants. In PU&PET solvolysis Evonik develops for its partners catalysts and process knowhow to recover monomers under mild conditions. Patrick's passion is to set up ecosystems along value chains to enable sustainable circular plastics and to closing the loops. The polymer chemist has a 20 years history in the industry and represents Evonik in several national and international associations.



Dr. Felix Müller

Felix Müller is Head of Academic Networks in the Evonik RD&I (Research, Development and Innovation) Organisation. He takes care of scientific university relations and organizes diverse events at Evonik. After his PhD in Organic Chemistry in Münster he worked as a management consultant and joined Th. Goldschmidt AG (Essen) in 1993. In his 30 years career in the chemical industry, he worked on product development and technical service in food, cleaning and cosmetic industries as well as on polymer additives and road construction. He established the global project management of system at Evonik RD&I. He is active in several scientific and industry organizations and teaches GDCh courses since many years.



Peter H. Seeberger und Matthew B. Plutschack

Transformation der Chemie

Fast alle Produkte, die wir nutzen (97%), sind aus Chemikalien hergestellt oder chemisch behandelt. Die Chemieindustrie produziert eine riesige Produktpalette, die viele andere Industrien unterstützen wie Pestizide für die Landwirtschaft, Säuren für den Bergbau, Schmierstoffe für Maschinen, Inhaltsstoffe in Reinigungsmitteln, Kosmetika und Pharmazeutika sowie Kunststoffe.

Chemie hat eine lange und erfolgreiche Geschichte in Deutschland. Die Alchemisten, frühe Chemiker, versuchten sich erfolglos an der Umwandlung von preisgünstigen in wertvolle Stoffe, vor allem Gold. Aber bereits Anfangs des 18. Jahrhunderts entstand durch Zufall ein neuer Industriezweig in Sachsen, nachdem 1708 die Herstellung von Porzellan gelang. Mitte des 19. Jahrhunderts übernahm Deutschland die weltweit führende Rolle, als sich die Chemie gerade als Wissenschaft entwickelte. Die führenden Chemieprofessoren waren in Deutschland beheimatet und Forscher aus den USA und England lernten in deren Arbeitskreisen die Grundlage für den Aufbau der Chemieforschung in ihren Heimatländern. Wichtige Durchbrüche in der akademischen Forschung führten zur Etablierung kompletter neuer Industriezweige unter anderem für die Farbstoff- (z.B. BASF) und Medikamentenherstellung (z.B. Bayer) mit Firmen, die bis heute zu den größten der Welt zählen. Da die chemische Industrie sehr energieintensiv war, entstanden Chemiestandorte in Regionen, in denen viel günstige Energie in Form von Braun- oder Steinkohle verfügbar war sowie große Flüsse, die zum einen notwendiges Wasser lieferten und zum anderen für die „Abfallbeseitigung“ genutzt wurden. Im mitteldeutschen Revier nahe Leipzig und Halle entstand so eine Reihe von Chemiestandorten, bei denen der Einsatz von großen Mengen günstig verfügbarer Braunkohle zur Energiegewinnung und als Grundstoff für die Chemikalienherstellung im Vordergrund stand.

Von mehr als 22.500 verschiedenen Chemikalien wird jeweils mehr als eine Tonne jährlich in der EU hergestellt oder eingeführt. In Deutschland sind zurzeit über 2.500 Wirkstoffe in der Humanmedizin im Verkehr, mit jährlichen Verbrauchsmengen von mehr als 30.000 Tonnen. Der Chemiesektor verbraucht jedoch viel Energie, produziert viel Kohlenstoffdioxid sowie giftige Abfälle und Abwässer. Die von importierten fossilen Rohstoffen

ausgehenden Produktionsketten in der Chemieindustrie sind größtenteils linear und führen zu einem Abfallproblem. In den vergangenen Jahrzehnten wurden immer größere Teile der Forschung und auch der Produktion ins Ausland verlegt, wo neben niedrigen Lohn- und Energiekosten auch laxere Umweltstandards lockten. Die ursprünglich niedrigere Produktivität wurde in diesen Ländern durch verbesserte Ausbildung ausgeglichen. Waren es anfänglich nur Grundchemikalien und einfache Feinchemikalien, so wurden später auch komplexe Prozesse und die Synthese von Wirkstoffen und Spezialchemikalien ins Ausland verlegt. Die derzeitigen hochkomplexen und eng verknüpften Produktionsprozesse müssen nun umgestellt werden, wobei sich die Ausgangsmaterialien, die Produktionsprozesse sowie auch teilweise die Produkte selbst ändern werden. Die Änderung einzelner Parameter in dem System, wie z.B. eine starke Erhöhung der Energiepreise oder Versorgungsengpässe mit Zwischenprodukten, kann zu Lieferengpässen in verschiedenen Industrien führen. Die COVID-19 Pandemie und der Krieg in der Ukraine haben diese Probleme deutlich aufgezeigt. Politische Entscheidungen zur Erreichung der Klimaziele (Erhöhung der Energiepreise, Besteuerung von CO₂ Ausstoß) werden einen tiefgreifenden Einfluss haben.

Um die Resilienz der chemischen Produktion zu erhöhen und diese gleichzeitig nachhaltig zu gestalten, können nicht einfach althergebrachte Verfahren eingesetzt werden, sondern es muss eine völlig neue Kreislaufwirtschaft für die Herstellung chemischer Produkte aus nachwachsenden Roh- sowie recycelten Abfallstoffen mit Hilfe neuer Synthese- und Trennverfahren entwickelt und zum Einsatz gebracht werden. Umwandlungen müssen effizient und selektiv sein, während die Reaktionsführung automatisiert wird, um Arbeitskosten zu senken. Künstliche Intelligenz wird die Reaktionsplanung basierend auf normierten Umsetzungen und die Erarbeitung neuer Produktionswege grundlegend verändern. Diese Transformation der Chemie ist **eine der großen Menschheitsaufgaben des 21. Jahrhunderts**, die schnellstmöglich angegangen werden muss.

Durch die enge Zusammenarbeit der Grundlagenforschung in Universitäten und Forschungseinrichtungen mit den Forschungsabteilungen der Industrie nahmen die Anzahl sowie die Größe der Chemiefabriken ab Mitte des 19. Jahrhunderts zu. Nur so wird auch die Transformation der Chemie zu einer nachhaltigen Kreislaufwirtschaft stattfinden. Im September 2021 hat unser Team eine Förderung des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) zur Erarbeitung eines Konzepts zum Aufbau eines Großforschungszentrums zur Neuausrichtung der Chemieproduktion im Osten Deutschlands erhalten. Das „Center for the Transformation of Chemistry (CTC)“ will helfen, die deutsche Chemieindustrie in eine Kreislaufwirtschaft zu verwandeln, um sich mittel- und langfristig von Kohle, Gas und Erdöl unabhängiger zu machen. Die Nutzung nachwachsender Rohstoffe und Recyclingmaterial, die Etablierung kurzer Transportwege sowie lokaler und kostengünsti-

Prof. Dr. Peter H. Seeberger
Direktor, Biomolekulare Systeme
Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung
Am Mühlenberg 1, 14476 Potsdam
Peter.Seeberger@mpikg.mpg.de
www.mpg.de/biomolekulare-systeme/direktor/peter-seeberger

Dr. Matthew B. Plutschack
Biomolekulare Systeme
Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung
Am Mühlenberg 1, 14476 Potsdam
Matthew.Plutschack@mpikg.mpg.de

ger Produktionsprozesse soll vielen Industriezweigen den Weg in eine nachhaltige und prosperierende Zukunft bereiten.

Bei einem Teil der geplanten Forschungsthemen geht es um die Digitalisierung der chemischen Forschung. Die systematische Erfassung normierter Synthesedaten wird der Grundstein für die Etablierung nationaler und europäischer Datenbanken im Bereich der Chemie sein. Diese Daten sind von immensem Wert für die Entwicklung von KI-gestützten Synthesen und in der Reaktionsentwicklung. KI wird in Zukunft eine immer wichtigere Rolle in der Chemie spielen und die nötigen Informationen, welche Reaktionen als Teil von Produktionsprozessen innerhalb einer komplexen Kreislaufwirtschaft verlässlich eingesetzt werden, werden künftig durch KI gestützt. Darüber hinaus können verlässliche

Prof. Dr. Peter Seeberger

Peter Seeberger, Jahrgang 1966, studierte an der Universität Erlangen-Nürnberg Chemie und promovierte 1995 als Fulbright-Stipendiat an der University of Colorado in Boulder in Biochemie. Nach einem Postdoktorandenaufenthalt am Sloan-Kettering Cancer Center in New York wurde er 1998 Assistant Professor am Massachusetts Institute of Technology (MIT) und avancierte dort 2002 zum Firmenich Associate Professor of Chemistry. Ab 2003 war er Professor für Organische Chemie an der ETH Zürich. Seit 2009 leitet er die Abteilung „Biomolekulare Systeme“ am Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung in Potsdam, ist Professor an der Freien Universität Berlin. Er ist Mitglied des Senats der MPG und des Stiftungsrats der TiHo Hannover. Seit 2021 ist er Vizepräsident der DFG.

Seine Arbeitsgruppe forscht im Grenzgebiet von Chemie und Biologie. Neben bahnbrechenden Erfindungen im Bereich der automatischen Synthese komplexer Zucker entwickelt er neue kontinuierliche Synthesemethoden für die Totalsynthese von Wirkstoffen. Neben biologischen Arbeiten zur Aufschlüsselung von Signalübertragung steht die Erforschung der Materialeigenschaften komplexer Zucker im Vordergrund. Die Grundlagenforschung im Bereich der Immunologie hat zur Entwicklung von Impfstoffen beigetragen. Impfstoffe gegen Krankenhauskeime stehen nun kurz vor der klinischen Entwicklung. Aus den Arbeiten im Seeberger Labor sind mehrere erfolgreiche Firmen in Deutschland, der Schweiz und den USA hervorgegangen.

Peter H. Seeberger ist Herausgeber des open access „Beilstein Journal for Organic Chemistry“. Als Mitgründer der Tesfa-Ilg „Hope for Africa“ Foundation setzt er sich für verbesserte Lebensbedingungen in Äthiopien ein.



Vorhersagen über die Erfolgchancen neuer Reaktionen basierend auf belastbaren Informationen zu Reaktionen anderer Moleküle so in Zukunft die „Trial-and-Error“ Suche und damit unnötige Experimente vermeiden. Dieses Vorgehen beschleunigt den Innovationsprozess, schont die Umwelt und wird ein zentraler Teil der Forschungsstrategie des CTC.

Das CTC will organisatorisch neue Wege gehen, indem es etablierte Ansätze integriert, die in Deutschland bisher separat an Universitäten und in außeruniversitären Forschungseinrichtungen verfolgt werden, um die Brücke von bahnbrechender Grundlagenforschung in die anwendungsnahe Forschung zu schlagen. Neben dieser „unter einem Dach“-Strategie werden auch ergebnisorientierte Managementstrukturen nach höchst effektiven internationalen Standards implementiert. Die in der deutschen Forschungslandschaft einzigartige „Talentschmiede“ baut auf US- (Janelia Research Campus) und UK- (MRC) Vorbilder in den Lebenswissenschaften auf. Bis zu 40 unabhängige Forschergruppen werden von einem/r Assistenzprofessor*in entsprechenden jungen Forscher*in geleitet, die eng von einem Mentorennetzwerk betreut werden. Das interne Projektmanagement und die Projektförderung wird eine DARPA-ähnliche Struktur verfolgen, die Innovationen schnellstmöglich in den privaten Sektor überführt. Der „Maschinenraum“ dient dazu, das finanzielle und Forschungsrisiko zu reduzieren, indem der Wert des geistigen Eigentums bewertet und vollumfänglich geschützt werden kann. Da Ausgründungen zentrales Ziele des CTC sind, werden Programme für Unternehmer ähnlich dem amerikanischen i-Corps und dem „MIT Industrial Liaison Program“ etabliert, damit Forscher*innen des CTC sich über unternehmerische Anforderungen informieren können und attraktive Karrierewege vor Ort im mitteldeutschen Revier als Alternative zu Laufbahnen in der Akademie oder Großindustrie entstehen.

Dr. Matthew B. Plutschack

Matthew Plutschack kommt ursprünglich aus den Vereinigten Staaten, wo er an der University of Wisconsin – Madison Chemie studierte und seinen Master organischer Chemie an der Florida State University absolvierte. 2013 kam er nach Deutschland als Austauschstudent, um im Seeberger Labor zu forschen. Nach einer erstaunlichen Zeit, wissenschaftlich und kulturell, entschied er sich in Deutschland zu bleiben und durch die Unterstützung des DAAD promovierte er 2017 bei Prof. Seeberger. Während seiner Doktorarbeit hatte er die Chancen, an vielen wertvollen Veranstaltungen, wie z.B. den JCF-Frühjahrssymposia, dem BASF Sommerkurs sowie der Lindauer Nobelpreisträgertagung teilzunehmen. Nach einem Postdoktorandenaufenthalt am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung im Mülheim an der Ruhr kam er nach Potsdam zurück, um das Konzept des mitteldeutschen CTC zu entwickeln.



Martina Neises-von Puttkamer

Fuels for the Future

Imagine yourself 20 years from now in the future. You are leaving the house in the morning and get in your car - maybe you want to drive to work, maybe you want to visit a friend. Once you have taken place in the back seat, you give your driving assistant the destination and the car starts moving. Your driving assistant is an Artificial Intelligence and the car drives all by itself. You can sit back and relax. Shortly after the departure, a small red lamp lights up at the front - you are running out of fuel or to put it old-fashioned, the tank is empty. But don't worry, your driving assistant has already recognized and adjusted the route accordingly. What do you think will happen now? Let's run through several possibilities:

- Your driving assistant pilots the car to the next parking space. In the future, parking spaces with electric charging stations are no longer a rarity, but can be found everywhere. According to your habits and preferences, that your driving assistant knows well, it has chosen a charging station right in front of your favorite coffee shop. No cable or socket is required for charging. This is done simply by induction. All you have to do is confirm the loading process in the app of your mobile device and off you go. During the fifteen minutes that charging takes, you grab a coffee. But maybe you have another option in mind. How about this one:
- Your driving assistant drives to the next service station where a big 'H2' sign is blinking in front. You get out, go to the petrol pump and close the filler neck on your car. The tank is being filled up with pressurized hydrogen. After a few minutes, refueling is finished and you can continue your journey. Still not the scenario that you have in mind? Here's another option:
- Your driving assistant drives to the next service station. It's an ordinary gas station, similar to the ones we know today. You get out, walk to the pump, choose your fuel and fill up, just as you do today. Has nothing changed at all? That would be the saddest of all options. So here is the hopeful alternative:
- The fuel is no longer obtained from oil. It is a synthetic fuel, made from other raw materials than oil and using only renewable energy sources during production. The CO₂ that your and all other cars emit is filtered out of the air and used again to produce these synthetic fuels – a closed cycle.

Returning to the present, there is a lot of controversial discussion between scientists, politicians and industrial stakeholders about which fuel and technology we will use in the future to meet our needs of mobility. While some claim that they have

already found the Holy Grail others are more conservative leaving space for various options and scenarios. The good point is: there is a discussion at all. Because it shows that something is of such far-reaching importance that we take time to talk about it. But discussions are only the first step, what it takes then are actions. And the necessity to act is clear. Statistics show, that the share of renewable energy carriers in the worldwide energy consumption in 2018 was at around 11 % [1], the share being differently high for the different final energy usages power, thermal and transport [1]. While the share of renewable energy sources in power production has significantly increased over the last years and by 2018 was heading towards the 30 % mark, the share in thermal energy was at around 10 % and in transport even below 5 % [1]. When looking at the shares of renewable energy carriers in Europe and in Germany, the numbers are slightly higher for the total energy consumption. But the trends are similar for the respective sectors [2, 3]. It is thus clear that while renewable energy carriers could break into the market for electricity production, they are still far behind the traditional fossil energy carriers especially in the transport sector.

But as we have seen in our little mind game at the beginning of this article there are options available. There are e-mobility, hydrogen and synthetic fuels that encompass different liquid or gaseous fuels under its term. Now what are the hurdles that block a transition?

A transition from our current system based on fuels gained mainly from oil to a sustainable one based on renewable energy carriers and circularity is complex and linked to radical changes of the whole system. All of the available options come with conditions and characteristics that hinder them to simply take over the place of fossil fuels. Electricity has to be produced from renewable energy carriers and it has to be stored. Leading us straight to another topic that is directly linked to the energy transition. The topic of energy storage. I will leave this vast field to other experts to discuss, just pointing out here, how crucial this field is for the energy transition - being at the bottom an energy storage transition - to work out even.

Hydrogen is a strong candidate to play a major role in our future energy supply not only in the mobility but also in the industrial sector. It has a high mass specific energy density, but a rather low volume specific one and needs to be stored and transported either under pressure, liquefied or chemically bound to other substances. Furthermore, hydrogen is a secondary energy carrier that is produced from primary energy resources such as natural gas or water. Synthetic fuels as another option comprise different fuels under its term, such as diesel, gasoline, kerosene, methanol or synthetic natural gas. The difference to our conventional fuels is their way of production. The resource for synthetic fuels is not oil, but others such as gas, coal, biomass or carbon dioxide. Through a chain of

Dr. Martina Neises-von Puttkamer
Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.
Institut für Future Fuels
Professor-Rehm-Strasse 1, D-52428 Jülich
Martina.neises@dlr.de

<https://dlr.de/ff>

chemical process steps known fuels such as diesel, gas or kerosene can be produced. The production often starts with the segmentation of the resource into syngas – a mixture of H_2 and CO – followed by for example Fischer-Tropsch synthesis. The advantages are clear. We gain fuels that we already know how to handle. They can be used in known energy converters such as combustion engines and in the existing infrastructure. These processes though often suffer from a low overall energy efficiency and high complexity leading to higher prices compared to conventional oil-based fuels. And they still need a carbon source during production and emit CO_2 . Therefore, they are potentially only interesting as an intermediate step and if we can use and re-use the carbon in a closed circle.

In short, there are many challenges that need to be overcome no matter which fuels and fuel production technologies we will use in the future. Work on different levels, topics and disciplines is necessary to answer the question: What will mobility that truly meets the sustainability criteria and goals [4, 5] look like in the future?

To advance on the answer to this question, the German Aerospace Center founded in 2021 the Institute of Future Fuels. The name stands for itself. Its main site is in Jülich between Aachen, Düsseldorf and Cologne, in the middle of the so-called Rheinisches Revier in Nordrhein-Westfalen and surrounded by surface mines for brown coal. A clear signal, that old and new come together here with the idea to replace fossil-based processes by CO_2 lean ones in the future. The vision of the institute is to develop technological solutions for sustainable processes of fuel production for the future mobility and industry. Its main idea is to harvest large amounts of solar energy in the sunbelt regions of the earth and use it together with renewable resources such as water and air to produce fuels cost efficiently.

The fuel production processes being investigated encompass a wide range of electrochemical, thermochemical and photochemical pathways. A lot of these processes start off with water or CO_2 , which is gained from the off gas of an industrial process or from air. By using renewable energy carriers they produce hydrogen or synthetic liquid or gaseous fuels. Let's look at some example processes and most interestingly the challenges that are being faced.

- Electrochemical pathways include electrolysis for production of hydrogen or CO from water or CO_2 respectively. The institute investigates especially high-temperature electrolysis of water vapor or co-electrolysis of water vapor and CO_2 . Heat and electricity needed are derived from renewable energy carriers. The integration of high-temperature solar heat into the electrolyser can reduce the amount of electricity needed and bears advantages compared to conventional electrolysis. The implementation and smart operation of such an electrolyser to ensure high efficiency and life time are amongst the challenges here.

- Thermochemical pathways use thermal energy for the production of hydrogen and syngas and therefore spare the intermediate step of electricity production. Furthermore, they can be coupled with high temperature heat for example from a concentrating solar system and thermal energy storages. The latter being simpler and cheaper than electrochemical electrical energy storages such as batteries. So-called thermochemical

cycles include a variety of different processes, which can generate hydrogen or syngas from water or CO_2 in multiple chemical steps. All of them use certain materials that are being reused and cycled within the process such as metal oxides or sulfuric acid. Challenges here include the development of new materials, such as redox materials or catalysts that can be cycled thousands of times without significant loss of activity. The materials have to cope with certain unusual operating conditions. A combination of thermochemical pathways with a renewable energy source such as the sun opens up completely new demands on catalysts and reaction materials used in the processes. While the use of fossil resources made it easy to operate at constant conditions 24/7, a renewable energy carrier is fluctuating and cannot provide such a constant energy output profile. Therefore, the demands on materials are often broadened: they have to be thermochemical shock resistant, need certain optical properties such as a high optical absorptivity or have to maintain a high activity and lifetime even under fluctuating operating conditions. A smart combination of different renewable energy carriers and the integration of thermal storages can smoothen fluctuating energy curves. Leading to the field of system design and operation, which is crucial for an efficient and cost optimized plant operation.

The integration of renewable energy carriers and new components such as storages lead to plant designs that require optimized operational strategies different from conventional chemical plants or from renewable power production. The operation of future fuel production plants is another topic being investigated at the Institute of Future Fuels. It includes new measurement and control systems, hardware and software development and the incorporation of novel technologies such as artificial intelligence in the system.

The institute also investigates the incorporation of renewable energy carriers in known fuel production and industrial processes with a high demand of high-temperature process heat such as the cement industry or metals processing. No matter if the process is new or old, the replacement of fossil resources with renewable energy carriers and storage systems is never straight forward and needs investigations at different levels and scales. It starts often on a small scale with basic research to gain understanding about e.g. reaction kinetics, material properties and degradation effects. Those efforts are accompanied by component design and followed by the scaling of the systems, the optimization of the overall plant design and the integration of all components into one system. Methods on all levels include modelling efforts as well as experimental work. The latter reaching from lab scale set-ups up to large installations using the infrastructure of DLR such as a high-flux solar simulator that enables radiation powers of up to 300 kilowatts and a solar tower system. Of course, other fields of interest that are equally important as the purely scientific and engineering challenges need to be faced – most important the evaluation of a process in terms of meeting the sustainability criteria and not to forget costs. To close this gap, the institute works on techno-socio-economic analyses and life cycle assessments to compare different pathways with each other and to propose roadmaps for the introduction of sustainable fuels. This work is crucial, because in the end, scientist and engineers need to address not only their community, but also industry, politicians and the broader public.

The wide fields of work from material development, chemical engineering to control theory and life cycle assessment require experts with different backgrounds and knowledge - chemists, physicists, material researchers, engineers of various fields and computer scientists. And not least a wide network and collaborations with academia and industry to work together on the mentioned challenges and transfer ideas at last into reality.

References

- [1] REN21. 2021. Renewables 2021 Global Status Report, (Paris: REN21 Secretariat). ISBN 978-3-948393-03-8.
- [2] European Environment Agency (EEA), <https://ec.europa.eu/eurostat/de/web/energy/data>, 2022.
- [3] AGEE-Stat / Umweltbundesamt, <https://www.umweltbundesamt.de/themen/klima-energie/erneuerbare-energien/erneuerbare-energien-in-zahlen#uberblick>, 2022.
- [4] Report of the World Commission on Environment and Development: Our Common Future, United Nations, Brundtland Report, 1987.
- [5] United Nations, Sustainable Development Goals, [Take Action for the Sustainable Development Goals - United Nations Sustainable Development](#), 2022.

Dr. Martina Neises-von Puttkamer



Dr. Martina Neises-von Puttkamer is group leader at the Institute of Future Fuels in Jülich, which is part of the German Aerospace Center (DLR). She is a mechanical engineer and came first into touch with novel fuels in her final thesis at the DLR Institute of Solar Research. In her PhD she investigated pathways and materials for hydrogen production via thermochemical cycles with high-temperature solar heat. Since then she has been researching and working on the vision of collecting and storing the sun's energy as an almost inexhaustible energy source and integrating it into various applications. Whether for power generation, for metals processing or for the production of hydrogen and synthetic fuels. She is currently leading a group at the new DLR Institute of Future Fuels that is working on the development and up-scaling of innovative thermochemical processes for fuels production.

Bernd Rech and Robert Schlögl with the assistance of Steffi Hlawenka (HZB), Katarzyna Skorupska (FHI) and Tobias Sontheimer (HZB)

CatLab: Hydrogen and Beyond - Thin-film Catalysts for Sustainable Chemistry with Renewable Electricity

Catalysis – a key enabler for a climate neutral society

The transformation of an economy based on fossil fuels into a climate-neutral economy requires a radical change of existing energy concepts. The expansion of renewable energy sources and smart grid technologies, as well as the development of a global trading and distribution system for renewable energy are urgently needed for a successful transition. A global economy driven by renewable energy will rely on sustainability in production, transport and trade of synthesized chemicals and fuels. These new technologies and processes should be integrated into the existing energy infrastructure to avoid high investment costs.

Green hydrogen and its energy-efficient conversion into base chemicals and synthetic fuels on a global industrial scale is regarded as a building block of sustainable energy systems. Sustainably produced hydrogen-based chemical energy carriers are critical for long-term storage solutions, crucial as enablers for the transformation of the mobility sector, and a core component of the defossilization of industrial processes, especially in energy-intensive industries. However, such a hydrogen economy can only be achieved with innovation leaps in synthesis chemistry for the required conversion processes.

Three main challenges for the realization of H₂-based CO₂-neutral energy systems and the utilization of renewable electricity as a primary energy source on a global scale entail:

- (1) the production of green hydrogen on a global scale;
- (2) long-distance transport and storage of hydrogen using synthetic energy carriers (ammonia, methanol, methane, LOHC);
- (3) energy-efficient conversions into synthetic fuels and base chemicals.

Prof. Dr. Bernd Rech
Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie
Hahn-Meitner Platz 1, 14109 Berlin, Germany
bernd.rech@helmholtz-berlin.de

Prof. Dr. Robert Schlögl
Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft
Faradayweg 4-6, Berlin 14195, Germany
(IRIS Adlershof, Zum Großen Windkanal 2, 12489 Berlin)
Max-Planck-Institut für Chemische Energiekonversion
Stiftstraße 34-36, Mülheim an der Ruhr 45470, Germany
acsek@fhi-berlin.mpg.de

www.catlab.berlin

DOI-Nr.: 10.26125/rabf-vw12

In order to meet these three challenges, chemical conversion processes based on novel tailor-made (thermo-, electro- and photo-) catalysts on an industrial scale are necessary. This not only includes the splitting of water as the only permanently sustainable way to obtain hydrogen, but also comprises processes for (de)hydrogenation. The latter is necessary for storing and transporting hydrogen in large quantities and represents the core process for a closed energy cycle.

Reinventing Catalysis

All dehydrogenation reactions are endothermic and must therefore be catalyzed in order to achieve useful kinetic parameters and keep the additional losses to the stored energy as small as possible. Current technologies in catalysis are not optimally suited for this purpose, since the catalyst's so-called active centers represent the coldest areas of the catalyst. As a result, the reaction deactivates itself, leading to reduced conversion rates and considerable further deactivation effects due to the separation of reaction products - and eventually to the blocking of the active centers. If hydrogen is to be used (or transported) in a particularly versatile way, a small number of platform molecules, such as methanol, ethanol, propanol and butanol, are of particular importance. They can be used advantageously both as intermediates in the chemical industry or as fuels. Unfortunately, their catalytic production beyond biotechnology has not been sufficiently successful to date, either because the yields are very small or because significant amounts of hydrogen are converted to methane, an undesirable reaction for energy storage. Both challenges can be tackled by improving the synthesis of the active phase in novel catalysts. Thin film systems on supports with different functionalities, which can be synthesized individually and selectively, promises a completely new target-oriented approach with unprecedented opportunities. Thanks to advances in thin-film technologies e.g. for the production of high-efficiency thin-film solar cells, we now also have the possibility of producing catalysts at low cost on technologically relevant large areas.

The new research platform *CatLab*, which is currently being established at the Berlin science location Adlershof, is pursuing such a completely new approach for innovative catalysts and will cover large parts of innovation chain. The *Helmholtz-Zentrum Berlin* (HZB) and two Max Planck institutes – the *Fritz Haber Institute* (FHI) and the *Max Planck Institute for Chemical*

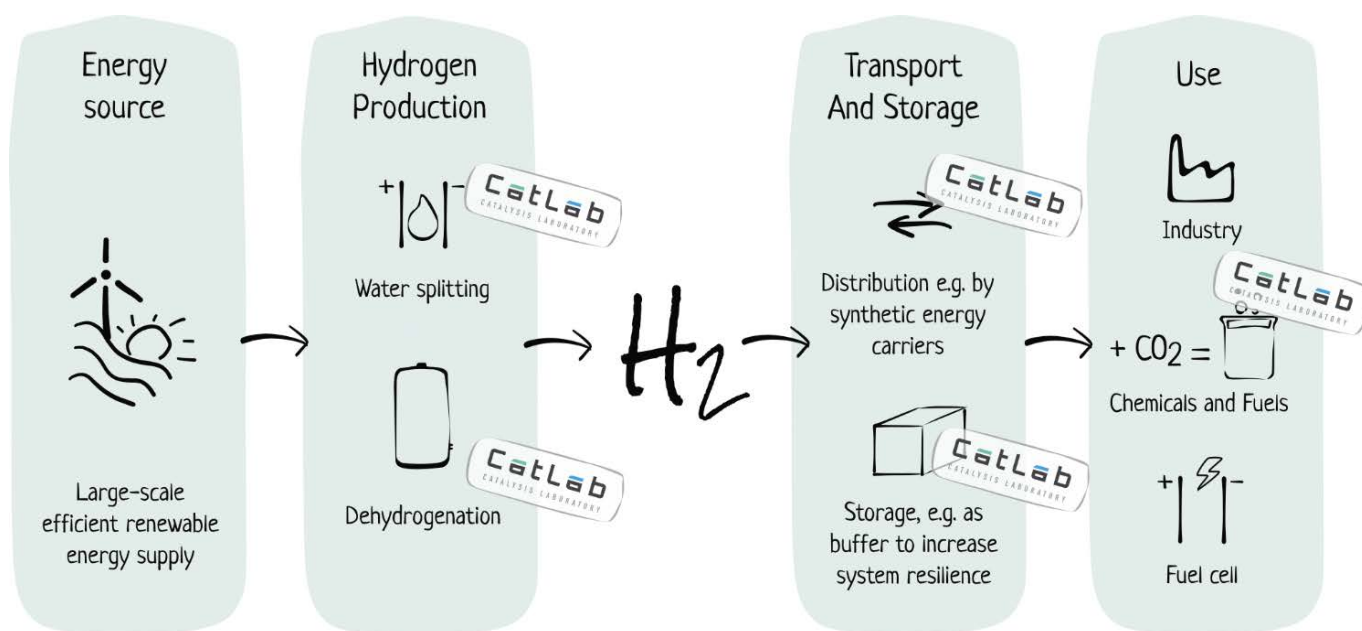


Fig. 1: Simplified illustration of the H₂ value chain and key areas of CatLab

Energy- Conversion (MPI CEC) – are combining their expertise in thin-film and nanotechnology as well as in catalysis to develop catalysts based on tailor-made functional thin films that can be specifically adapted as required for chemical reaction processes and scaled up to pre-industrial level. CatLab aims to reinvent catalysis and will serve as a bridge between fundamental research and industry. Synthesis and advanced analytical methods are coupled with new procedures for automated evaluation through machine learning to accelerate rational material design by means of digital catalysis. At the same time, disruptive concepts and technologies are scaled up for industrial application in collaboration with industrial companies.

The focal points of CatLab are the generation of green hydrogen and its selective conversion into easily transportable chemicals and synthetic fuels, such as various alcohols. Figure 1 depicts the links and high relevance of CatLab in a green hydrogen-based energy system (simplified representation).

With these unique selling points, CatLab also provides the strategic and structural framework for the long-term development of a new R&D area.

Key Ideas

The new knowledge-based approach of CatLab is based on a functional description of a catalyst by a support, a thermal stimulation layer, the active components as a layer and a mesoscopic structuring ("roughness") as building blocks. These are completely independent of the formation of chemical phases in almost any combination and can be assembled with each other in different and customized reaction processes. Subsequent steps in the activation of the active components (redox

reactions; incorporation of light atoms such as atomic hydrogen, carbon, nitrogen, or oxygen) create a high density of catalytically active centers through the optimized adjustment of the structural dynamics of the active layer under catalytic reaction conditions. The introduction of the reaction energy by heating the corresponding layer with electricity from renewable energy and the contact with the reactants under optimized kinetic conditions in terms of pressure and mass transfer finally lead to a catalytic process characterized by:

- (1) minimizing the volume to be stimulated,
- (2) avoiding supercooling of the active centers on the catalyst through low-inertia energy supply and
- (3) the possibility of using very reactive active phases that are very far away from thermodynamic equilibrium.

A Hub For Catalysis Research and Development (R&D)

CatLab is deeply embedded into the vibrant Berlin science ecosystem. Strategic partnerships with universities will contribute to strengthening an internationally renowned research hub. The unique constellation of the core partners HZB and MPG is poised to establish an international R&D network and drive catalysis R&D along the value chain. In particular, the involvement of industrial partners at an early phase of research and development allows CatLab to address industry-relevant processes and tremendously accelerate the innovation cycle. CatLab has a strong strategic partnership with BASF to design and establish chemical reactors and processes. In addition, the BasCat project between BASF, the TU Berlin and the Fritz-Haber-Institute provides direct access to industrial processes in which the functional interfaces of CatLab can be evaluated against current technologies.

Prof. Dr. Bernd Rech

Bernd Rech is Scientific Director of the Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie (HZB) and Professor in the Photovoltaics Department of the Faculty of Electrical Engineering and Computer Science at the Technische Universität Berlin.



photo credit:
HZB/Phil Dera

He was head of the Institute Silicon Photovoltaics at HZB from 2006 to 2017. The focus of his research was on the development of both highly efficient and cost-effective thin-film silicon solar cells and new material combinations for the production of tandem solar cells. From 2008 to 2020, he was spokesman for the Helmholtz Association's Renewable Energies program. Bernd Rech and Robert Schlögl share Bavarian origins and enjoy thinking about and discussing science across disciplinary boundaries. This also gave rise to the joint idea for CatLab.

Bernd Rech also serves on numerous committees, such as the supervisory board of the Institute for Solar Energy Research in Hameln and the board of trustees of the Baden-Württemberg Center for Solar Energy and Hydrogen Research. Since 2017, he has been an elected member of the German Academy of Engineering Sciences (acatech). In 2018, he received the Apple of Inspiration, an award from the President of Slovenia.

Prof. Dr. Robert Schlögl

Robert Schlögl is Director at the Fritz Haber Institute of the Max Planck Society in Berlin as well as Founding Director at the Max Planck Institute for Chemical Energy Conversion in Mülheim a.d. Ruhr.



Robert Schlögl's research focuses primarily on the investigation of heterogeneous catalysts, with the aim to combine scientific with technical applicability as well as on the development of nanochemically-optimized materials for energy storage. The application of knowledge-based heterogeneous catalysis for large-scale chemical energy conversion summarizes his current research focus.

He is Vice-President of the National Academy Leopoldina as well as an Honorary Professor at Technical University Berlin, at Humboldt University Berlin, at University Duisburg-Essen, at Ruhr University Bochum as well as a Distinguished Affiliated Professor at TU Munich and an Honorary Professor of Boreskov Institute of Catalysis. He is member at acatech and BBAW and other numerous international organizations, received numerous national and international awards as well as is partner in numerous European and international joint projects.

He is Author/co-author of more than 1200 publications, more than 550 presentations and invited talks as well as inventor of more than 20 patent families.

Eva Unger, Steve Albrecht and Antonio Abate

HySPRINT: Synergetic Halide Perovskites Material and Device Development for Future Photovoltaics

Halide Perovskites: Boosting photovoltaics for a sustainable future

Transitioning from fossil-fuel-burning to a sustainable energy economy will greatly benefit from efficient, stable, scalable, low-cost, sustainable, and deployable Photovoltaics (PV). There is already reliable PV technology based on Silicon solar cells, already today the most competitive option for electricity generation in many world areas due to a dramatic price reduction. Next-generation PV devices will either significantly outperform or boost existing Silicon PV technology or enable the exploitation of solar energy for a wider variety of installation choices by providing more versatile design options.

Solar cells based on halide perovskites have for the past 10 years created a new wave of excitement in the PV research field. Halide perovskite semiconductors exhibit unique material properties, enabling the development of PV devices with unprecedented versatility. After device performances of around 10% were reached in 2012, a flurry of research activities evolved that helped significant progress in perovskite photovoltaic devices, illustrated in Figure 1a based on data available in The Perovskite Database.[1] Power conversion efficiencies of >25% for single-junction devices and close to 30% for tandem solar cells, i.e. a combination of mature Silicon with new halide perovskites, have been achieved in smaller-area laboratory test devices.

Synergies in an interdisciplinary research environment

While the research community is still exploring and explaining the fundamental properties that make halide perovskites such suitable materials for optoelectronic applications, the overwhelming success in lab-scale devices now also motivates to accelerate the exploration of the technological/industrial potential of halide perovskite-based PV devices. This is the key focus of the HySPRINT Innovation lab, founded at Helmholtz-

Zentrum Berlin in 2017. The HySPRINT Innovation Lab is currently used synergistically by our teams focusing their research, among other things, on high-performance tandem devices (Steve Albrecht), scaling to modules (Eva Unger) and device stability (Antonio Abate). The lab facility provides state-of-the-art equipment to manufacture and test halide perovskite optoelectronic devices from small scale test devices 0.2 cm² [2] to larger area sub module prototypes with areas of at least 15x15 cm². In addition, a variety of basic and advanced analysis tools are available to characterise materials and devices.

The opportunities of the HySPRINT laboratory are reflected in recent achievements of world-record hybrid multi-junction solar cells right now at 29.80% (<https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>).[2] This achievement has been facilitated by the synergy between our teams using HySPRINT as a standard laboratory facility and enabled several break-through results such as: improving perovskite single junction and tandem PV devices in multiple dimensions: efficiency, stability, scalability, and challenges that might prevent the deployability of halide Perovskite based PV devices such as the ecotoxicity of active components.

Tunability enables versatile device designs

One aspect that makes halide perovskite (HaP) semiconductors, with the generic formula ABX₃, so intriguing is their versatile tunability.[3] Compositional engineering can be utilized for bandgap tuning, and findings constitute ions that render the semiconductor more stable. Their facile bandgap tunability is one aspect that makes HaPs the perfect candidate for tandem PV devices, as discussed later. Still, it also makes them a beneficial class of materials for other optoelectronic applications such as LEDs and detectors.

Our HySPRINT team led by Eva Unger has recently demonstrated a potentially game-changing approach to optimizing the precursor ink compositions time- and material-efficiently: Based on combinatorial inkjet printing, her team can rapidly vary and fine-tune the composition of HaP precursor inks and samples like in conventional color inkjet image printing. An image of a combinatorially printed sample in the shape of the HySPRINT logo is shown in the Figure. These generic methodologies open up new avenues for swift material optimisation and tuning for various optoelectronic applications.

Prof. Dr. Eva Unger, Jun. Prof. Dr. Steve Albrecht, Prof. Dr. Antonio Abate
Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie
Albert-Einstein-Straße 16 und Kekuléstraße 5, 12489 Berlin
eva.unger@helmholtz-berlin.de
steve.albrecht@helmholtz-berlin.de
antonio.abate@helmholtz-berlin.de

<https://www.helmholtz-berlin.de/projects/hysprint/>

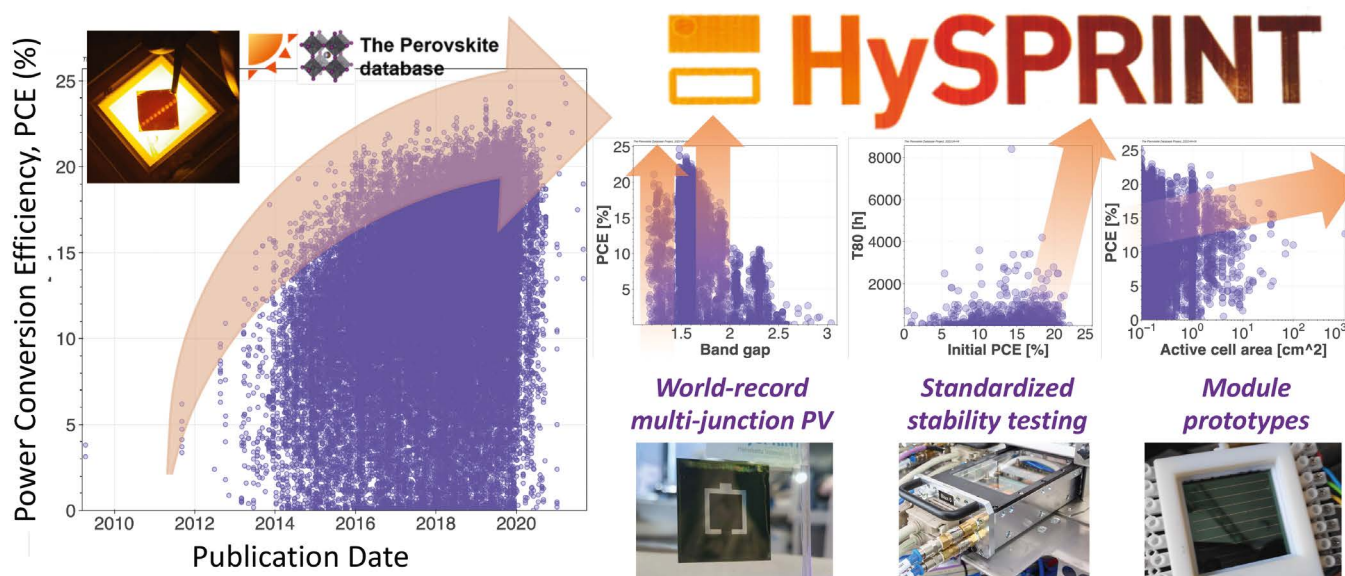


Fig. 1: Illustration of the different research goals to bring perovskite PV technology to higher technology readiness level: efficient multi-junction solar cells, stability, and scalability, represented by the three teams of Steve Albrecht, Antonio Abate, and Eva Unger, respectively, in the HySPRINT Innovation Lab.

One exciting and challenging aspect is fine-tuning the exact chemical composition and process conditions to enable the making of high-quality thin-films for HaPs with multiple compositions. Therefore, the team of Unger also employs a variety of metrological tools during thin-film deposition to capture transformations from solutions to thin-films. Insight into the solidification and crystallization mechanism.[4]

The most explored HaPs are currently based on lead, but promising alternatives are also available. The team of Antonio Abate is investigating tin-based HaPs after they were able to establish with collaborators that tin-perovskites pose a lower environmental risk if accidentally dispersed in the environment. His team identified the dominant degradation mechanism that prevented the exploitation of tin as a valuable alternative to lead. Their in-depth investigation of the precursor ink chemistry enabled the Abate team to formulate guidelines for identifying new precursor ink additives to help the large-scale utilization and industrialization of lead-free solution-processed perovskite solar cells.[5]

Device engineering benefits from a diverse research environment

As illustrated by the evolution of the device performance in the figure on the left side, >42000 individual devices collected in *The Perovskite Database*,[1] various device configurations, selective contact materials and interfacial engineering strategies have been employed. The optimization of the device layer stack of HaP devices is an iterative and time-consuming process, which benefits from a vivid research environment where strategies that significantly improve the performance or stability are quick and directly adapted by the local device optimizers. The user community of > 50 PhD students and postdocs using the HySPRINT Innovation Lab facilities has made HaP PV devices more efficient and stable. Of particular importance in optimizing the device layer stack is the optimization of selective contact

layers. These need to provide a selective contact for just one type of charge carriers, may passivate interfacial defects, and affect the energetic alignment between the selective contacts and the perovskite absorber. The team of Abate has carried out very systematic work showing how dipolar molecules deposited on the surface of HaP thin films can be used to fine-tune the energetic alignment between the HaP absorber and selective contact layers. This fundamental understanding can now be exploited to optimise the interfacial properties of HaPs even further.[6] Another success-story from the HySPRINT lab team led by Steve Albrecht are self-assembled monolayers based on phosphonic-acid functionalized molecules that work as an ultra-thin selective contact layer with minimal parasitic absorption but provide excellent demanding and interfacial quality.[7]

Pre-industrial validation of HaP PV technology

After promising performance results on small-area test devices, the longer-term operational stability of HaP based PV technology is one of the primary focal points. However, the evaluation of device stability is not trivial as solar cells need to operate under conditions with various stressors: light, heat, bias, and potentially also oxygen and humidity. To make stability data produced by the research community more comparable, a consensus defining various testing conditions has been established during the International Summit on Organic PV Stability (ISOS), referred to as the ISOS protocols to which HZB scientists contributed.[8] These protocols aim to unify the stability and failure modes assessment, thereby enabling the investigation of degradation mechanisms as a function of testing conditions. The Abate team runs a multichannel stability testing setup under constant illumination and is providing user access to this facility via the EU-project VIPERLAB (www.viperlab.eu). In addition to indoor testing under standardised conditions, HySPRINT devices are now being encapsulated and tested under outdoor weather conditions in a test station operated by PVcomB at HZB.[9]

Equally important is the translation of record-performance small-area HaP devices to module prototypes with scalable deposition methods, which is the central activity of the team of Unger. The team has made progress in the manufacturing of single-junction thin-film solar cell mini-modules benefitting from expertise in laser-line interconnection schemes developed for other thin film solar cells at PVcomB with an efficiency of 19% on active areas of 2 cm². [10] The next step for the HySPRINT teams is to integrate and combine the capabilities of scaled deposition of HaPs with industrial-scale silicon and CIGS bottom cells to make larger area tandem prototypes.

Technology Transfer to enable the Energy Transition

Low-cost, efficient and reliable (tandem) solar cells could accelerate the energy transition to renewables. One of the most critical factors in facilitating the technological breakthroughs and certified world-record tandem devices at HZB was the existing and long-term established expertise in fabricating state-of-the-art silicon and CIGS PV technology. The HySPRINT Innovation Lab, with many infrastructures mainly dedicated to the fabrication of HaP based solar cells, is an ideal scientific environment to validate HaP technology and enable transfer and adaption by industrial manufacturers. There are already many examples of successful transfer and exploitation of HySPRINT technological breakthroughs. In collaboration with the company Q CELLS Germany in Thalheim, the team of Steve Albrecht has recently demonstrated a HaP/silicon tandem solar cell of 28.7%. The SAM molecules described above have been patented nationally and internationally and licensed to Tokyo Chemical Industries (TCI) and the Swedish company Dyenamo, both now selling these molecules. The HySPRINT Lab has also fostered a first spin-off company, Quantum Yield Berlin - QYB (<https://qyb.berlin/>), commercialising a small-footprint photoluminescence quantum yield measurement system. In addition, there are numerous collaborations with industrial partners making use of the infrastructure and purpose of the HySPRINT Innovation Lab: enabling early stage R&D on lower technology readiness level together with industrial partners.

References

- [1] T. J. Jacobsson, A. Hultqvist, A. García-Fernández, *et al.*, An open-access database and analysis tool for perovskite solar cells based on the FAIR data principles, *Nat Energy*, **7**, 107–115 (2022).
- [2] M. Saliba; J.-P. Correa-Baena, C. Wolff, *et al.*, How to Make over 20% Efficient Perovskite Solar Cells in Regular (n-i-p) and Inverted (p-i-n) Architectures, *Chem. Mater.*, **30**, 4193–4201 (2018)
- [3] A. Al-Ashouri, E. Köhnen, B. Li, *et al.*, Monolithic perovskite/silicon tandem solar cell with > 29% efficiency by enhanced hole extraction, *Science*, **370**, 1300–1309 (2021)
- [4] E. L. Unger, L. Kegelmann, K. Suchan, *et al.*, Roadmap and roadblocks for the band gap tunability of metal halide perovskites, *The Journal of Materials Chemistry A*, **5**, 11401 – 11409 (2017)
- [5] J. Pascual, M. Flatken, R. Félix, *et al.*, Fluoride Chemistry in Tin Halide Perovskites; *Angewandte Chemie International Edition*, **60**, 21583–21591 (2021)
- [6] L. Canil, T. Cramer, B. Fraboni, *et al.*, Tuning halide perovskite energy levels; *En. Environ. Science*, **14**, 1429–1438 (2021)
- [7] A. Al-Ashouri, A. Magomedov, M. Roß, *et al.*, Conformal monolayer contacts with lossless interfaces for perovskite single junction and monolithic tandem solar cells, *En. Environ. Science*, **12**, (11), 3356–3369 (2021)
- [8] M. V. Khenkin, E. A. Katz, A. Abate, *et al.*, Consensus statement for stability assessment and reporting for perovskite PVs based on ISOS procedures; *Nature Energy*, **5**, 35–49 (2020)
- [9] Q. Emery, M. Remec, G. Paramasivam *et al.*, Encapsulation and Outdoor Testing of Perovskite Solar Cells: Comparing Industrially Relevant Process with a Simplified Lab Procedure, *ACS Appl. Mat. Interf.*, **14**, 5159–5167 (2022)
- [10] J. Dagar, M. Fenske, A. Al-Ashouri, *et al.*, Compositional and Interfacial Engineering Yield High-Performance and Stable pin Perovskite Solar Cells and Mini-Modules, *ACS Appl. Mat. Interf.*, **13**, 13022–13033 (2021)

Prof. Dr. Eva Unger



Eva Unger is the head of department “Solution-processing for hybrid materials and devices” at the Helmholtz-Centrum Berlin and Professor at the Humboldt University Berlin “Hybrid Materials: Formation and Scaling”. She has a background in hybrid opto-electronic devices and currently focusses on utilizing scalable solution-based deposition methods for the manufacturing of opto-electronic device prototypes. After graduating with a Diploma in Chemistry from the University of Marburg in 2007, Eva Unger carried out her Ph.D. research work under the supervision of Anders Hagfeldt and Gerrit Boschloo at Uppsala University, Sweden, graduating in 2012. Funded by a fellowship from the Swedish Marcus and Amalia Wallenberg Foundation, she carried out postdoctoral research at Stanford University, supervised by Prof. Michael McGehee, from 2012–2014 where she started working on HaP solar cells as an early adaptor. To Helmholtz Zentrum Berlin Eva Unger first came as a visiting scientist from Lund University, Sweden in 2016. She started a BMBF-funded Young Investigator Group in 2017 and has recently been appointed Professor at the Humboldt University Berlin funded through the Helmholtz program for first-time appointments of excellent female scientists.

Jun. Prof. Dr. Steve Albrecht

Steve Albrecht is a group leader for perovskite based multi-junction photovoltaics at Helmholtz Zentrum Berlin (HZB) and Juniorprofessor at Technical University (TU) of Berlin. He received a PhD in physics from the University of Potsdam for his work on understanding the conversion of photon to collected charges organic solar cells. For his PhD he was awarded with the Carl-Ramsauer-Prize of the Physikalische Gesellschaft zu Berlin and the Young Researcher Prize of the Leibniz-Kolleg Potsdam. After PhD he started as Postdoc at HZB and established a young investigator research group in 2016 and the Perovskite Lab at Helmholtz HySPRINT Innovation Lab in 2017. Since 2018 he is affiliated as Juniorprofessor at Faculty IV Electrical Engineering and Computer Science of TU Berlin. In 2019, he was awarded with the Karl-Scheel-Preis of the Physikalische Gesellschaft zu Berlin and the Berliner Wissenschaftspreis in the category young scientists for his work on perovskite-based tandem solar cells. His group has achieved several independently certified world record solar cell efficiency values for perovskite based tandem solar cells. The most recent record enabled by his team for perovskite/silicon tandem solar cells is set to 29.8%.

Prof. Dr. Antonio Abate

Antonio Abate is the head of the “Novel Materials and interfaces for photovoltaic solar cells” department at the Helmholtz-Centrum Berlin and Professor at the University of Bielefeld in Germany. He is researching solar energy conversion with halide perovskites. Before his current position, Antonio led solar cell research at the University of Fribourg in Switzerland as a team leader. He was a Marie Skłodowska-Curie Fellow at École Polytechnique Fédérale de Lausanne within the group of Prof. Grätzel. He worked for four years as a postdoctoral researcher at the University of Oxford under the supervision of Prof. Snaith and the University of Cambridge under the supervision of Prof. Steiner. Antonio graduated summa cum laude from the University of Naples Federico II in 2006. He got his PhD summa cum laude at Politecnico di Milano in 2011 under the supervision of Prof. Resnati and Prof. Metrangolo. Clarivate Analytics reported Antonio as a Highly Cited Researcher in 2018, 2019, 2020 and 2021. The World University Rankings listed Antonio within the top 10 most influential scientists in the field of perovskite solar cells. As an independent researcher, he collected more than 4 M€ in competitive personal research funding, including a 1.5 M€ ERC starting grant – FREENERGY.



Deutsche Bunsen-Gesellschaft
für physikalische Chemie

yPC Meets Fraunhofer Institutes online



11.05.2022, 16 Uhr

Fraunhofer-Institut für Solare Energiesysteme

Dr. Monika Bosilj
Head of Group, Sustainable Catalytic Materials

Dr.-Ing. Anne Kovach-Hebling
Communications

Fraunhofer-Institut für Physikalische Messtechnik

Dr. Markus Winkler
Project Manager, Thermal Energy Converters

Dr. Olena Yurchenko
Project Manager, Gas and Process Technology

Holger Kock
Head of Communications and Media

Anmeldung auf www.bunsen.de/yPC-events

Yuping Wu und Rudolf Holze

Batterie oder Superkondensator oder Beides?

Die Verschmelzung zweier elektrochemischer Speicheroptionen

Zusammenfassung

In Kondensatoren wird elektrische Energie durch räumliche Ladungstrennung gespeichert, in wiederaufladbaren Batterien dagegen durch elektrochemische Redoxreaktionen. Dieser fundamentale Unterschied hat die beiden Speicherprinzipien lange Zeit getrennt gehalten. Mit dem rasanten Fortschritt der Superkondensatoren, in denen neben der Ladungstrennung auch vor allem oberflächennahe Redoxreaktionen einen großen Beitrag zur Speicherung leisten, sind zunehmend zunächst aktive Materialien, nun auch darüber hinaus Architekturen und Arbeitsprinzipien zwischen den beiden Speichersystemen im Austausch. Der folgende Beitrag beleuchtet diesen Austausch auf allen Ebenen beginnend mit den wirksamen Phänomenen und ablaufenden Prozessen bis hin zu Bauformen und Anwendungen. Neben Unterschieden werden vor allem Gemeinsamkeiten als Ansatzpunkte gegenseitiger Anregung hervorgehoben.

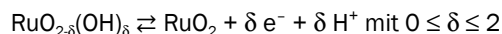
Prozesse

Die im klassischen Kondensator zur Energiespeicherung genutzte Ladungstrennung in zwei elektrisch leitenden, durch einen Isolator getrennte Elektroden findet im Superkondensator in den elektrochemischen Doppelschichten (EDLC electrochemical double layer capacitor) der beiden hochporösen Kohlenstoffelektroden statt. Die Maximalspannung am Kondensator ist durch Zersetzung der Elektrolytlösung begrenzt (für wässrige Lösungen ca. 1,2 V, für nichtwässrige Lösungen 3 V und mehr). Da die große elektrochemisch aktive Oberfläche der porösen Elektroden zu ganz beträchtlichen Doppelschichtkapazitäten führt, die auch in der vorliegenden Serienschaltung der beiden Doppelschichten in hoher Kapazität des Kondensators resultiert, ergibt sich auch bei den relativ kleinen Spannungen ein erhebliches Energiespeichervermögen. Der typische Zusammenhang zwischen sich ändernder Spannung und fließendem Strom (und umgekehrt) wird als kapazitives Verhalten bezeichnet [1], s. Bild 1. Die kondensator-typisch sehr hohe Strombelastbarkeit ist praktisch nur durch den Ohmschen Innenwiderstand des Kondensators begrenzt.

Ganz anders wird in einer Batterieelektrode Ladungsspeicherung mit elektrochemischen Redoxvorgängen ggfs. verknüpft mit

weiteren Prozessschritten (Auflösung, Abscheidung, Ausfällung etc.) bewirkt. Dies kann lokalisiert an Metallatomen und -ionen z.B. in einer Nickel- oder Bleielektrode stattfinden; es kann auch weniger lokalisiert in konjugierten organischen Molekülen, Oligo- oder Polymeren erfolgen [2]. Viele dieser Schritte sind vergleichsweise langsam und begrenzen den erzielbaren Strom. Es zeigt sich ein ganz anderer Zusammenhang zwischen Elektrodenpotential/Zellspannung und Strom (Peaks im zyklischen Voltammogramm, weitgehend konstante Lade-/Entladespannung) als beim Kondensator. Beide Speicherprinzipien und das typische elektrische Verhalten zeigt Bild 1.

Zahlreiche Elektrodenreaktionen oberflächengebundener Teilchen zeigen Strom-Spannungszusammenhänge wie ein Kondensator oder eine Kondensatorelektrode:



Dieses Verhalten wird als *pseudokapazitiv* bezeichnet [1]. Es erlaubt bezogen auf die Elektrodenoberfläche eine im Vergleich zur Doppelschichtspeicherung vervielfachte Ladungsspeicherung. Damit sind Kondensatoren herstellbar, die im Vergleich zu EDLC-Systemen weitaus größeres Energiespeichervermögen zeigen mit nur wenig geminderter Strombelastbarkeit. Metalloxide, -hydroxide und viele Chalcogenide, die als Materialien (z.B. MnO_2) bereits aus Batterien bekannt sind, zeigen dieses in Superkondensatoren nutzbare Verhalten – ein erster Aspekt der Verschmelzung.

Materialien

Für Superkondensatoren der EDLC-Bauart sind elektronisch gut leitende, hochporöse Materialien mit einer großen von der Elektrolytlösung und für die bei der Speicherung ablaufenden Ionenbewegungen erreichbaren Oberfläche erforderlich. Dies sind vor allem Aktivkohlen und Formen des Kohlenstoffs wie Graphen. Für Batterieelektroden müssen diese Materialien zudem die genannten Redoxreaktionen und verknüpfte Prozesse ermöglichen. Zur Erhöhung der elektronischen Leitfähigkeit werden den oft schlecht leitenden Verbindungen (z.B. MnO_2 ist je nach Modifikation ein „wide bandgap“-Halbleiter) Leitfähigkeitszusätze wie Graphit oder Ruß zugefügt. Die an ihnen ausgebildete Doppelschichtkapazität ist allerdings relativ unbedeutend. Viele Batterieelektrodenmaterialien (Nickel-, Kobaltoxide, MnO_2) zeigen pseudokapazitives Verhalten, dies legt die Prüfung von Anwendungsmöglichkeiten in der jeweils anderen Speicherform nahe, für die genannten Oxide und viele weitere Chalcogenide ist dies aktueller Forschungsgegenstand. Entsprechende Überlegungen gelten ebenfalls für elektrochemisch aktive organische Materialien [3–7].

Prof. Dr. Yuping Wu
School of Energy and Environment, Southeast University,
Nanjing, 211189, China

Prof. Dr. Rudolf Holze
Chemnitz University of Technology, Institut für Chemie, 09107 Chemnitz
rudolf.holze@chemie.tu-chemnitz.de

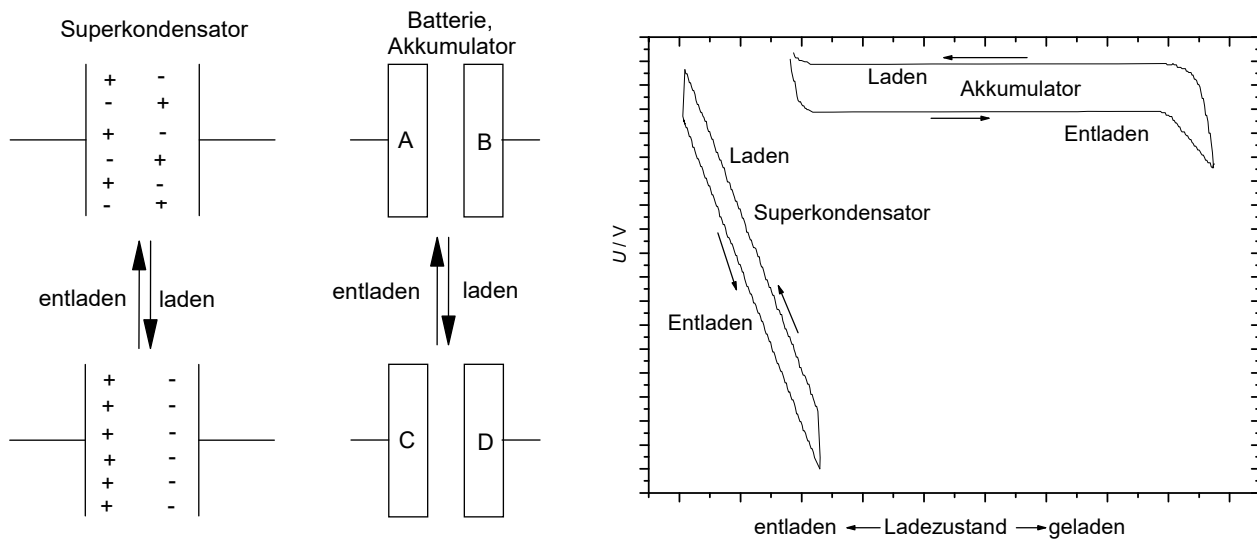


Bild 1: Prinzipien von Kondensator und Batterie (links), typische Lade-/Entladekurven (rechts).

Beim Materialeinsatz kann schließlich entschieden werden, ob die kapazitiv/pseudokapazitive Nutzung im Vordergrund steht – dies wird zu dünnen aktiven Schichten führen, da das Volumen zur schnellen Speicherung wegen meist langsamer Transportvorgänge kaum beiträgt – oder das Redoxspeichervermögen im Volumen einer Batterieelektrode. Die fließenden Übergänge ergänzt um weitere Aspekte zeigt Bild 2.

sind verwendete Separatoren wie Elektrolytlösungen für beide Speichersysteme weitgehend gleich. Bei der Ausbildung der Elektroden werden die in Bild 2 skizzierten Übergänge Realität: Für eine Zelle mit hoher Energiedichte muss möglichst viel aktive Masse eingebracht werden, dies führt von Bild 3a zu 3b. Längere Transportwege im Feststoff der aktiven Masse bremsen Stoff- und Ladungstransport,

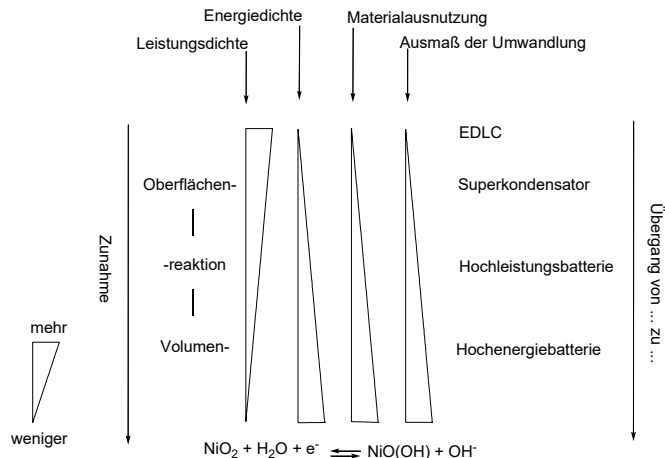


Bild 2: Übergänge zwischen Batterie- und Superkondensatorelektrodenmaterialien

Der Übergang von einer Hochleistungsbatterie zu einem EDLC ist unter verschiedenen Gesichtspunkten kontinuierlich. Neben den bereits betrachteten Aspekten kommt der Ausbildung der Komponenten, insbesondere der Elektroden, weitere Bedeutung zu.

Komponenten

Batterie wie Superkondensator enthalten als zentrale Komponenten zwei Elektroden und einen Separator, in Zellen mit flüssiger Elektrolytlösung wird alles von dieser Lösung getränkt. Bei Festelektrolyten entfällt der Separator. Der in Foliendicke ausgebildete Elektrolyt trennt gleichzeitig die beiden Elektroden und verhindert Kurzschlüsse. Zudem eröffnet er eine Möglichkeit, aus Metall bestehende negative Elektrode dendritenfrei abzuscheiden. Wenig überraschend

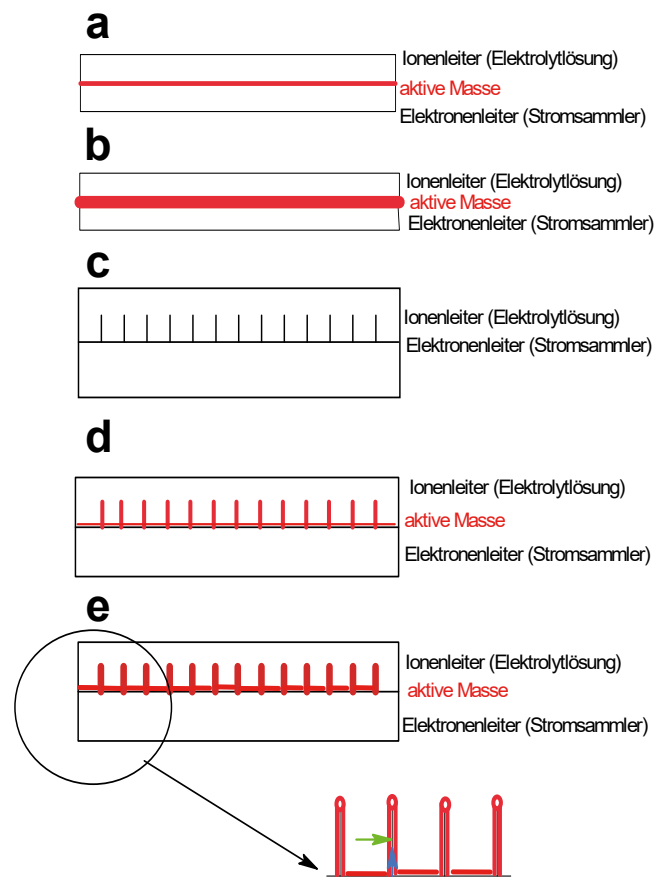


Bild 3: Elektrodenarchitekturen. (kleines Bild unten: Schwarz Stromableiter, rot aktive Masse mit Ionen- (→) und Elektronenflusswegen (→))

es wird also kein hoher Strom möglich sein. Da zudem die elektrochemisch aktive Oberfläche begrenzt ist, kommt es zu relativ hohen Stromdichten und damit Überpotentialen. Für die Zellspannung bedeutet dies kleinere Entlade- und höhere Ladespannung, beides unerwünscht. Von einer kompakten aktiven Masse geht man zur porösen Masse über. Wie im Bleiakku illustriert bedarf es eines mechanischen Gerüsts, das zugleich als Stromsammler dient und die Ausbildung einer größeren elektrochemisch aktiven Oberfläche unterstützt. Dies ist in Bild 3c angedeutet. Auch hier kann für ein höheres Speichervermögen die Belegung mit aktiver Masse vergrößert werden, man kommt von Bild 3d zu 3e.

Auf Komponentenebene betrifft der fließende Übergang von der Batterie zum Superkondensator vor allem Elektrodenarchitektur oder -morphologie. Ob dies in einem „bottom up“-Ansatz durch gesteuerte Materialabscheidung (wie bei der Herstellung dünner MnO_2 -Schichten durch chemische oder elektrochemische Abscheidung) oder einem „top down“-Ansatz durch Vermahlen, Ätzen oder andere mechanische Methoden der Strukturierung geschieht hängt von Material und verfügbaren Möglichkeiten ab – auch hier ist die Grenze zwischen den beiden Speicheroptionen verschwunden.

Systeme

Die Kombination einer Batterie- und einer Superkondensatorelektrode stellt eine weitere Variante der vorgestellten Verschmelzung der beiden Speicherprinzipien dar. In einem Beispiel wird die als Schwachstelle bekannte negative poröse Bleielektrode der Blei-Säurebatterie durch eine Aktivkohleelektrode auf Graphitpapierträger ersetzt [4]. Diese EDLC-Elektrode ist bei der Verwendung in Wandler- und Speichersystemen mit Solarzellen als Quelle den raschen Schwankungen des Energieangebots gewachsen, die poröse positive Bleidioxidelektrode lässt ebenfalls hohe Lade- und Entladeströme zu. In einer weiteren, ebenfalls am Markt etablierten Technologie wird eine Lithiuminterkalierende negative Graphitelektrode (als Batterieelektrode) mit einer positiven EDLC-Aktivkohleelektrode und einer nichtwässrigen Elektrolytlösung kombiniert. Das Produkt wird als Lithiumionenkondensator bezeichnet, das erste Beispiel als hybrider Ultrakondensator. Dies mag die noch bestehende Begriffsverwirrung illustrieren. Abhilfe durch Kreation weiterer Wortungetüme dürfte von zweifelhaftem Wert sein.

Die noch immer unbefriedigende Energiedichte von Superkondensatoren und die begrenzte Leistungsdichte von Batterien sind Gegenstand intensiver Forschungs- und Entwicklungsarbeiten, die auf einen stetig wachsenden Markt und immer mehr Anwendungen zielen. Mit erzielten Fortschritten wird die bestehende Lücke geschlossen und die Verschmelzung vollendet.

Literatur

- [1] D.P. Dubal, Y. Wu, R. Holze, *Bunsen-Magazin* **17** (2015) 216
- [2] R. Holze, *Molecules* **27** (2022) 546.
- [3] V.V. Kondratiev, R. Holze, *Chem. Pap.* **75** (2021) 4981
- [4] T. Huang, M. Long, J. Xiao, H. Liu, G. Wang, *Energy Mater.* **1** (2021) 100009
- [5] Y. Lu, Q. Zhang, L. Li, Z. Niu, J. Chen, *Chem* **4** (2018) 2786
- [6] R. Holze, *Polymers* **12** (2020) 1835
- [7] S. Muench, A. Wild, C. Friebe, B. Häupler, T. Janoschka, U.S. Schubert, *Chem. Rev.* **116** (2016) 9438
- [8] A. Banerjee, S.K. Ramasesha, A.K. Shukla, *Electrochem. Energy Technol.* **1** (2015) 10

Prof. Dr. Rudolf Holze



Nach der Promotion an der Universität Bonn 1983 bei Wolf Vielstich zu Impedanzmessungen an porösen Elektroden ging Rudolf Holze als PostDoc zu Prof. E.B. Yeager am Case Center for Electrochemical Sciences, Case Western Reserve University, Cleveland, USA. 1987 wechselte er zur Universität Oldenburg. Nach der Habilitation 1989 folgte er einem Ruf an die Technische Universität Chemnitz. Dort leitet er seit 1993 die AG Elektrochemie und vertritt das Fach Physikalische Chemie. Seine Arbeitsgebiete sind Spektroelektrochemie, intrinsisch leitfähige Polymere, Korrosion und elektrochemische Energieumwandlung und -speicherung. Seit 2011 ist er ordentliches Mitglied der Sächsischen Akademie der Wissenschaften zu Leipzig, seit 2018 ist er Professor an der Staatlichen Universität St. Petersburg, seit 2019 Professor an der Nanjing Tech Universität. Er ist Gründungsherausgeber der Zeitschrift *Electrochemical Energy Technology*.

Prof. Dr. Yuping Wu



Dr. Yuping Wu ist seit 2022 Professor an der School of Energy and Environment, Southeast University, Nanjing, China. Er promovierte 1997 am Institut für Chemie der Chinesischen Akademie der Wissenschaften. Seit 1994 hat er über 260 Arbeiten mit einem H-Index von 64 und 6 Monografien veröffentlicht. 2015 wurde er von Thomson Reuters zu den weltweit am häufigsten zitierten Forschern und zu den World's Most Influential Minds (2015) gewählt. Er wurde 2014 mit dem National Distinguished Youth Scientists, 2016 mit dem Innovative Talent und 2018 mit dem Albert Nelson Marquis Lifetime Achievement Award ausgezeichnet. Sein Forschungsschwerpunkt liegt auf Energiespeicher- und -umwandlungssystemen. Er gründete das erste Unternehmen, das die dritte Generation von Gel-Separatoren für Lithiumbatterien in Serie herstellt.

Marie Claußen und Saskia Bültena

Blue Energy

Einleitung

Klimawandel und CO₂-Ausstoß sind zwei eng miteinander verknüpfte aktuelle Themen. Auch wenn das Jahr 2020 durch die Corona-Pandemie einen positiven Effekt auf den weltweiten CO₂-Ausstoß gezeigt hat, ist die Temperatur vergleichsweise zur Durchschnittstemperatur des vorindustriellen Zeitalters bisweilen um 1,2 °C angestiegen. [1] Der CO₂-Ausstoß muss gesenkt werden, um die erklärten Ziele des Pariser Klimaschutzabkommens zu erreichen. Diese sehen unter anderem eine Limitierung der Erderwärmung auf 1,5 °C vergleichsweise zum vorindustriellen Zeitalter vor. Diese gesetzte Grenze kann die Auswirkungen auf den Klimawandel, die Risiken und Konsequenzen deutlich reduzieren. [2] Dabei wird vermehrt auf eine umweltfreundliche Energiegewinnung gesetzt. So hat sich die Bundesregierung von Deutschland darauf geeinigt, den Anteil an erneuerbaren Energien am Gesamtstrom etappenweise bis 2050 auf 80% zu erhöhen und somit die Energieproduktion durch fossile Brennstoffe abzubauen. [3] Neben dem Rückgang der Energiegewinnung aus fossilen Brennstoffen wurde ebenfalls der Ausstieg aus der Atomenergie im Jahr 2011 beschlossen. [4] Um diese Lücken zu schließen, wird vermehrt auf umweltfreundliche Alternativen gesetzt. [3] Im Jahr 2014 lag dabei der Anteil bei der Stromerzeugung durch erneuerbare Energien gerade einmal bei 25,8%. Der Großteil des Stroms wurde durch fossile Brennstoffe und Kernenergie erzeugt. Davon wurden 18,0% durch Steinkohle, 25,5% durch Braunkohle und 9,6% aus Erdgas produziert. 15,9% wurden durch Kernenergie und 5,1% aus Heizöl, Pumpspeicher und sonstige Kraftwerkstypen zur Verfügung gestellt. Hieran kann gezeigt werden, dass es unentbehrlich sein wird, an weiteren Formen der erneuerbaren Energieerzeugung zu arbeiten und zu forschen. Eine neue mögliche Art und Weise elektrische Energie aus umweltfreundlichen Quellen zu erzeugen, bilden Salzgradientenkraftwerke, welche unter dem Begriff der „Blue Energy“ [5] emissionsarm elektrische Energie produzieren.

Energiegewinnung beim Mischvorgang

Die Vermischung von salzreichem Wasser mit Wasser geringerer Salzkonzentration ist ein exergonischer Vorgang. [6] Das bedeutet, der Vorgang findet freiwillig statt und es wird

dabei Energie frei. Die freiwerdende Energiemenge ist dabei abhängig von den Salzkonzentrationen der Lösungen. Bei einem Konzentrationsverhältnis von etwa 1,5 kann ein Maximum in der freiwerdenden Energiemenge beim Vermischen der verschiedenen konzentrierten Lösungen beobachtet werden. Bei diesem Mischungsverhältnis wird etwa eine Energiemenge von 1,9 MJ bei einem Gesamtvolumen von 2 m³ frei. Wird dagegen der Mischvorgang von Meerwasser mit Flusswasser betrachtet, weicht die freiwerdende Energiemenge, die beim Mischen erhalten werden kann, von diesem Maximum ab. Das Meereswasser hat eine Salzkonzentration von etwa 0,6 M, das Flusswasser etwa von 0,01 M. Bei dem Mischvorgang von je 1 m³ Meerwasser und Flusswasser wird bei einer Temperatur von 20 °C etwa eine Energiemenge von 1,8 MJ frei.

Osmosekraftwerke

Osmosekraftwerke machen sich die besonderen Eigenschaften der Osmose zu Nutze und werden auch als Salzgradientenkraftwerke bezeichnet. [3] Ein salzhaltiges Wasserreservoir und ein Süßwasserreservoir stehen durch eine halbdurchlässige Membran miteinander in Kontakt. Durch den Vorgang der Osmose erfolgt ein Konzentrationsausgleich in den beiden räumlich voneinander getrennten Wasserreservoirs. Die semipermeable Membran kann dabei Wassermolekülen den Durchtritt durch diese Membran in die andere Kammer ermöglichen, Salz-Ionen werden jedoch zurückgehalten. Da auf beiden Seiten der Membran die Salzkonzentrationen unterschiedlich hoch sind, gelangen die Wassermoleküle schließlich durch osmotische Prozesse von der Kammer mit der geringer konzentrierten Lösung in die Kammer mit der hochkonzentrierten Salzlösung, wodurch sich der Druck in dieser Kammer unter gleichzeitiger Verdünnung der Lösung erhöht. Dieser erhöhte Druck kann über eine Turbine in elektrische Energie umgewandelt werden.

Druckreduzierte Osmosekraftwerke (PRO)

Bei einer druckreduzierten Osmoseanlage (pressure-retarded osmotic power plant, PRO-Anlage) liegen zunächst zwei getrennte Wasserreservoirs vor, ein Süßwasserreservoir und ein Salzwasserreservoir. [7] Diese Wasserreservoirs sind mit einer Kammer verbunden. In dieser Kammer liegen Süß- und Salzwasser durch eine semipermeable Membran räumlich voneinander getrennt vor. Auf der Seite, welche eine erhöhte Salzkonzentration aufweist, liegt durch osmotische Prozesse ein erhöhter Druck vor. Mit dieser Kammer ist eine Turbine verbunden, welche den elektrischen Strom erzeugt.

Saskia Bültena, Marie Claußen
Carl von Ossietzky Universität Oldenburg
Institut für Chemie
Carl von Ossietzky Str. 9-11, 26129 Oldenburg
Saskia.Bueltena@uni-oldenburg.de
Marie.Claussen@uni-oldenburg.de
DOI-Nr.: 10.26125/ngdb-d130

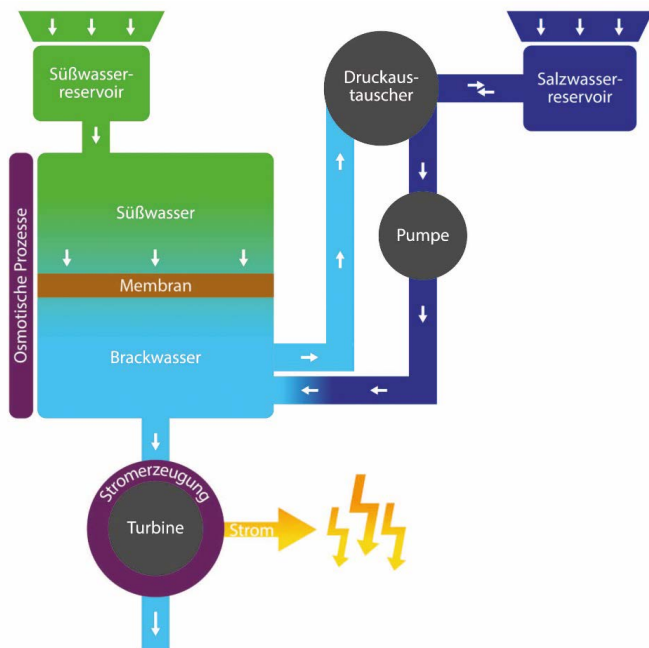


Abb. 1: Schematischer Aufbau einer PRO.

Abbildung 1 zeigt schematisch den Wasserverlauf in einer PRO-Anlage. Die Turbine wird durch den Fluss des Brackwassers auf Grund des erhöhten Drucks betrieben. Bei diesem Vorgang wird der Brackwasserkammer Volumen entzogen. Dieser Volumenverlust muss durch eine Frischwasserquelle ausgeglichen werden. Diese Frischwasserquelle weist eine andere, geringere Salzkonzentration im Vergleich zur Brackwasserkammer auf, was zu einer Verdünnung führen würde. Es ist jedoch unentbehrlich, dass bei einer PRO-Anlage die Salzkonzentration in der Brackwasserkammer konstant gehalten wird und am besten die Salzkonzentration erreicht wird, welche im Salzwasserreservoir vorliegt. Andernfalls würde durch eine Erniedrigung der Salzkonzentration in dieser Kammer die maximal erreichbare Stromausbeute verringert werden. Um das zu erreichen, wird ein Druckaustauscher verwendet. Dieser ermöglicht es, Wassermengen, die verschiedene Drücke besitzen, miteinander auszutauschen. Dazu wird ein Teil des Brackwassers durch eine ungefähr gleich große Menge an Salzwasser ausgewechselt und das ausgetauschte Volumen gegen die Arbeitsrichtung in die Brackwasserkammer gepumpt.

Ein erster Prototyp einer solchen Anlage wurde 2009 in Norwegen von der Firma Statkraft in Betrieb genommen. [7] Das Salzwasserreservoir wird dabei durch eine Verbindung zum Oslofjord hergestellt. [8] Die Süßwasserquelle bildet eine Verbindung zu einem angrenzenden Fluss. Aufgrund der Druck-erhöhung durch die osmotischen Prozesse auf Seiten der Salzwasserkammer, kann eine Turbine zur Stromerzeugung angetrieben werden.

Im Vergleich zu anderen erneuerbaren Energiequellen liegt ein großer Vorteil dieses Kraftwerktyps insbesondere in der unabhängigen Arbeitsweise. [9] Im Gegensatz zu vielen erneuerbaren Energiequellen können Osmosekraftwerke theoretisch unabhängig von Tageszeit und Wetterbedingungen akkurat Strom liefern. Die Arbeitsweisen dieser Anlagen sind zudem

chemikalien- und geräuscharm. [10] Des Weiteren werden während des Betriebs keine Treibhausgase produziert. Ein weiterer großer Vorteil ist die Lage vieler großer Städte, die häufig an Flussmündungen zum Meer liegen. [9] Dadurch kann der Strom in der Nähe der Verbraucher erzeugt werden.

Schätzungsweise kann dieser Anlagentyp weltweit 1.600 – 1.700 Terawattstunden pro Jahr liefern, wenn alle geeigneten Flüsse bei dieser Kalkulation berücksichtigt werden. [8] Mit 1.600 Terawattstunden lässt sich in etwa die Hälfte des Stromverbrauches in der EU kompensieren. [9]

Jedoch muss auf Grund der empfindlichen Membranen ein erheblicher und energieintensiver Mehraufwand zur Vorbehandlung des verwendeten Wassers betrieben werden. [8] Das Wasser muss frei von Schmutzpartikeln sein, da diese die verwendeten Membranen beschädigen können. Bei den verwendeten Membranen im Rahmen des Projektes von Statkraft handelt es sich um speziell vom Institut für Polymerforschung im GKSS-Forschungszentrum mit Sitz in Geesthacht entwickelte Kunststoffmembranen, welche eine Dicke von 0,1 µm aufweisen. Je dünner eine Membran hergestellt werden kann, desto größer ist der Wasserdurchfluss. Mit Hilfe dieser speziellen, sehr dünnen Membranen kann eine Leistung von bis zu 3 W/m² erhalten werden.

Dennoch scheiterte dieses erste Projekt 2013 unter anderem an der gewünschten Konkurrenzfähigkeit in einer voraussehbaren Zeit. [9] Die verwendeten Membranen waren derzeit zu kostenintensiv und ineffizient, so dass dieses Kraftwerk mit anderen Stromerzeugern nicht mithalten konnte und letztendlich vom Netz genommen wurde.

Die Forschung lässt sich davon aber nicht entmutigen und erforscht dennoch weiterhin neue Materialien und Techniken im Rahmen der Membranentwicklungen. [8] Ein Beispiel hierfür ist die Dünnschicht-Kompositmembran (thin-film composite membrane, TFC-Membran). Dabei werden auf ein Polyesteruntergrundmaterial poröse Schichten aus verschiedenen Kunststoffen aufgetragen, welche schließlich von einem Polyamid bedeckt werden, um undurchdringlich für Salze zu werden.

Umgekehrte Elektrodialyse (RED)

Eine weitere Methode aus der Gradienten-Energie Strom zu erzeugen, ist die umgekehrte Elektrodialyse. In Abbildung 2 wird eine schematische Darstellung des Verfahrens aufgezeigt.

Meerwasser und Flusswasser werden in verschiedene Zwischenräume der Zelle geleitet, die durch zwei verschiedene Membranen voneinander getrennt sind. [6] Als Membranen werden Kationenaustauschermembranen (CEM) und Anionenaustauschermembranen (AEM) verwendet, die jeweils nur für Kationen (Na⁺) oder Anionen (Cl⁻) durchlässig sind. Die Ionen streben einen Konzentrationsausgleich durch Osmose an. Dabei bewegen sich die Na-Kationen durch die CEM in Richtung zur negativ geladenen Kathode und die Cl-Anionen durch die AEM in die entgegengesetzte Richtung zur positiv geladenen Anode. An den Enden der Membranstapel befinden sich Elek-

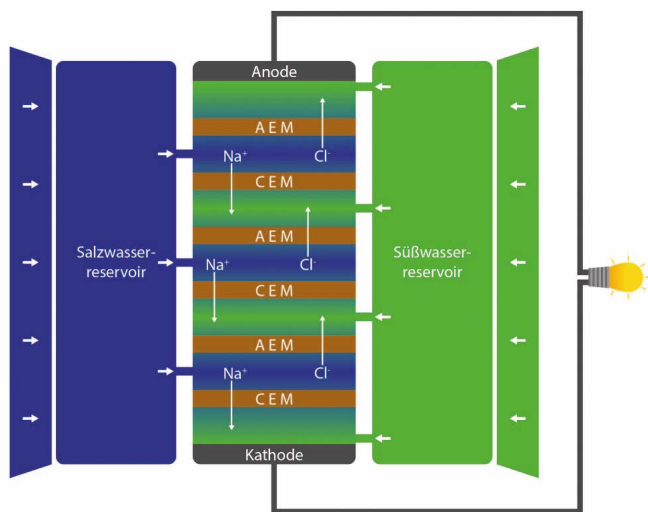


Abb. 2: Schematische Darstellung der Funktionsweise der umgekehrten Elektrodialyse.

troden, die den Ionenfluss durch Redoxreaktionen in elektrische Energie umwandeln.

2014 wurde ein niederländisches Kraftwerk am Abschlussdeich gebaut, das nach dem Prinzip der umgekehrten Elektrodialyse (reverse electrodialysis power plant, RED-Kraftwerk) arbeitet. [11] Der Abschlussdeich trennt die salzhaltige Nordsee von dem salzarmen Binnengewässer IJsselmeer. Das Kraftwerk nutzt den Konzentrationsunterschied an Salz in den Gewässern und erzeugt pro 1 m^3 Meerwasser und 1 m^3 Binnenmeerwasser Energie von etwa 1 MW. In einer Stunde produziert das Kraftwerk etwa 50 kW Energie. Diese Energieform könnte am Abschlussdeich etwa 50.000 Haushalte in der Zukunft mit Strom versorgen.

Neben dem Pilot-Projekt in den Niederlanden gibt es noch weitere Projekte, z.B. in Italien. [12] Dort werden Versuche durchgeführt, um aus Sole und Meerwasser Strom zu erzeugen.

„Accumulator Mixing“

Eine dritte Methode, um aus dem Salzgradienten Strom zu generieren, ist das „Accumulator Mixing“. [13] Dieses Verfahren findet in einer elektrochemischen Zelle statt. Die Zelle besteht aus zwei Elektroden, die in eine Lösung eintauchen. Durch abwechselndes Einfüllen von Meerwasser und Süßwasser werden die Elektroden durch den Ionenfluss der im hochkonzentrierten Meerwasser befindlichen Ionen geladen und entladen, da sich die Ionen aus dem hochkonzentrierten Meerwasser zunächst zu den Elektroden bewegen. Beim Einleiten des niedrig konzentrierten Süßwassers gehen diese Ionen wieder in Lösung. Durch diese Ionenbewegung entsteht ein Strom.

Membrantechnik

Um den größtmöglichen Energiegewinn mit den verwendeten Membranen zu erhalten, haben die Vorbehandlungsschritte des verwendeten Wassers eine enorme Bedeutung. [6]

Eventuell vorhandene Verunreinigungen können eine verminderte Energieausbeute und eine verkürzte Lebensdauer der verwendeten Membranen nach sich ziehen. Um dem entgegenzuwirken, wird das Wasser mit Hilfe vieler Filtrationschritte von Verschmutzungen befreit.

In Salzgradientenkraftwerken, besonders bei PRO-Kraftwerken, werden meist ähnliche Membranen verwendet, wie in Wasserentsalzungsanlagen. [6] Hierbei handelt es sich um Membranen, die im Grundgerüst eine asymmetrische Struktur mit zwei verschiedenen Schichten aufweisen. Asymmetrisch bedeutet in diesem Fall, dass der Durchmesser der Porengröße über die gesamte Dicke der Membran variieren kann. [14] Eine aktive dünne Schicht, dessen Dicke unter $1 \mu\text{m}$ liegt, verhindert das Durchtreten von Salzionen, während gleichzeitig der Wasserdurchfluss gewährleistet wird. [6] Diese wird mit einer porösen dickeren Schicht verbunden, welche für die Festigkeit bei den hohen Druckunterschieden auf beiden Seiten der Membran verantwortlich ist. Diese Schicht besteht meist aus Polymeren und hat eine Dicke von etwa 0,1 mm. Es folgt eine weitere, etwa gleich dicke Schicht aus einem Vlies, die für die nötige mechanische Festigkeit sorgt [6], eine gute Handhabbarkeit bietet und das Permeat, die Substanz, die die Membran passieren kann, schnell abführt [14].

Im Rahmen der Wasserentsalzungsanlagen gibt es zwei klassische Vertreter von Membranen, die auch für PRO-Anlagen Verwendung finden können: Membranen aus Cellulose-Acetat und aus aromatischen Polyamiden. [6] Allerdings muss dabei beachtet werden, dass diese Membranen im Rahmen der Umkehr-Osmose viel höheren Drücken bei der Wasserentsalzung standhalten müssen. Dieser Druckbereich wird im Rahmen der PRO über den osmotischen Druck nicht erreicht. Dieser Aspekt kann diese Membrane für PRO-Anlagen zum Teil ineffizient machen. Sie verhindern einen hohen Wasserdurchfluss im Rahmen der PRO und wirken somit einer möglichen Senkung der Anlagekosten entgegen. Zudem gibt es einen weiteren Membran Typen, welcher als Prototyp im Labor im Rahmen der PRO getestet wird: eine Dünnschicht-Kompositmembran (TFC-Membran).

Cellulose-Acetat

Die Cellulose-Acetat Membran ist eine der ersten Membranen, die im Rahmen von Umkehrosmose-Anlagen (reverse osmosis oder RO-Anlage) Verwendung fanden. [6] Diese werden in dünnen Schichten hergestellt und in Form von Spiralwickelmodulen in den Anlagen montiert. Zur Herstellung werden meist Phaseninversionsfällungsprozesse genutzt. [14] Sollten während des Herstellungsprozesses unerwünschte Defekte an der dichten Oberfläche auftreten, können diese mittels eines Wasserbads um 80°C behandelt werden.

Die Vorteile dieser Membranen liegen insbesondere in den geringen Anschaffungskosten, in der einfachen Verarbeitung des Cellulose-Acetats, in einer hohen Widerstandsfähigkeit des Materials gegenüber Oxidationsmitteln wie Chlor und Sauerstoff (bis zu einer Konzentration von 1 mg/L) [14] und in einer hohen Beständigkeit auch gegenüber verschmutztem Wasser [6].

Nachteilig ist jedoch, dass Cellulose-Acetat Membranen eine geringe Toleranz gegenüber erhöhten Temperaturen und erhöhten pH-Werten besitzen. [14] Sie können hydrolysiert werden und bieten keine gute Beständigkeit gegenüber Bakterien. Zudem besitzen diese Membranen eine vergleichsweise geringe Durchlässigkeit des Permeats, sowie eine geringe Widerstandsfähigkeit gegenüber organischen Lösungsmitteln. [6]

Aromatische Polyamide

Aromatische Polyamide werden in Hohlfasern hergestellt, welche einen sehr geringen Durchmesser aufzeigen. [6] Dadurch können diese Membranen mit einem großen Verhältnis zwischen der Filter-Oberfläche und dem Modulvolumen hervorstechen. Membranen aus aromatischen Polyamiden zählen zu den Kompositmembranen. [14] Das bedeutet, dass dieser Typ von Membran mindestens zwei Lagen, bestehend aus unterschiedlichen Materialien, vorweisen kann. Die Herstellung erfolgt meist in situ über Grenzflächenpolymerisation. Dabei wird eine ca. 0,2 µm dünne Schicht von Polyamid erhalten. Ab dem Moment, wo sich diese Schicht ausgebildet hat, verhindert sie ihrerseits eine Verdickung der Schicht durch weitere Reaktionen in der Tiefe der Unterstruktur und ist während ihrer Herstellung selbstheilend gegenüber Defektstellen. Modifizierte aromatische Polyamide werden noch heute im großen Maßstab zur Wasserentsalzung verwendet.

Vorteile dieses Membrantyps liegen zum einen in einer großen mechanischen Festigkeit gegenüber der vorzufindenden Druckdifferenzen auf beiden Seiten der Membran während der osmotischen Prozesse. [6] Zudem zeigen aromatische Polyamide eine hohe Stabilität gegenüber erhöhten oder erniedrigten pH-Werten und Mikroorganismen. [14] Des Weiteren bieten sie eine gute Durchlässigkeit für Wasser und können in einem hohen Maß den Durchtritt von Salzen verhindern.

Nachteilig ist jedoch die mit einer Cellulose-Acetat Membran vergleichbar geringe Widerstandsfähigkeit gegenüber freiem Chlor oder Sauerstoff. Die fehlende Widerstandsfähigkeit gegenüber freiem Chlor stellt bei diesem Membrantypen gerade in der Vorbehandlung des Wassers ein Problem dar. Da es meist zu einer Desinfektion des Wassers durch NaOCl kommt, um Anlagenbestandteile vor der Besiedelung von Mikroorganismen zu schützen, werden weitere Behandlungsschritte nötig, bevor das Wasser die Membran erreichen kann, um das freie Chlor, meist mit Hilfe von Aktivkohle oder Na_2SO_3 wieder abzutrennen.

TFC-Membran

Die TFC-Membran zeichnet sich durch eine hohe Wasserdurchlässigkeit, einer langen Haltbarkeit und der Toleranz gegenüber einem weiten pH-Bereich aus. [15] Die Membran besteht aus einer porösen Polymerschicht (oft aus Polysulfon), auf der sich eine dünne, selektive Schicht aus Polyamid befindet. Die dünne, schwammartige Polyamid-Schicht weist eine geringe Salzpermeabilität auf, während die darunterliegende fingerartige Polysulfon-Schicht die Konzentrationspolarisation

verringert. Konzentrationspolarisation entsteht durch die Anreicherung der Stoffe (z.B. Salze), die nicht durch die Membran diffundieren können. [14] Dadurch wird der Stoffdurchfluss der diffundierenden Komponente vermindert. Durch das Vermindern der Konzentrationspolarisation kann die Stromdichte der Anlage erhöht werden.

Trotz der vielen oben genannten Vorteile, stellt die Anfälligkeit dieser Membran gegenüber Oxidationsmitteln und Chlor einen Nachteil des Membran-Typs dar. [15]

Fazit

Es existieren zurzeit verschiedene Ansätze, um aus Salzgradienten und osmotischen Prozessen im Rahmen der „Blue Energy“ Energie zu gewinnen. Jeder Ansatz weist dabei seine Vor- und Nachteile auf. Einige Verfahren wurden oder werden auf ihre Arbeitsweisen, ihre Wirtschaftlichkeit und weitere Faktoren geprüft. Gleichzeitig wird an ihnen immer weiter geforscht. Auch wenn die verschiedenen Verfahren hohe Kostenstellen aufweisen, so kann schlussendlich gezeigt werden, dass die „Blue Energy“ eine mögliche Alternative zu fossilen Brennstoffen und zur Atomkraft bilden kann.

Die Energiegewinnung aus Salzgradientenkraftwerken bzw. Osmosekraftwerken bietet dabei ein großes Feld an Möglichkeiten, unabhängig von Wetterlagen und Tageszeit Energie zu gewinnen und dabei als Grundlastkraftwerke zu fungieren. [9] Die Grundlast bezeichnet dabei den Anteil am Strombedarf, der permanent unabhängig von Leistungsspitzen verbraucht wird. [16] Dazu müssen Kraftwerke vorhanden sein, die kostengünstig, gleichmäßig und zuverlässig Strom produzieren, um diese Grundlast abzudecken. Zurzeit wird dieser permanente Strombedarf vor allem durch Atomkraftwerke, Braunkohle- und Wasserlaufkraftwerke kompensiert, aber auch Windenergieanlagen finden hier Verwendung.

Die „Blue Energy“ steckt dabei noch in den Kinderschuhen. Pilotprojekte wurden gestartet, abgebrochen und werden heutzutage noch durchgeführt. Insgesamt bietet dieser Bereich jedoch ein großes Potential, wenn weiter akribisch an Membranen geforscht wird, Techniken analysiert und Kosten gesenkt werden. Die Membranen sind ein Kernproblem der Technologie. Deshalb ist es ein essenzielles Ziel der Forschung, eine Membran zu entwerfen, deren Struktur einen hohen Wasserdurchfluss erlaubt, bei gleichzeitiger geringer Salzdurchlässigkeit, hoher chemischer Beständigkeit, hoher Langlebigkeit und geringen Produktionskosten. Diese Punkte zu vereinen ist ein zentraler Bestandteil, damit sich die „Blue Energy“ gegenüber den etablierten Kraftwerken durchsetzen kann, um somit auf längere Sicht Atomkraftwerke und Kraftwerke, die mit fossilen Brennstoffen arbeiten, vom Netz nehmen zu können.

Danksagung

Ein großes Dankeschön gilt dem Land Niedersachsen, das eine Finanzierung der Arbeit im Rahmen des „Projekt Innovation plus Nr. 143“ ermöglicht hat.

Literatur

- [1] [Online]. Available: <https://www.zdf.de/nachrichten/politik/umweltprogramm-klimawandel-treibhausgase-100.html>. [Zugriff am 28.12.2020, 14:02 Uhr].
- [2] [Online]. Available: https://ec.europa.eu/clima/policies/international/negotiations/paris_de. [Zugriff am 31.05.2021, 17:19 Uhr].
- [3] D. Schulz, Elektrische Energieversorgung in Handbuch Elektrotechnik: Grundlagen und Anwendungen für Elektrotechniker, W. Pläßmann und D. Schulz (Eds.), 7. neu bearbeitete Auflage, Springer Vieweg, Wiesbaden, 2016, pp. 1009-1074.
- [4] [Online]. Available: <https://www.bundesregierung.de/breg-de/suche/bundesregierung-beschliesst-ausstieg-aus-der-kernkraft-bis-2022-457246>. [Zugriff am 23.02.2021, 14:19 Uhr].
- [5] K. Daejoong, K. Kilsung, H. K. Deok und L. Longnan, Energy Generation using Reverse Electrodialysis: Principles, Implementation, and Applications, Springer Nature Singapore Pte Ltd., Singapore, 2019, pp 1-2.
- [6] P. Chiesa, M. Asroli und A. Giuffrida, Blue Energy: Salinity Gradient for Energy Conversion in Process Intensification for Sustainable Energy Conversion, F. Gallucci und M. van Sint Annaland (Eds.), 1. Auflage, John Wiley & Sons Ltd., Chichester, West Sussex, 2015, pp 267-298.
- [7] F. Dinger, T. Tröndle und U. Platt, „Optimization of the Energy Output of Osmotic Power Plants,“ *Journal of Renewable Energy* (Hindawi Publishing Corporation), vol. 2013, 2013, <https://doi.org/10.1155/2013/496768>.
- [8] [Online]. Available: https://www.deutschlandfunk.de/strom-aus-salz.676.de.html?dram:article_id=26958. [Zugriff am 31.01.2021, 16:49 Uhr].
- [9] [Online]. Available: https://www.deutschlandfunk.de/osmosekraftwerk-in-norwegen-die-idee-von-der-stromgewinnung.871.de.html?dram:article_id=464082. [Zugriff am 28.12.2020, 11:33 Uhr].
- [10] [Online]. Available: https://www.deutschlandfunk.de/osmosekraftwerk-strom-aus-salz-im-oslofjord.676.de.html?dram:article_id=310548. [Zugriff am 28.12.2020, 11:40 Uhr].
- [11] DutchWaterSector. [Online]. Available: <https://www.dutchwatersector.com/news/dutch-king-opens-worlds-first-red-power-plant-driven-on-fresh-salt-water-mixing>. [Zugriff am 17.12.2020].
- [12] J. Veerman und D. A. Vermaas, Reverse Electrodialysis: Fundamentals in Sustainable Energy from Salinity Gradients, A. Cipollina, G. Micale (Eds.), Elsevier Ltd., Amsterdam, 2016, pp 77-133.
- [13] F. La Mantia, D. Brogioli und M. Pasta, Capacitive mixing and mixing entropy battery in Sustainable Energy from Salinity Gradients, A. Cipollina, G. Micale (Eds.), Elsevier Ltd., Amsterdam, 2016, pp 181-218.
- [14] H. Bruschke und T. Melin, Membrantechnik in Fluidverfahrenstechnik: Grundlagen, Methodik, Technik, Praxis, R. Goedecke (Ed.), WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2006, pp 495-580.
- [15] P. S. Goh und A. F. Ismail, Flat-Sheet Membrane for Power Generation and Desalination based on Salinity Gradient in Membrane-Based Salinity Gradient Processes for Water Treatment and Power Generation, S. Sarp, N. Hilal (Eds.), Elsevier B.V., Amsterdam, 2018, pp 155-174.
- [16] [Online]. Available: https://www.wdr.de/tv/applications/fernsehen/wissen/quarks/pdf/Q_Strom.pdf. [Zugriff am 30.12.2020, 15:48 Uhr].

Marie Claußen

Marie Claußen wurde im Jahr 2000 in Delmenhorst geboren und hat 2018 ihr Abitur erlangt. Anschließend folgte ein freiwilliges ökologisches Jahr im Umweltzentrum in Oldenburg. Während des FÖJs wurde ihre Begeisterung für Umwelt und Naturwissenschaften geweckt, insbesondere für die Chemie. Sie ist ein zentraler Bestandteil für die Lösung zukünftiger Probleme. Deshalb fing sie 2019 ihr Chemiestudium an der Carl von Ossietzky Universität in Oldenburg an. Im Frühjahr dieses Jahres hat sie ihre Bachelorarbeit im Bereich der organischen Chemie begonnen.

Saskia Bültena

Saskia Bültena wurde 1998 in Weener geboren und hat 2016 ihr Abitur gemacht. Danach folgte eine dreijährige Ausbildung zur Industriekauffrau in Leer. Nachdem ihr Interesse für Chemie in der Oberstufe geweckt und ein erster Einblick vermittelt wurde, wie viel auf atomarer Ebene möglich sei, hat sie der Gedanke während der Ausbildung nicht losgelassen, es doch mit dem Chemiestudium zu versuchen. Schließlich hat sie 2019 ihr Studium an der Carl von Ossietzky Universität in Oldenburg aufgenommen.

Während des Studiums wurde der Artikel zur „Blue Energy“ im Rahmen einer Hausarbeit im Modul „Thermodynamik und Kinetik“ verfasst.

Melanie Wallisch

Wohin mit unseren radioaktiven Abfällen?

„Wohin mit unseren radioaktiven Abfällen?“ Das ist eine Frage, die uns als Gesellschaft wohl noch sehr lange beschäftigen wird. In der Vergangenheit gab es dazu verschiedene Lösungsansätze. Von 1946 bis 1993 wurden Behälter auch mit deutschen radioaktiven Abfällen in den Weltmeeren entsorgt, was 1993 aufgrund der dadurch entstehenden Umwelteinflüsse international verboten wurde [1]. Auch die Entsorgung radioaktiver Abfälle im Weltraum ist aufgrund der großen Abfallmenge und der hohen Unfallgefahr keine Option [2]. Die seit den 1960er Jahren diskutierte Transmutation, also die Umwandlung langlebiger Radionuklide in solche mit kürzeren Halbwertszeiten durch Neutronenbestrahlung, soll in Deutschland ebenfalls nicht zur Anwendung kommen. Gründe dafür sind der prognostizierte Zeitraum bis zur Marktreife der Technologie, die hohen Kosten und der Umstand, dass auch aus dieser Umwandlung radioaktive Abfälle entstehen, die dann, wenn auch für einen kürzeren Zeitraum, endgelagert werden müssen [2]. Heute besteht internationaler Konsens darüber, dass wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle nur in tiefen geologischen Formationen eingelagert werden können, um eine langfristige Isolation ionisierender Strahlung von den Stoffströmen der Biosphäre zu gewährleisten [3]. In Deutschland wird diese Art der Endlagerung auch für Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung angestrebt.

Für wärmeentwickelnde Abfälle wurde in Deutschland die im Jahr 2017 gegründete Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE) mit der Standortsuche für ein sicheres Endlager betraut. Bei wärmeentwickelnden Abfällen handelt es sich um abgebrannte Brennelemente eines Kraftwerks und verglaste Abfälle aus der Wiederaufarbeitung, die überwiegend in dickwandigen Gussbehältern (z. B. vom Typ CASTOR) verpackt werden. Die Standortsuche hierfür befindet sich im laufenden Prozess, die Festlegung des Standortes wird bis 2031 angestrebt [4]. Um eine Langzeitsicherheit von einer Million Jahren für das geplante Endlager zu gewährleisten, werden für mögliche Standorte umfangreiche Studien und Langzeitprognosen unter geowissenschaftlichen und klimatischen Gesichtspunkten durchgeführt. Doch auch planungswissenschaftliche und sozioökonomische Kriterien spielen eine zentrale Rolle. Durch das Einbinden der Öffentlichkeit auf allen Stufen des Verfahrens soll außerdem maximale Transparenz geschaffen werden. Ziel des Verfahrens ist es, unter allen möglichen Standorten denjenigen auszuwählen, der die bestmögliche Sicherheit für

eine Anlage zur Endlagerung von wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen bietet [5].

Doch abgebrannte Brennelemente sind, auch wenn sie ca. 99 % der Radioaktivität eines Kernkraftwerks beinhalten, nicht die einzigen radioaktiven Abfälle, die in einem Kernkraftwerk entstehen. Tatsächlich machen sie nur ca. 10 % der Gesamtmasse radioaktiver Abfälle aus [6]. Obwohl etwa 97 % der Masse eines Kernkraftwerkes keine radioaktiven Abfälle sind, da die Stoffe entweder niemals kontaminiert oder aktiviert wurden oder vollständig dekontaminiert (gereinigt) werden können, fallen bei Betrieb und Abbau eines Kernkraftwerkes große Mengen radioaktiver Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung an [7]. Dabei handelt es sich um verschiedenste Abfallarten, von flüssigen Reaktorbetriebsabfällen über Ionenaustauscherharze und andere Filtermaterialien bis hin zu Werkzeugen und den Schutzanzügen des Personals. Typische Beispiele für radioaktive Abfälle aus dem Abbau von Kernkraftwerken sind kontaminierter oder aktivierter Beton und Stahl (z. B. Beton des Biologischen Schildes, Bauschutt aus der Gebäudedekontamination sowie der Reaktordruckbehälter mit seinen Einbauten). Mit der Prüfung von Verfahren zur Behandlung dieser radioaktiven Abfälle und der daraus entstandenen Abfallgebinde, also der verarbeiteten Abfälle inklusive ihrer Verpackung, bietet TÜV NORD EnSys der BGE als Sachverständigenorganisation eine fundierte Grundlage für abschließende Entscheidungen über den Umgang mit diesen Abfällen. Damit trägt TÜV NORD EnSys zentral zur sicheren Endlagerung bei.

Ein Endlager für ca. 300.000 m³ radioaktiver Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung befindet sich mit der Schachanlage Konrad bereits im Bau und soll 2027 fertiggestellt werden (Abb. 1) [9]. Der Einlagerungsbetrieb soll dann für ca. 30 Jahre andauern, bevor das Endlager stillgelegt wird. Das Endlager wird dafür mit Beton verfüllt und verschlossen. Um einen reibungslosen Einlagerungsbetrieb nach Eröffnung des Endlagers sicherstellen zu können, ist es notwendig bereits heute umfangreiche Vorbereitungen zu treffen. Abfallgebinde müssen, um im Endlager Konrad eingelagert werden zu dürfen, die Vorgaben für eine sichere Endlagerung erfüllen. Zu diesem Zweck wurden von der BGE die Endlagerungsbedingungen des Endlagers Konrad herausgegeben [10]. Diese definieren zusammen mit ergänzenden Dokumenten alle Anforderungen, die von Abfallgebinden eingehalten werden müssen, um deren technisch sichere Endlagerung zu gewährleisten. Dazu gehören Anforderungen an die Kritikalitätssicherheit, z. B. den Gehalt und Anreicherungsgrad an spaltbaren Stoffen, ebenso wie Grenzwerte für die, wenn auch im Vergleich zu den abgebrannten Brennelementen geringe, Wärmeentwicklung der Abfälle. Das Betriebspersonal wird während der Einlagerung u. a. durch Grenzwerte für die Direktstrahlung der Abfallgebinde

Dr. Melanie Wallisch
Abteilung Stilllegung und Entsorgung
TÜV NORD EnSys GmbH & Co. KG
Am TÜV 1, 30519 Hannover
mwallisch@tuev-nord.de
www.tuev-nord.de

DOI-Nr.: 10.26125/7aee-zf83



Abb. 1: Schachtanlage Konrad; links: Luftbild Schacht Konrad 1; rechts: Ausbau des ehemaligen Eisenerzbergwerks zum Endlager für radioaktive Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung. [8]

geschützt und die Abluft des Endlagers zum Schutz vor einer unzulässigen Belastung durch flüchtige Radionuklide überwacht. Störfallanalysen und die daraus abgeleiteten Aktivitätsbegrenzungen stellen sicher, dass das Betriebspersonal und die Bevölkerung auch dann nicht durch die Freisetzung der im Abfallgebinde vorhandenen Aktivität gefährdet werden, wenn es zu einem Brand oder einem Absturz des Abfallgebundes während des Einlagerungsprozesses kommen sollte. Für die Langzeitsicherheit des Endlagers wurden maximal einlagerbare Aktivitäten relevanter Radionuklide und Radionuklidgruppen abgeleitet. Zusätzlich zu den Aktivitätsbegrenzungen schützen Grenzwerte für schädliche Stoffe in den Abfallgebünden das oberflächennahe Grundwasser vor einer Belastung durch chemotoxische Verbindungen.

Um diesen Anforderungen zu genügen, müssen alle radioaktiven Abfälle vor der Anlieferung an das Endlager mithilfe qualifizierter Verfahren in einen chemisch stabilen, in Wasser nicht oder nur schwer löslichen Zustand überführt und verpackt werden. Bei dieser Erzeugung von transport- und lagerfähigen Abfallgebünden spricht man von der Konditionierung radioaktiver Abfälle. Alle hierfür durchgeführten Arbeitsschritte müssen dokumentiert werden. Die Kontrolle erfolgt durch die zuständigen Behörden mithilfe des Verfahrens der Produktkontrolle radioaktiver Abfälle, wobei es sich um einen mehrstufigen Prozess handelt, den alle endzulagernden Abfälle durchlaufen müssen (Abb. 2).

Die erste Stufe dieses Prozesses ist die Anmeldung einer Kampagne zur Konditionierung einer festgelegten Abfallart

und -menge mithilfe eines behördlich festgelegten Verfahrens durch den Abfalleigentümer bei der BGE. Darauf folgt die Qualifizierung des Konditionierungsverfahrens nach den Vorgaben der Atomrechtlichen Entsorgungsverordnung [12]. Daran ist u. a. TÜV NORD EnSys maßgeblich beteiligt. Als Sachverständige der BGE prüfen wir das geplante Verfahren im Vorfeld nach strengen Richtlinien, wobei die Sicherheit von Mensch und Umwelt stets an erster Stelle steht. Wird das Personal vor Ort während der Verarbeitung der Abfälle ausreichend geschützt? Ist eine technisch sichere Handhabung der entstehenden Abfallgebünde beim Transport zum und bei der Einlagerung in das Endlager möglich? Werden die Aktivitätsbegrenzungen des Endlagers eingehalten und auch die Anforderungen zum Schutz des oberflächennahen Grundwassers beachtet? All dies sind Fragen, die bereits vor der Freigabe des Verfahrens durch die BGE und dem Beginn der Arbeiten geklärt werden müssen.

Ist das Konditionierungsverfahren qualifiziert und von der BGE freigegeben, kann die Verarbeitung der radioaktiven Abfälle beginnen. Dabei können, je nach Art der Abfälle unterschiedliche Verfahren zur Anwendung kommen. Feste, nicht brennbare Materialien wie z. B. Werkzeuge, Kunststoffe, Maskenfilter und sonstige Mischabfälle, werden in der Regel hochdruckverpresst und anschließend getrocknet. Auf diese Weise kann das Volumen, welches diese Abfälle im Endlager benötigen, auf ca. 20 % reduziert werden (Abb. 3). Flüssige und nasse Abfälle, wie z. B. Ionenaustauscherharze oder Verdampferkonzentrate, werden in der Regel entwässert oder ebenfalls getrocknet.

Durch die Trocknung kann gewährleistet werden, dass sich die Abfälle in einem langfristig physikalisch und chemisch stabilen Zustand befinden. Häufig wird dies durch die Analyse von Gasproben aus der Behälterinnenatmosphäre der verpackten Abfälle zusätzlich bestätigt. Brennbare Materialien, wie beispielsweise Schutzanzüge, werden

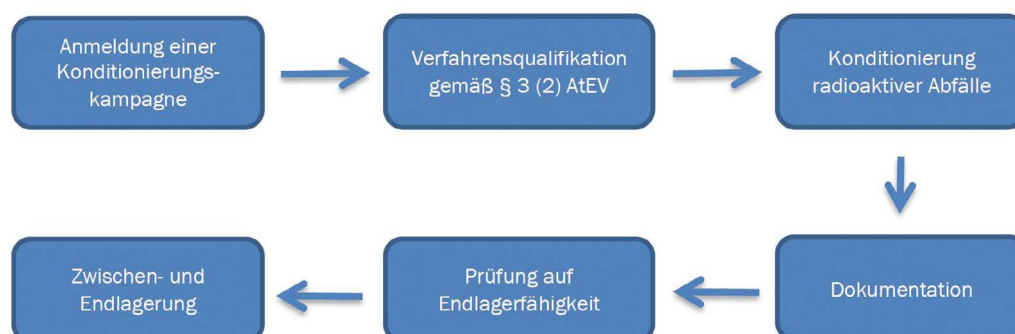


Abb. 2: Verfahren der Produktkontrolle radioaktiver Abfälle.

verbrannt und die entstehende Asche hochdruckverpresst. Dadurch ist eine Reduzierung auf unter 5 % des ursprünglichen Volumens erreichbar. Die Abfälle werden dafür in eine atomrechtlich genehmigte Verbrennungsanlage speziell für radioaktive Abfälle transportiert. Große Anlagenteile und Bauschutt aus dem Abbau von Kernkraftwerken werden in kleinere, handhabbare Teile zerlegt. Hierfür kommen mechanische und thermische Schneidverfahren sowie andere konventionelle Abbautechniken zum Einsatz. Oftmals ist auch eine Dekontamination von Materialien, wie beispielsweise Metallteilen, ausreichend. In diesem Fall müssen ausschließlich die zur Dekontamination genutzten Medien sowie geringe Mengen des dekontaminierten Stoffes („Dekontabtrag“) als radioaktive Abfälle weiterbehandelt werden. Die dekontaminierten Bauteile können dann nach einem strengen separaten Kontroll- und Freigabeverfahren auf konventionellem Wege entsorgt werden. Nach abgeschlossener Konditionierung werden alle Abfälle in von der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) auf ihre Sicherheit geprüfte und von der BGE für das Endlager zugelassene Behälter verpackt. Je nach Aktivität der Abfälle können hier auch dickwandige Behälter mit einer zusätzlichen Abschirmwirkung zum Einsatz kommen. All diese Arbeiten nimmt der Betreiber einer kerntechnischen Anlage jedoch nicht nach eigenem Ermessen vor. Um sicherzustellen, dass alle sicherheitsrelevanten, behördlichen Anforderungen umgesetzt sowie alle in der Verfahrensqualifikation festgelegten Maßnahmen erfüllt werden, begleiten unabhängige Sachverständige im Auftrag der zuständigen Aufsichtsbehörde die Konditionierung vor Ort.



Abb. 3: Hochdruckpresse zur Verpressung radioaktiver Abfälle im Kernkraftwerk Würgassen. [11]

Nach Abschluss der Arbeiten müssen die entstandenen, bis zu 20 t schweren, runden oder quaderförmigen Abfallgebilde noch von der BGE für die Endlagerung freigegeben werden. Dazu muss der Abfalleigentümer eine Dokumentation der erfolgten Konditionierung vorlegen. Diese beinhaltet neben verschiedenen Protokollen zu den durchgeführten Arbeiten auch Angaben zur Aktivität der Abfälle, so dass eindeutig nachgewiesen werden kann, dass das Abfallgebilde alle Aktivitätsbegrenzungen des Endlagers Konrad einhält. Zusätzlich sind Messprotokolle

für die Dosisleistung und die Kontaminationsfreiheit des Abfallgebildes enthalten. Dadurch wird sichergestellt, dass alle diesbezüglichen Grenzwerte eingehalten werden, und durch den Transport des Gebindes keine radioaktive Kontamination in die Umwelt gelangt. Auch Informationen zur chemischen Beschaffenheit der Abfälle sind in einer solchen Dokumentation vorhanden, sodass die Einhaltung wasserrechtlicher Grenzwerte ebenfalls sichergestellt wird. Diese Dokumentation wird von den beauftragten Sachverständigen hinsichtlich ihrer Plausibilität und Richtigkeit umfassend geprüft. Auf Grundlage dieser Prüfung trifft die BGE dann eine Entscheidung über die Freigabe des Abfallgebildes.

Erst nachdem ein Gebilde mit radioaktiven Abfällen dieses streng kontrollierte Verfahren durchlaufen hat, kann es im Endlager Konrad eingelagert werden. Als beauftragte Prüforganisation kommt u. a. TÜV NORD EnSys dabei eine zentrale Rolle zu. Die Sachverständigen stehen den zuständigen Behörden zur Seite, um die Einhaltung der relevanten Grenzwerte sicherzustellen, Abweichungen frühzeitig zu erkennen und die Konditionierung und Endlagerung radioaktiver Abfälle so sicher wie technisch möglich zu gestalten.

Referenzen

- [1] International Atomic Energy Agency: Inventory of radioactive waste disposals at sea, IAEA-TECDOC-1105, 1999.
- [2] Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH, Öko-Institut e.V.: Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in Deutschland, 2008.
- [3] Amtsblatt der Europäischen Union: RICHTLINIE 2011/70/EUR-ATOM DES RATES vom 19. Juli 2011 über einen Gemeinschaftsrahmen für die verantwortungsvolle und sichere Entsorgung abgebrannter Brennelemente und radioaktiver Abfälle.
- [4] Standortauswahlgesetz vom 5. Mai 2017 (BGBl. I S. 1074), das zuletzt durch Artikel 1 des Gesetzes vom 7. Dezember 2020 (BGBl. I S. 2760) geändert worden ist.
- [5] Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfälle: Abschlussbericht der Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe, 2016.
- [6] Deutsches Atomforum e.V.: Kernenergie und Kerntechnik in Deutschland und weltweit, 2014.
- [7] Entsorgungskommission: Vergleich der Massenströme bei der Stilllegung von Kernkraftwerken in Deutschland und Frankreich, 2014.
- [8] Foto: Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH.
- [9] Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH: Erläuterungsbericht zum Gutachten zur Ermittlung der Terminlage für das laufende Projekt Endlager Konrad durch den TÜV Rheinland, 2018.
- [10] Brennecke P.: Anforderungen an endzulagernde radioaktive Abfälle (Endlagerungsbedingungen, Stand: Dezember 2014) – Endlager Konrad –, SE-IB-29/08-REV-2.
- [11] Foto: PreussenElektra GmbH.
- [12] Verordnung über Anforderungen und Verfahren zur Entsorgung radioaktiver Abfälle (Atomrechtliche Entsorgungsverordnung – AtEV) vom 29. November 2018 (BGBl. I S. 2034, 2172).

Dr. Melanie Wallisch

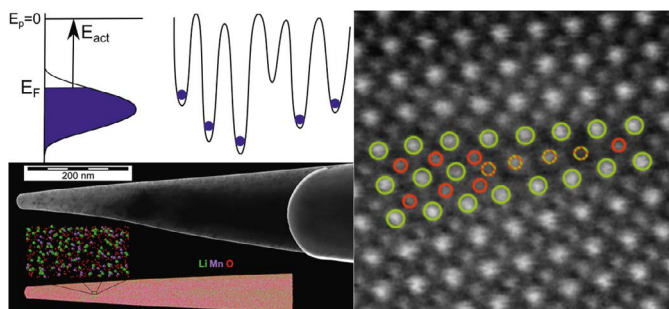
Melanie Wallisch erwarb im Jahr 2013 den Masterabschluss in Molecular Life Science, einem Hybrid-Studiengang aus Chemie, Biologie und Pharmazie, an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg. Im Anschluss verließ sie ihren Geburtsort Nürnberg, um an der Carl von Ossietzky Universität Oldenburg eine Promotion in der Organischen Chemie abzulegen. Dabei beschäftigte sich Frau Wallisch mit der Synthese organischer Fluoreszenzfarbstoffe, die im Rahmen des DFG-Graduiertenkollegs „Molecular Basis of Sensory Biology“ in verschiedenen Forschungsbereichen eingesetzt wurden.



Nach Beendigung der Promotion blieb sie dem Themengebiet Synthese zunächst treu und trat eine Stelle als Organische Chemikerin bei der ASM Research Chemicals GmbH in Hannover an. Ihre Aufgaben bestanden dort aus Auftragssynthesen und der Prozessentwicklung für die Synthese pharmazeutischer Wirkstoffe.

Im Jahr 2019 kehrte Melanie Wallisch dann der Organischen Chemie den Rücken, um sich bei der TÜV NORD EnSys GmbH & Co. KG der Produktkontrolle radioaktiver Abfälle zu widmen. Ein Schritt hinaus aus dem Labor und hinein in eine verantwortungsvolle Sachverständigentätigkeit mit vielseitigen Aufgaben: In Verfahrensqualifikationen bewertet die Expertin geplante Konditionierungskampagnen, während sie sich bei der Prüfung von Abfallgebindedokumentationen mit der Sicherheit fertiger Abfallgebinde befasst. Auch gelegentliche Besuche in Kernkraftwerken und Konditionierungsstätten zur Durchführung von begleitenden Kontrollen stehen auf dem Programm.

2nd workshop on Energy Landscapes and Structure in Ion Conducting Solids (ELSICS)



The second workshop of the DFG research unit FOR 5065 (Energy Landscapes and Structure in Ion Conducting Solids (ELSICS)) will be held in Göttingen from September 26th to 28th 2022.

The DFG Research Unit ELSICS (FOR 5065) has been founded in December 2020 with the goal to quantify the energy distribution of ionic sites in solids on the basis of atomically resolved structures and in conjunction with ionic transport properties with a truly concerted effort of experimental and theoretical research groups. This joint effort involves state-of-the-art expertise from diverse experiments [charge attachment induced transport (CAIT), time-of-flight secondary ion mass spectrometry (ToF-SIMS), solid-state nuclear magnetic resonance (NMR), atom probe tomography (APT) and analytical and high-resolution transmission electron microscopy (HR-TEM)], as well as dedicated solid-state matter theory for crystalline and amorphous materials.

The 1st ELSICS workshop was held in Marburg (DE) in September 2021.

The 2nd workshop will take place in Göttingen (DE) in September 2022. This 2nd workshop will collect presentations

from invited speakers as well as contributed presentations (both oral and posters).

Key topics for progress reports are

- Ion transport in amorphous, crystalline and poly-crystalline solids
- Short range versus long-range transport as seen by NMR, CAIT and IS
- Energy landscapes in ion conducting solids: site energy distribution, populated vs. unpopulated sites
- Interrelation between atomically resolved structure and energy landscapes
- Predictive methods for correlating energy landscapes to material structure and function

At the point of this announcement, the workshop is planned as a meeting in presence. We expect being able to host up to 80 participants. For those with travel restrictions we will consider offering participation via a Video platform. Conditions are subject to Corona regulations being operative. There will be a small fee to cover costs incurring for catering (lunch and coffee breaks) and conference material.

Call for Abstracts

The program will include 12 invited speakers from experts in the field. There is the possibility to present contributed talks subject to the number of slots available (approximately 24). We also intend to hold a Poster-Session and a Round Table discussion.

For further details contact the chairperson (weitzel@chemie.uni-marburg.de) or the www page at <https://www.uni-marburg.de/en/fb15/for5065/meetings/second-elsics-meeting>.

Frank Wille

CASTOR in Warteposition, aber bitte sicher.

1 Million Jahre sicherer Einschluss, 500 Jahre Bergbarkeit und 100 Jahre Zwischenlagerung. Diese Zahlen umreißen Zeiträume, die bei der Betrachtung der Post-Atomkraft-Ära in Deutschland eine wichtige Rolle spielen. Es geht hierbei um die Behandlung von radioaktiven Abfällen mit hohen Aktivitäten beispielsweise ausgediente Brennelemente aus dem Leistungsbetrieb von deutschen Kernkraftwerken mit dem Ziel der Endlagerung in tiefen geologischen Formationen. Erst mit Erreichen dieses Ziels wäre die Geschichte der kommerziellen Nutzung der Kernkraft in der Bundesrepublik abgeschlossen. Allerdings ist es bis dahin noch ein langer Weg.

Befeuert durch die Debatte in der Europäischen Union um die Taxonomie und damit die Weichenstellung für zukünftige Investitionen und Förderungen rückte die Atomkraft jüngst wieder in den Fokus der Tagesnachrichten. Es geht um die Frage, ist Atomkraft eine nachhaltige Wirtschaftsaktivität? Neben den Sicherheitsaspekten beim Betrieb von Atomkraftwerken stehen das Hinterlassen von großen Mengen an radioaktiven Abfällen mit nicht immer klarem und planbarem Entsorgungspfad und Gefahren für Mensch und Umwelt und auch ungewisse real anfallende Gesamtkosten im Zentrum der Kritik. Zumindest hier bei uns im Land. Die Kritik erscheint durchaus berechtigt in Anbetracht der anfangs genannten Zeiträume beim Umgang mit den radioaktiven Abfällen. Auch die Tatsache, dass bislang unbekannt ist, wo die hochaktiven Abfälle hier bei uns im Land endgelagert werden.

Behälteraspekt der kerntechnischen Entsorgung

Wie gehen wir nun in Deutschland mit den abgebrannten Brennelementen um, wenn Ende dieses Jahres die letzten drei Kernkraftwerke vom Netz gehen und in die Nachbetriebsphase und später in den Rückbau eintreten? Sind die hochaktiven Abfälle sicher zwischengelagert und später zum Endlager transportierbar?

Der Ansatz und die rechtlichen Randbedingungen, bis die Endlagerung der Brennelemente beginnt, sind in Deutschland eindeutig. Es ist das Konzept der ‚Trockenen Zwischenlagerung‘ [1] von radioaktiven Abfällen in dickwandigen Metallbehältern, in den meisten Fällen nah am Kraftwerksstandort, in Kombination mit der Sicherstellung der Transportierbarkeit dieser

Umschließungen. Gerade der letztgenannte Punkt sollte beruhen, da hiermit zukünftige Generationen ein Problem weniger zu lösen haben. Darüber hinaus kann den Zwischenlager umgebenden Gemeinden verständlich gemacht werden, dass der Rückbau der Kernkraftwerke das Entfernen sämtlicher radioaktiver Altlasten einschließt und damit nicht unfreiwillig ein oberirdisches Endlager entsteht.

Die abgebrannten Brennelemente gingen bis vor circa 20 Jahren zur Wiederaufarbeitung nach Frankreich und Großbritannien. In den dortigen Anlagen wurde das spaltbare Plutonium-239 extrahiert und der Herstellung von Mischoxid-Brennelementen zugeführt. Die anderen hochaktiven Spaltprodukte aus der Wiederaufarbeitung wurden mit Glas verschmolzen und in Edelstahlkokillen gefüllt. Deutschland hat die Rücknahme dieser Abfälle bis dato noch nicht abgeschlossen. Daher stehen in naher Zukunft weitere Transporte mit CASTOR-Behältern in die Zwischenlager an den Standorten Philippsburg, Isar/Ohu und Brokdorf an.

Aus dem laufenden Betrieb von Kernkraftwerken resultieren pro Jahr und Anlage mehrere Dutzende dieser Brennelemente. Sie werden in den Abklingbecken des jeweiligen Kraftwerks unter Wasser in Behälter mit einer späteren Gesamtmasse von mehr als 100 t geladen. Es erfolgt das Aufsetzen eines massiven ‚Primärdeckels‘ mit eingebauten Metalledichtungen. Anschließend wird der Innenraum getrocknet und mit Helium gefüllt. Das ist insofern von Bedeutung, da es die Alterungsbeständigkeit von Inventar und des Behälterinnenraums gewährleistet, die Radiolyse begrenzt und zu einer genügenden Wärmeabfuhr beiträgt. Im Zwischenlager wird ein zweiter Deckel, der sogenannte ‚Sekundärdeckel‘, aufgesetzt, der wiederum mit einer Metalledichtung versehen ist und mit einem Druckschalter ausgerüstet ist. Alle Deckel werden mit massiven Schrauben verschlossen und dichtgeprüft zur Gewährleistung einer Leckagerate von mindestens $1 \times 10^{-8} \text{ Pa m}^3/\text{s}$. Der über die gesamte Zwischenlagerdauer im Einsatz befindliche Druckschalter überwacht den Druck zwischen den beiden Deckeln und damit die Dichtigkeit des jeweiligen Behälters. Diese Komponente ist damit ein zentraler Bestandteil des sicherheitstechnischen Konzepts der Langzeitaufbewahrung der hochaktiven Brennelemente.

Die Behälter sind landläufig unter dem Namen CASTOR - Cask for Storage and Transport of Radioactive Material – bekannt, jedoch ist diese Bezeichnung nur ein Synonym für verschiedene Typen von Transport- und Lagerbehältern. In deutschen Zwischenlagern werden bis zur Inbetriebnahme eines Endlagers dann mehr als 1500 Behälter mit hochaktiven Abfällen aufbewahrt sein.

Dr.-Ing. Frank Wille
Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)
Fachbereich Sicherheit von Transportbehältern
Unter den Eichen 87, 12205 Berlin
frank.wille@bam.de

DOI-Nr.: 10.26125/73hj-nz53

Alterung

Bislang ist die Aufbewahrung der Brennelemente in den Behältern für einen Zeitraum von 40 Jahren bewertet. Hierauf sind die Maßnahmen beispielsweise Inspektionen und Prüfungen ausgerichtet. Wie eingangs erwähnt, wird allerdings derzeit von einer notwendigen Zwischenlagerung über einen Gesamtzeitraum von 100 Jahren ausgegangen. Nur so passt es zum prognostizierten Zeitplan der Suche, des Genehmigens und des Errichtens eines Endlagers. Darüber hinaus sollte nicht vergessen werden, dass es dann noch mehrere Jahrzehnte bedarf, bis auch das letzte Brennelement in das Endlager verbracht wurde. Welche Behälter hierfür Anwendung finden werden, ist heute noch nicht bekannt, da diese abhängig sind vom ausgewählten Endlagerstandort respektive Wirtsgestein.

Neben der Endlagersuche mit all ihren Facetten wird die sichere zwischenzeitliche Aufbewahrung der Abfälle bis zum Ende dieses Jahrhunderts nachzuweisen sein. Hiermit verknüpft ist die Erweiterung der Langzeitbetrachtungen der Behältersicherheit um weitere 60 Jahre auf dann in Gänze 100 Jahre. Für technische Komponenten solche Gewährleistungszeiträume zu bestätigen, stellt eine große Herausforderung dar. Hierzu notwendige Untersuchungen sind allerdings bereits seit geraumer Zeit in den Fokus gerückt. Experimentelle Untersuchungsprogramme wurden gestartet und bilden die Basis für anstehende Sicherheitsbewertungen. Beispielsweise betreibt die BAM eigene Versuchsstände für Langzeituntersuchungen von Metalledichtungen [2]. Sowohl die Lagerung ist hier im Fokus als auch die Sicherheit beim zukünftigen Transport der dann gealterten Behälter und ihrer radioaktiven Inhalte.

Behältersicherheit

Schauen wir uns im Detail die Sicherheit der Behälter für den Transport zum Endlager respektive der Konditionierungsanlage als Vorbereitung für die Endlagerung an. Wie wird die Sicherheit gewährleistet und worauf basieren die technischen Prüfungen?

CASTOR-Behälter sollen den Auswirkungen schwerster Unfälle standhalten und müssen dabei ihre Sicherheitsfunktionen beibehalten. Dazu zählen der sichere Einschluss des radioaktiven Inventars mit nachgewiesener Behälterintegrität und -dichtheit, die ausreichende Abschirmung der radioaktiven Strahlung, die Ableitung der von den Brennelementen ausgehenden Wärme und der Ausschluss des Entstehens einer nuklearen Kettenreaktion, d.h. die Kritikalitätssicherheit sind zu gewährleisten.

Zum Nachweis dieser Fähigkeiten werden die Behälter gegen Stoß, Aufprall, Durchstoßen, Feuer sowie beim Eintauchen in Wasser geprüft. Durch diese Tests werden Beanspruchungen aus potentiellen schweren Unfällen abdeckend simuliert. Die hierfür erforderlichen experimentellen Tests, aber auch die Prüfung und Entwicklung komplexer rechnerischer Simulationen des Behälterverhaltens unter Anwendung der Finite-Elemente-Methode erfolgen bei der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) [3] [4].



Abb. 1: Vorbereitung Fallprüfung eines 120 t Behälters auf IAEO-Fundament.

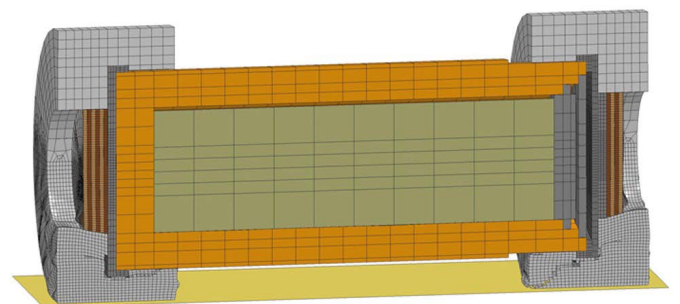


Abb. 2: Finite-Elemente-Modell für die Simulation einer Fallprüfung.

Die Basis bildet das Regelwerk der Internationalen Atom- und Energieorganisation (IAEO) zum sicheren Transport von radioaktiven Stoffen, welches international harmonisierte Schutzziele und Prüfanforderungen definiert [5]. Die seit 60 Jahren praktizierte stetige Weiterentwicklung der Sicherheitsanforderungen trägt aktuellen Erkenntnissen, Erfahrungen und Risikoanalysen Rechnung. Die Brennelementbehälter werden mechanischen Prüfungen sowie Brand- und Wasserdruckprüfungen unterzogen. Hierdurch wird nachgewiesen, dass sie den Auswirkungen eines schweren Unfalls standhalten können. Nur Behälter die zweifelsfrei die kumulativen mechanischen und thermischen Tests und auch die Wasserdruckprüfung mit Erfüllen aller Schutzziele bestehen, bekommen eine Zulassung, die es erlaubt die Behälter zu transportieren.

Wissensmanagement

Der Gesamtblick auf das Konzept der kerntechnischen Entsorgung in Deutschland zeigt, dass noch genügend Aufgaben vor uns liegen. Die Suche nach einem geeigneten Endlager und das Errichten wird uns mehrere Jahrzehnte beschäftigen. Der Nachweis der sicheren Verwahrung der Brennelemente in der Zwischenlagerung darf ebenso wenig aus dem Auge gelassen werden wie auch die Gewährleistung, dass die Behälter sicher zum Endlager transportiert werden können. Zukünftige Generationen sind mit ausreichend Informationen und sicherheitswissenschaftlichem Verständnis zu versorgen, damit die Kenntnisse um die Sicherheit der technischen Einrichtungen und Komponenten, wie beispielsweise die Transport- und Lagerbehälter, nicht verloren gehen und Anwendung finden können. Hierzu zählt auch, dass die Fachkompetenz im Zuge eines Sicherheitsmonitorings angewendet wird, damit der Wisenserhalt und -ausbau gelingt. Im Gesamtkonzept der Alterungsbewertung der Behälter ist das der Teil eines ‚intellektuellen‘ Alterungsmanagements. So bleibt zu hoffen, dass die Worte von George Santayana: *“Those who cannot remember the past are condemned to repeat it.”* [6] motivierend für die Organisation des Wissensmanagements wirken.

Referenzen

- [1] Leitlinien für die trockene Zwischenlagerung bestrahlter Brennelemente und Wärme entwickelnder radioaktiver Abfälle in Behältern (Revidierte Fassung vom 10.06.2013), Entsorgungskommission (ESK), 2013.
- [2] Matthias Jaunich et al.: Overview of metal seal tests performed at BAM and implications for extended interim storage. *Kern-technik* **85** (2020) 6; page 440–443.
- [3] Bernhard Droste: Packaging, transport, and storage of high-, intermediate-, and low-level radioactive wastes, In: *Safe and Secure Transport and Storage of Radioactive Materials, Woodhead Publishing Series in Energy*, 2018, UK, 231 – 270.
- [4] Thomas Quercetti et al.: Safety Evaluation of a Package for Radioactive Waste by Full-Scale Drop Testing. Proceedings of the 30th European Safety and Reliability Conference and 15th Probabilistic Safety Assessment and Management Conference (ESREL2020 PSAM15), Venice, Italy, 2-5 November 2020.
- [5] International Atomic Energy Agency (IAEA): Regulations for the Safe Transport of Radioactive Material, 2018 Edition. Specific Safety Requirements No. SSR-6 (Rev. 1), Vienna, 2018.
- [6] George Santayana, *The Life of Reason: Reason in Common Sense*, Scribner 1905, S. 284.

Dr.-Ing. Frank Wille

Frank Wille, Jahrgang 1974, studierte Bauingenieurwesen und promovierte im Bereich des konstruktiven Ingenieurbaus.



Trotz spannender Themen beim innovativen Bauen und Planen, führte es mich vor nunmehr 18 Jahren zu neuen Ufern in das Gebiet der sicherheitswissenschaftlichen Bewertung von Behältern für radioaktive Stoffe. Die Kombination von experimentellen Untersuchungen, strukturmechanischen Finite-Elemente-Berechnungen und Betrachtungen zur Aktivitätsfreisetzung mit dem Ziel der Unfall- und Störfallbewertung von Behältern war damals und ist heute noch die Herausforderung. Die Mitarbeit in Gremien der Internationalen Atom- und Energie Organisation (IAEO) führte mich in den vergangenen 15 Jahren regelmäßig nach Wien zu den Vereinten Nationen. Der hiermit verbundene Austausch mit Experten und Wissenschaftlern aus der ganzen Welt stellt seit vielen Jahren eine große persönliche Bereicherung dar. Die internationale Harmonisierung technischer Ansätze und Regeln durch die diversen Gremien der IAEO erlaubt sichere Transporte von radioaktiven Stoffen über Ländergrenzen hinweg.

Meine derzeitigen Aufgaben als Leiter des Fachbereichs für die Sicherheit von Transportbehältern an der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) beinhalten unter anderem Prüfungen im Zuge von Zulassungsverfahren für die sichere Beförderung von Brennelementen und radioaktiven Abfällen aus der Entsorgung von Kernkraftwerken und Forschungsreaktoren. Die Analyse von Unfallszenarien bildet den zentralen Punkt bei der Bewertung des sicheren Einschlusses der radioaktiven Materialien. Das Spektrum der Prüfungen ist nicht begrenzt auf Behälter für Brennelemente, sondern umfasst ebenso die Umschließung von Quellen für die medizinische Diagnose oder Anwendungen in der Brachytherapie und geht bis zu Analysegeräten der zerstörungsfreien Werkstoffprüfung mittels Gammarradiographie.

Die mit dem Aufgabengebiet verbundene Forschung an der BAM beschäftigt sich mit der Ableitung von geeigneten sicherheitswissenschaftlichen Beurteilungsmethoden und zunehmend intensiver mit den Fragen der Alterung der Behälter und deren hochaktive Inventare. Es werden das mechanische und thermische Verhalten von Dichtsystemen, Behälterwerkstoffen und Komponenten untersucht. Das Ziel ist es Simulationen zu entwickeln, die geeignete Prognosemodelle für die Alterung der Behälter beinhalten, die sichere Brennelementtransporte in ein zukünftiges Endlager erlauben.

Ricardo A. Mata and Martin A. Suhm

International Bunsen Discussion Meeting

Benchmark Experiments for Numerical Quantum Chemistry

On the occasion of Robert Bunsen's 211th birthday, we gathered in the center of his hometown of Göttingen for a very special discussion meeting under the title "Benchmark experiments for numerical quantum chemistry". The topic was strongly inspired by the DFG Research Training Group BENCH (RTG2455), fully represented in the audience and partly on stage. It was an extraordinary occasion for several reasons. With the Covid-19 pandemic still raging on, an in-person event is far from being an easy feat. Despite the social distancing measures, one enjoyed many exchanges and special moments, getting together with old acquaintances or with the new generation of young researchers, somewhat hidden away in the last 2 years. Another highlight of the meeting was the wide scope of topics presented and debated under the common ceiling of benchmarking. The program was shared not only by physical chemists, the "usual" crowd by a Bunsen discussion meeting, but also synthetic chemists and spectroscopists of different backgrounds. Theoretical calculations were a constant throughout the program, providing a common platform for exchange.

The first day displayed well the variety of topics around benchmarking, with sessions on "Metal centers" and "Reactivity". The



Group photo outside the Alte Mensa. Foto: Nils Lüttschwager.

Prof. Dr. Ricardo A. Mata
rmata@gwdg.de | cchembio.uni-goettingen.de,
Prof. Dr. Martin A. Suhm
msuhm@gwdg.de | hbond.uni-goettingen.de
Institut für Physikalische Chemie, Georg-August-Universität Göttingen,
Tammannstr. 6, 37077 Göttingen, Germany

description of transition metal complexes is a crux for electronic structure methods, made quite clear in the presentation from Milica Feldt (LIKAT) on non-heme iron complexes and the performance of different coupled cluster variants. Bas de Bruin (U Amsterdam), on the other hand, highlighted the interplay of DFT and EPR measurements in exploring the 1e-reactivity of cobalt porphyrines. Similar aspects of cooperativity were highlighted in the talks by Gupta and Schneider. The nature of radical intermediates was again a topic in the presentation by Jana Roithová (Radboud U), while discussing the difficulties inherent to the modeling of copper-oxo complexes. In this case, IR spectroscopy proves to be an invaluable tool and a reference method for the assignment of ground electronic states. In the "Reactivity" session we also came in contact with different approaches to the study of rate constants, a local favorite since many decades, from unimolecular to bimolecular reactions, including three home contributions (Koszinowski, Alcarazo and Vondung). Rational aspects of catalysis were apparent, with the most clear control tactic being the inclusion/removal of charges and/or the charge carrier.

On the second day rotational and vibrational spectroscopy took center stage during the "Gas phase" session. Lam Nguyen (U Paris-Est Créteil) shared with us her project workflow as a microwave-spectroscopist and shed some light on how the community picks its winners and losers when it comes to computational approaches. Edit Mátyus (Eötvös Loránd U) continued on the topic of large amplitude motions, this time around from a theoretical chemist perspective. The talk featured workarounds to the double exponential scaling problem of rovibrational calculations (basis sets and integration points). We were presented in the last day with another perspective on this problem from Tucker Carrington (Queen's University Kingston). The two presentations gave the audience a taste of how far one can go today into spectroscopic accuracy. Benjamin Schröder (U Göttingen) continued with one of the most often mentioned benchmark systems in the meeting (formic acid) and approximations to mode coupling for larger systems. Kenneth Koziol (RWTH Aachen) returned to the topic of tunneling, now for the paradigmatic amine inversion.

The "Surfaces" and "Solids" sessions, albeit separate, shared many common methodologies. On the theory side we had the presentation of Beate Paulus (FU Berlin) with an overview of the challenges faced in describing on-surface reactivity. Svetlana Schauermaier (U Kiel) showcased again the power of infrared spectroscopy, this time around in identifying surface-bound intermediates. This would later spur interesting discussions on



A perspective of the audience during one of the presentations. Mask wearing and an occupancy below 50% were some of the measures in place.
Foto: Nils Lüttschwager.

how to bridge benchmarking of IR bands at surfaces and in the gas phase. Data curation and automation was also one of the topics brought up by Peter Kraus (Empa) rounding out the morning of the second day. One started with a research workflow, ended the morning with the question of whether it is possible to prime our work for comprehensive benchmarks and datasets towards the development of new materials and catalysts. In the afternoon, Jacob Overgaard (Aarhus U), Anna Hoser (U Warsaw) and Anna Krawczuk (U Göttingen) discussed the interplay of crystallography and theory. The first speaker built a bridge to Sandeep Gupta (U Göttingen) and the study of molecular magnets, prime systems for the discussion of spin coupling and electronic barriers. This is, of course, not the only aspect where theory comes in touch with diffraction techniques. Quantum crystallography, analysis of bond structure, how electronic populations can be discussed from the experiment and theory side, these were all points beautifully illustrated. Marco Eckhoff (U Göttingen) showed how high-dimensional neural network potentials could be applied not only for structures and energies, but also for the prediction of electronic spins.

The second day would finish with a session on “Emerging Fields” which foremost focused on intermolecular interactions and reactivity in solution. Stefan Kast (TU Dortmund) gave an overview of the SAMPL challenges over the years. It clearly showed the value of blind challenges in moving a community and triggering healthy exchanges. By revisiting the systems there is also a clear added value as one better understands how computational protocols can be limited in accuracy in different chemical spaces. Navigating the chemical space was the main topic in Jonny Proppe’s presentation (TU Braunschweig), and how to generate “pseudo-experimental” benchmark data for reactivity. Marina Bennati (U Göttingen, MPI-NAT) showed the power of EPR spectroscopy again as a quantitative tool for equilibria and kinetics in solution.

In the first session of the third day one placed in the same stage three of the heated topics which were arising throughout the meeting. Albeit distinct, these are all aspects which require some consolidation and standardisation in the community, thereby fitting well under the umbrella of “Standards and Concepts”. Carrington, whom we already mentioned, took us on a trip through different coordinate selections in theoretical

spectroscopy. Diego Andrada (U Saarland) encompassed some of the most critical points around oxidation states and definitions of chemical bonding, while Daniel Obenchain (U Göttingen) gave a spirited talk on the combination of experimental measurements for a more overarching spirit of benchmarking. The International Bunsen Discussion meeting closed with a last session “Challenges”. Alongside the presentation of blind challenges for the community originating from the RTG2455 (HyDRA and Fe-MAN), several insights were shared on the benchmarking of molecular (and atomic) interactions. Michael Hippler (U Sheffield) who participated in the HyDRA challenge talked about his experience (and struggle) in balancing error compensation or trying to avoid it as much as possible. Oliver Bünermann (U Göttingen) shared some exciting scattering experiments and how these can be in the future fine-tuned to reveal different pathways of energy exchange in a challenge to non-adiabatic theory. This complemented an earlier talk by Dmitriy Borodin (U Göttingen) in the “Surfaces” session where we learned how one can measure site-specific reactivity and the importance of phonon coupling in theoretical treatments. Himanshi Singh (DESY Hamburg) brought the discussion back to rotational spectra and its usefulness in structure benchmarking.



A poster discussion with Beate Paulus (left) and Taija Lena Fischer (right), with the HyDRA double-blind challenge as the main topic. Foto: Nils Lüttschwager.

It was well worth the effort to bring together more than 70 researchers from 8 countries to share their views on benchmarking. The poster session was particularly remarkable, where many doctoral students shared their work enthusiastically for more than 2 hours (to the point where we had difficulties clearing the premises and moving the discussion outside). Two of the posters won a special recognition. From the theory side we had Lukas Hasecke (U Göttingen) on multicomponent calculations and Freya Berggötz (DESY Hamburg) on the topic of rotational spectroscopy. Leaving the event there were many lessons to carry home. As it was highlighted in one of the talks, the definition of computational accuracy spans a wide range. Across this range we saw clear examples of how by combining different techniques and some ingenuity in the choice of systems, one can set challenges for theory which will span over decades. In many cases this requires an intensive exchange in the best Bunsen spirit between different communities, not only those well established in benchmarking, but also those making their first steps. We hope to come again together soon and continue the discussion.

Auszeichnungen und Ehrungen

Joannes Karges, Dr., University of California, wurde mit dem [Wilhelm-Ostwald-Nachwuchspreis](#) ausgezeichnet.

Geburtstage im Juni 2022

Volker Sick, Prof. Dr.

Norbert Hampp, Prof. Dr.

Bernd Herzog, Dr.

Helmut Baltruschat, Prof. Dr.

Michael Grunze, Prof. Dr.

Bert Sakmann, Prof. Dr.

Geburtstage im Juli 2022

Hans-Robert Volpp, Dr.

Stefan Seeger, Prof. Dr.

Radha Dilip Banhatti, Dr.

Thomas Prisner, Prof. Dr.

Matthias Ballauff, Prof. Dr.

Emil Roduner, Prof. Dr.

Richard Aumayer, Dr.

Bernd Ondruschka, Prof. Dr.

Heinz Bässler, Prof. Dr.

Das Bunsen-Magazin dokumentiert Geburtstage der DBG-Mitglieder in Fünfjahresschritten – beginnend mit dem 60. Geburtstag. Mitglieder, die keine Veröffentlichung ihres Geburtstags wünschen, teilen dies bitte der DBG-Geschäftsstelle mit: geschaeftsstelle@bunsen.de.

Neuanmeldungen zur Mitgliedschaft

Margarethe Bödecker
Arved Cedric Dorst
Beate Kempken
Dr. Nils Lüttschwager
Dr. Mathias Micheel
Dr. Falk Meller
Maria Tonauer M.Sc.

Verstorben

Johann Gaube, Prof. Dr.-Ing.
im Alter von 90 Jahren

Veranstaltungen**Deutsche Bunsen-Gesellschaft**

Bunsen-Kolloquium

New Horizons in Solid State Ionics

28.–29. Juli 2022, Aachen und online

Bunsen-Tagung 2022

Understanding Dispersion Interactions in Molecular Chemistry

7.–9. September 2022, Giessen

www.bunsentagung.de

Weitere Veranstaltungen

Präsenzkurs: Kolloidale Nanomaterialien

18.–20. Mai 2022, Aachen

<https://gdch.academy/c/601/22>

WissKon 2022

20. Mai 2022, Karlsruhe und online

<https://www.nawik-wisskon.de/die-konferenz/wisskon22/>

8th EuChemS Chemistry Congress

28th August – 1st September 2022, Lisbon

<https://euchems2022.eu/>

17th Meeting of the European Society of Sonochemistry

28. August – 1. September 2022, Jena

www.ess2022.de

2nd ELSICS Workshop – Energy Landscapes

and Structure of Ion Conducting Solids

26–28th September 2022, Göttingen

www.uni-marburg.de/en/fb15/for5065

Electrochemistry 2022

27.–30. September 2022, Berlin

www.gdch.de/electrochemistry2022

International Workshop on Nitride Semiconductors

9.–14. Oktober 2022, Berlin

www.iwn2022.org

Verschiedenes**Ausschreibungsrunde der „Add-on Fellowships for Interdisciplinary Life Science“**

Mit dem Add-on Fellowship werden Promovierende und Postdocs verschiedener Disziplinen gefördert, die an fachübergreifenden Fragen im Bereich der Biowissenschaften und verwandten Forschungsfeldern arbeiten. Damit ermöglicht die

Joachim Herz Stiftung im Jahr 2022 für bis zu 50 Stipendiatinnen und Stipendiaten einmal mehr den berühmten „Blick über den Tellerrand“. Die Add-on Fellows erhalten über einen Zeitraum von zwei Jahren bis zu 12.500 EUR, die u. a. für internationale Vernetzung und Weiterbildung in jeweils anderen Fachrichtungen, für Hard- und Software und Angebote im Rahmen der Karriereentwicklung verwendet werden können. Stipendiat:innen mit Kindern können zusätzlich Mittel zur Vereinbarkeit von Familie und Beruf beantragen. Der Bewerbungszeitraum endet am **7. Juni 2022**. Näheres zur aktuellen Ausschreibung erfahren Sie unter: www.joachim-herz-stiftung.de/addon-nat

Exzellente Lehre an Hochschulen – Ars legendi-Fakultätenpreis Mathematik und Naturwissenschaften 2022 vergeben

Der Ars legendi-Fakultätenpreis für exzellente Hochschullehre in Mathematik und den Naturwissenschaften 2022 geht an Dagmar Hann und Daniela Meilinger (Biologie, LMU München), Nele Milsch (Chemie, Uni Göttingen), Martin Schlather (Mathematik, Uni Mannheim) und Julia Sammet (Physik, Uni Frankfurt/Main). Nele Milsch von der Fakultät für Chemie der Georg-August-Universität Göttingen hat ein Schulungskonzept für Tutor:innen (SciTuition) entwickelt sowie umgesetzt und damit einen bedeutenden Beitrag zur Verbesserung der Lehre geleistet. Tutor:innen leisten an den meisten Hochschulen wichtige Beiträge zur Lehrassistenz und sind wichtige Multiplikator:innen. Nele Milsch hat für ihre Ausbildung ein umfassendes, didaktisch fundiertes und durchdachtes Konzept entwickelt. Dieses bereitet die Tutor:innen nicht nur fachlich, sondern auch didaktisch auf ihre Aufgabe vor und greift auch Spezifika des Chemiestudiums wie Praktikumsbetreuung auf. Als besonders positiv bewertet die Jury, dass den Tutor:innen begleitend zu ihrer Tätigkeit weitere vertiefende Module angeboten werden, und sie hierfür auch Kreditpunkte erwerben können. Infos zu allen Preisträger:innen 2022 und zum Preis: <https://stifterverband.org/ars-legendi-mn>



Deutsche Bunsen-Gesellschaft
für physikalische Chemie

Einladung zur DBG-Mitgliederversammlung

Gemäß § 10 der DBG-Satzung berufe ich hiermit die diesjährige Mitgliederversammlung
unserer Gesellschaft für

Mittwoch, 7. September 2022, 13.30 Uhr

nach Gießen ein.

Die Mitgliederversammlung findet statt an der Justus-Liebig-Universität Gießen,
Hörsaal C5b, Hörsaalgebäude Neubau Chemie, Heinrich-Buff-Ring 19, 35392 Gießen.

Tagesordnung

1. Bericht des Vorstandes über das abgelaufene Geschäftsjahr
2. Feststellung der Jahresrechnung, Bericht des Schatzmeisters über den Jahresabschluss und über das laufende Geschäftsjahr
3. Entgegennahme und Genehmigung des Berichts der Rechnungsprüfer:innen
4. Entlastung des Vorstandes und der Geschäftsführung
5. Vornahme der erforderlichen Wahlen
6. Festsetzung des Jahresbeitrages
7. Beschlussfassung über Ort und Zeit der nächsten Hauptversammlungen (Bunsen-Tagungen)
8. Beschlussfassung über Satzungsänderungen
9. Beschlussfassung über eingegangene Anträge
10. Verschiedenes

Diese Einladung richtet sich nur an Mitglieder der DBG. Anträge aus der Mitgliedschaft (TOP 9) müssen gemäß § 10 Abs. 4 der DBG-Satzung einschließlich einer kurzen Begründung mindestens vier Wochen vor der Mitgliederversammlung, d.h. spätestens am **10. August 2022**, dem 1. Vorsitzenden vorliegen.

Anträge sind mit entsprechender Begründung an Dr. Florian Budde, geschaeftsstelle@bunsen.de, Deutsche Bunsen-Gesellschaft für physikalische Chemie e.V., Postfach 90 04 40, 60444 Frankfurt am Main, zu senden.

Dr. Florian Budde
Erster Vorsitzender der DBG 2021/2022

Auszeichnung für eine Pionierin der Quantenchemie

Sie leistete grundlegende Beiträge in der Quantenchemie, veröffentlichte rund 500 wissenschaftliche Studien, erhielt zahlreiche Preise und Auszeichnungen und wurde als eine der ersten Frauen Professorin für physikalische und theoretische Chemie: Sigrid Peyerimhoff zählt zu den wichtigsten und verdienstvollsten theoretischen Chemikerinnen und Chemikern und leistete quantenchemische Pionierarbeit, die nicht zuletzt zur weltweiten Spitzenpositionierung der deutschen theoretischen Chemie führte. Nun zeichnet die Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) die Wissenschaftlerin mit dem Erich-Hückel-Preis aus.

Sigrid Peyerimhoff erhält die mit 7500 Euro dotierte Auszeichnung für die grundlegende Entwicklung quantenchemischer Verfahren zur Berechnung molekularer Eigenschaften, zur Aufklärung chemischer Reaktionen und zur Analyse von Molekülspektren. Die GDCh würdigt insbesondere die Entwicklung des Multi-Referenz-Ansatzes im Konfigurationswechselwirkungsverfahren (MRD-CI) mit Selektion und Energieextrapolation unter Einschluss der Spin-Bahn-Wechselwirkung. Dank dieses Verfahrens wurden wegweisende Untersuchungen von Molekülen und Ionen in der Atmosphärenchemie, im Bereich der Elektronen-Molekülstreuung und der Berechnung der Stabilität von atomaren und molekularen Clustern möglich. Das MRD-CI-Verfahren wurde zunächst auf sehr kleine Modell-Systeme angewandt. Als „Theoretisches Spektrometer“ übertraf es die experimentellen Genauigkeiten und trug damit zur Anerkennung und Etablierung der Theoretischen Chemie als unverzichtbares grundlegendes Fach der Chemie entscheidend bei. Die Preisträgerin erhält ihre Auszeichnung im Rahmen des 58. Symposium on Theoretical Chemistry, das vom 18. bis 22. September 2022 in Heidelberg stattfindet.

Sigrid Peyerimhoff wurde 1937 in Rottweil geboren. Nach ihrem Abitur im Jahr 1956 studierte sie Physik an der Justus-Liebig-Universität Gießen und schloss das Studium 1961 mit dem Diplom ab. 1963 promovierte sie in Gießen in Theoretischer Physik. In ihrer Doktorarbeit unter der Betreuung von Bernhard Kockel (1909-1987), Professor für theoretische Physik, beschäftigte sich Peyerimhoff mit quantenchemischen Berechnungen des Fluorwasserstoff-Moleküls. Nach Forschungsaufenthalten in den USA, unter anderem an der University of Chicago, an der University of Washington und an der Princeton University, wurde sie 1967 an der Universität Gießen in Theoretischer Physik habilitiert. Sie lehrte danach noch zwei Jahre als Dozentin in Gießen und ging anschließend als Wissenschaftliche Rätin und Professorin nach Mainz. In dieser Zeit verbrachte sie mehrere Gastaufenthalte in den USA an der University of Nebraska-Lincoln in Lincoln. Mit Mitte dreißig, im Jahr 1972, nahm Peyerimhoff einen Ruf auf den Lehrstuhl für physikalische und theoretische Chemie an der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität



Professorin Dr. Sigrid Peyerimhoff (Foto: privat)

Bonn an. Lange blieb sie die einzige Frau in Deutschland, die einen solchen Lehrstuhl innehatte.

Peyerimhoff leistete grundlegende Beiträge zu Ab-initio-Berechnungen in der Quantenchemie. Darunter versteht man Verfahren zum Lösen der Schrödinger-Gleichung unter alleiniger Verwendung von Naturkonstanten. Diese Arbeiten waren auch bedeutend für umweltrelevante Reaktionen in der Atmosphäre, zum Beispiel von Ozon. Insgesamt veröffentlichte sie etwa 500 Studien in wissenschaftlichen Zeitschriften und Sammelbänden. Die Wissenschaftlerin erhielt zahlreiche renommierte Preise und Auszeichnungen, wie unter anderem den Leibniz-Preis der Deutschen Forschungsgemeinschaft (1988), die Cothenius-Medaille der Deutschen Akademie der Naturforscher Leopoldina (2007), das Große Bundesverdienstkreuz (2008) und die Alexander-von-Humboldt-Medaille der Gesellschaft Deutscher Naturforscher und Ärzte (2018).

Neben ihrer akademischen Tätigkeit übernahm Peyerimhoff wichtige Aufgaben und Funktionen in wissenschaftlichen Gesellschaften und Gremien. So war sie 1987 Gründungsmitglied der Akademie der Wissenschaften zu Berlin und von 1990 bis 1996 Vizepräsidentin der Deutschen Forschungsgemeinschaft. 1999 wurde sie zum Mitglied der Deutschen Akademie der Naturforscher Leopoldina ernannt. Peyerimhoff ist außerdem Mitglied der Deutschen Akademie der Technikwissenschaften, der Academia Europaea und der Nordrhein-Westfälischen Akademie der Wissenschaften und der Künste. Von 2006 bis 2009 war sie Präsidentin der International Academy of Quantum Molecular Science. Seit 1973 ist Sigrid Peyerimhoff GDCh-Mitglied. Zu ihren Ehren zeichnet die Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie seit 2021 herausragende Doktorarbeiten auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie mit dem Sigrid Peyerimhoff-Promotionspreis aus.



☐ ANTRAG AUF MITGLIEDSCHAFT ☐ ÄNDERUNGSMITTEILUNG Mitgliedsnummer: _____

in der **Deutschen Bunsen-Gesellschaft für physikalische Chemie e. V.**

- | | Jahresbeitrag |
|---|---------------|
| ☐ persönliches, studentisches Mitglied ^{1,2} (Bunsen-Magazin nur online) | 0,- € |
| ☐ persönliches, studentisches Mitglied ^{1,2} (Bunsen-Magazin gedruckt) | 30,- € |
| ☐ persönliches Jungmitglied ² (bis zu 3 Jahren nach Studienabschluss) | 75,- € |
| ☐ persönliches Doppelmitglied (Mitgliedschaft bei DECHEMA, DPG, GDCh oder GBM; Mitglieds-Nr.: _____) | 90,- € |
| ☐ persönliches, ordentliches Mitglied | 120,- € |
| ☐ nichtpersönliches Mitglied (Institute, Bibliotheken, Firmen usw.) | 580,- € |

in der **Deutschen Flüssigkristall-Gesellschaft (DFKG)**

- | | |
|---|---------|
| ☐ persönliches, studentisches Mitglied ¹ | 0,- € |
| ☐ persönliches, ordentliches Mitglied | 25,- € |
| ☐ persönliches, ordentliches Mitglied (keine DBG-Mitgliedschaft) | 40,- € |
| ☐ institutionelle Mitglieder | 150,- € |

in der **AG Theoretische Chemie (AGTC)**

- | | |
|--|--------|
| ☐ persönliches, ordentliches Mitglied | 13,- € |
|--|--------|

¹ Studienbescheinigung erforderlich, ² inkl. Mitgliedschaft bei der young Physical Chemists (yPC, Nachwuchsorganisation der DBG)

Daten zur Person

Titel/Vorname/Name _____ Geburtsdatum _____
(TT/MM/JJJJ)

☐ Privat ☐ Dienstlich

Institution/ Firma _____

Adresszusatz _____

Straße _____

PLZ/Ort/Land _____

Telefonnummer _____ E-Mail _____

Datenschutzhinweise / Einwilligungserklärung

Ihre personenbezogenen Daten werden von der Deutschen Bunsen-Gesellschaft (DBG) gemäß der europäischen Datenschutzgrundverordnung (DSGVO) und dem deutschen Datenschutzrecht (BDSG) für die Begründung und Verwaltung Ihrer Mitgliedschaft erhoben, verarbeitet und genutzt. Im Rahmen dieser Zweckbestimmungen werden Ihre Daten ausschließlich zur Erfüllung der satzungsgemäßen Aufgaben (<https://bunsen.de/wir-ueber-uns/satzung>) und der Mitgliederbetreuung an diesbezüglich besonders Beauftragte weitergegeben und genutzt. Sie können jederzeit Auskunft über Ihre personenbezogenen Daten erhalten, sowie die Berichtigung, Löschung oder Sperrung für die Zukunft vornehmen. Weitere Hinweise zum Datenschutz finden Sie unter <https://bunsen.de/datenschutzerklaerung>.

Ich willige ein, dass mein Geburtsdatum in die im Bunsen-Magazin veröffentlichte Geburtstagsliste aufgenommen wird.

☐ ja ☐ nein

Ich willige ein, dass mein Geburtsdatum und meine Adress- und Kommunikationsdaten in Onlinemitgliederverzeichnisse der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für physikalische Chemie aufgenommen werden.

☐ ja ☐ nein

Hiermit ☐ erkläre ich meinen Beitritt zur DBG/ ☐ zeige ich Änderungen meiner Daten an³ und nehme die Datenschutzhinweise sowie die Satzung zur Kenntnis.

Ort/Datum _____

Unterschrift _____
³ zutreffendes bitte ankreuzen

Erteilung eines SEPA-Lastschriftmandats

Deutsche Bunsen-Gesellschaft für physikalische Chemie e.V.
Gläubiger-Identifikationsnummer: DE 15ZZZ00000522723
Mandatsreferenz = Mitgliedsnummer

Titel/Vorname/Name _____

Ich ermächtige die DBG meine Mitgliedsbeiträge zu Lasten des angegebenen Kontos einzuziehen. Zugleich weise ich mein Kreditinstitut an, die von der DBG auf mein Konto gezogenen Lastschriften einzulösen.

Straße und Hausnummer _____

Hinweis: Ich kann innerhalb von acht Wochen, beginnend mit dem Belastungsdatum, die Erstattung des belasteten Betrages verlangen. Es gelten dabei die vom Kreditinstitut vereinbarten Bedingungen. Einen Wechsel oder Löschen des Kontos teile ich der DBG unverzüglich mit.

PLZ/Ort _____

IBAN _____

Kreditinstitut _____

BIC _____

Ort/ Datum _____

Unterschrift _____

