



Techno-Ökonomie



Life Cycle Assessment



Industrie



CO₂-
Abtrennung



CO₂



H₂



Elektrolyseur



Synthese



e-Fuel



MeOH



DME



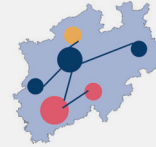
OME₃₋₅



Soziale Akzeptanz



Industrielle Cluster



Schlussbericht Accelerating Low-carbon Industrial Growth through CCUS (ALIGN-CCUS)

Energie & Umwelt / Energy & Environment

Band / Volume 581

ISBN 978-3-95806-632-8

Forschungszentrum Jülich GmbH
Institut für Energie- und Klimaforschung
Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-14)

Schlussbericht

Accelerating Low-carbon Industrial Growth through CCUS (ALIGN-CCUS)

Stefan Weiske, Steffen Schemme, Remzi Can Samsun,
Ralf Peters, Steffanie Troy, Simon Morgenthaler,
Diana Schumann, Petra Zapp

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek.
Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der
Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte Bibliografische Daten
sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Herausgeber
und Vertrieb: Forschungszentrum Jülich GmbH
Zentralbibliothek, Verlag
52425 Jülich
Tel.: +49 2461 61-5368
Fax: +49 2461 61-6103
zb-publikation@fz-juelich.de
www.fz-juelich.de/zb

Umschlaggestaltung: Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich GmbH

Druck: Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich GmbH

Copyright: Forschungszentrum Jülich 2022

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment, Band / Volume 581

ISSN 1866-1793
ISBN 978-3-95806-632-8

Vollständig frei verfügbar über das Publikationsportal des Forschungszentrums Jülich (JuSER)
unter www.fz-juelich.de/zb/openaccess.



This is an Open Access publication distributed under the terms of the [Creative Commons Attribution License 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/),
which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Gefördert durch:



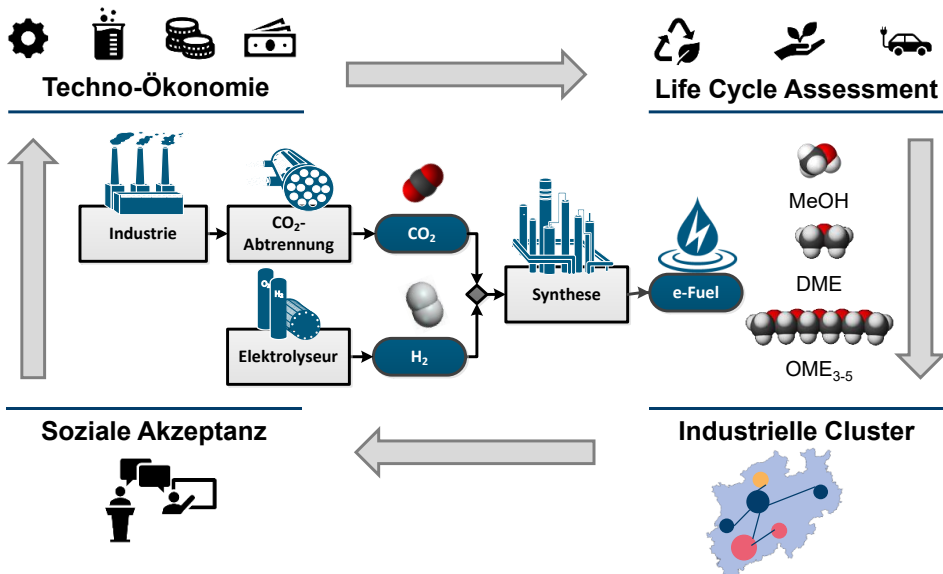
aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages



Schlussbericht

Accelerating Low- carbon Industrial Growth through CCUS (ALIGN-CCUS)

ACT ALIGN – CCUS – Beschleunigung des Wachstums CO₂-armer Industrien durch CCUS



Autoren

Stefan Weiske^a, Steffen Schemme^a, Remzi Can Samsun^a, Ralf Peters^a

Steffanie Troy^b, Simon Morgenthaler^b, Diana Schumann^b, Petra Zapp^b

^a Forschungszentrum Jülich GmbH,
Institut für Energie- und Klimaforschung
Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-14)

^b Forschungszentrum Jülich GmbH,
Institut für Energie- und Klimaforschung
Systemforschung und Technologische Entwicklung (IEK-STE)

Inhaltsverzeichnis

ABBILDUNGSVERZEICHNIS.....	7
TABELLENVERZEICHNIS	13
ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS	15
1 KURZDARSTELLUNG	19
1.1 AUFGABENSTELLUNG.....	19
1.2 VORAUSSETZUNGEN, UNTER DENEN DAS VORHABEN DURCHGEFÜHRT WURDE....	20
1.3 PLANUNG UND ABLAUF DES VORHABENS	21
1.4 WISSENSCHAFTLICHER UND TECHNISCHER STAND, AN DEN ANGEKNÜPFT WURDE	23
1.4.1 Techno-Ökonomie von Power-to-Fuel Kraftstoffen	23
1.4.2 Life-Cycle-Assessment von Power-to-Fuel Kraftstoffen	27
1.4.3 Industriecluster Nordrhein-Westfalen	28
1.4.4 Soziale Akzeptanzforschung von CCUS	29
1.5 ZUSAMMENARBEIT MIT ANDEREN STELLEN	31
1.5.1 Integrale Analyse der Demonstratortechnologie (WP4)	31
1.5.2 Industriecluster Nordrhein-Westfalen (WP5)	34
1.5.3 Soziale Akzeptanzforschung (WP6).....	34
2 EINGEHENDE DARSTELLUNGEN ZU DEN ERZIELTEN	
ERGEBNISSEN	37
2.1 TECHNISCHE ANALYSE DER HERSTELLUNGSVERFAHREN DER KRAFTSTOFFE	37
2.1.1 Randbedingungen der verfahrenstechnischen Analysen	37
2.1.2 Bereitstellung von nachhaltigem H ₂ und CO ₂	40
2.1.3 Methanolherstellung als Basisverfahren für alternative Kraftstoffsynthesen	41
2.1.4 Konventionelle Synthese von Dimethylether (DME).....	43
2.1.5 Innovative Direktsynthese von Dimethylether (DME) aus H ₂ und CO ₂	46
2.1.6 Verfahrenstechnische Analysen zur Optimierung der Demonstratortechnologie durch die Synthesen von langkettigen Polyoxymethyldimethylether (OME ₃₋₅)	50
2.1.6.1 Synthese von Formaldehyd	53
2.1.6.2 Synthese von Trioxan	54
2.1.6.3 Synthese von kurzketigen Polyoxymethyldimethylether (OME ₁).....	57
2.1.6.4 Synthese von langkettigen Polyoxymethyldimethylether (OME ₃₋₅) nach Route A	59
2.1.7 Zusammenfassung der technischen Analyse von PtF-Produktionswegen	67

2.2	ÖKONOMISCHE ANALYSE VON POWER-TO-FUEL HERSTELLUNGSPFADEN	71
2.2.1	Systementwurf einer integrierten Produktionsanlage	71
2.2.2	Bereitstellungskosten von erneuerbarem H ₂	73
2.2.3	Bereitstellungskosten von CO ₂ aus industriellen Abgasen	76
2.2.4	Skalierung und Investitionskosten der PtF-Produktionssysteme	78
2.2.5	Produktgestehungskosten der PtF-Kraftstoffe	80
2.2.6	Schlussfolgerungen der techno-ökonomischen Bewertung von PtF-Kraftstoffsynthesen	83
2.3	LIFE CYCLE ASSESSMENT DER DEMONSTRORTECHNOLOGIE	87
2.3.1	Goal and Scope Definition	87
2.3.1.1	Funktionelle Einheit	87
2.3.1.2	Allokation der CO ₂ -Abscheideaufwendungen	87
2.3.1.3	Datenquellen	87
2.3.1.4	Wirkungskategorien	88
2.3.2	Systembeschreibung	88
2.3.2.1	Benchmark Systeme	89
2.3.2.2	Szenarien	89
2.3.3	Ergebnisse	91
2.3.3.1	CCU-Mobilität	91
2.3.3.2	CCU-Peak-Power	99
2.3.4	Schlussfolgerung der ökologischen Bewertung des Demonstrators	106
2.4	INDUSTRIECLUSTER NRW	109
2.4.1	Industrielle CO ₂ -Quellen	109
2.4.1	Industrielle H ₂ -Quellen	115
2.4.2	Zukünftiger Bedarf an DME	117
2.4.3	Mögliche CCU-Systeme	121
2.4.4	Systembeschreibung des großskaligen Systems	122
2.4.5	Systembeschreibung des kleinskaligen Systems	123
2.4.6	Techno-ökonomische Parameter und weitere Annahmen zur Modellbildung	125
2.4.7	Ergebnisse zur großskaligen Anlage mit Netzanschluss	131
2.4.7.1	Kapazitäten, Stoff- und Energiebilanz	131
2.4.7.2	Kostenaufteilung	131
2.4.7.3	CO ₂ -Emissionsbilanz	133
2.4.7.4	Elastizität	134
2.4.7.5	Einfluss des Stromversorgungspreises	135
2.4.7.6	Einfluss des CO ₂ -Fußabdrucks des Netzstroms	135
2.4.7.7	Sauerstoffvergütung	136
2.4.8	Ergebnisse zum kleinskaligen Inselfsystem	137
2.4.8.1	Kostenoptimaler Kapazitätsmix und Speichergößen	137
2.4.8.2	Kostenaufteilung des kleinskaligen Systems	138
2.4.8.3	Auslastung, Speicherbetrieb und Füllstände	139
2.4.8.4	Abregelung	141

2.4.8.5	Elastizität	143
2.4.8.6	Flexibilität des DME-Reaktors	144
2.4.9	Vergleich der Ergebnisse im Rahmen des ALIGN-CCUS-Projekts	147
2.4.9.1	Wasserstoffproduktionskosten	148
2.4.9.2	DME-Produktionskosten.....	149
2.4.9.3	Hauptannahmen und Ergebnisse der beiden Ansätze.....	150
2.4.10	Diskussion und Schlussfolgerung	153
2.5	STAKEHOLDER-WAHRNEHMUNGEN VON CCUS IN DEUTSCHLAND UND RUMÄNIEN	
	WP 6 SOZIALFORSCHUNG.....	155
2.5.1	Ansatz und Ziele	155
2.5.2	Stakeholder-Identifikation in Deutschland und Rumänien	155
2.5.2.1	Stakeholder in Deutschland	156
2.5.2.2	Stakeholder in Rumänien	156
2.5.3	Stakeholder-Interviews und Interviewanalyse	157
2.5.3.1	Ablauf des Interviews	157
2.5.3.2	Interviewanalyse in Deutschland und Rumänien	158
2.5.4	Ergebnisse	158
2.5.4.1	Stakeholder-Wahrnehmungen in Deutschland	158
2.5.4.2	Stakeholder-Wahrnehmungen in Rumänien.....	167
2.5.5	Diskussion und Schlussfolgerungen der sozialen Begleitforschung.....	174
2.5.5.1	Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse	174
2.5.5.2	Vergleich der Stakeholder Wahrnehmungen von CCUS in Deutschland und Rumänien	176
2.5.5.3	Theoretische und praktische Implikationen.....	178
2.6	ENTWICKLUNG EINES ABGASNACHBEHANDLUNGSSYSTEMS AUF BASIS VON KATALYTISCHER VERBRENNUNG.....	181
2.6.1	Funktionsprinzip der Katalytbrenner	182
2.6.2	Randbedingungen aus dem Betrieb der DME-Syntheseanlage	183
2.6.3	Prüfung der Betriebsparameter auf Zulässigkeit	183
2.6.3.1	Einhaltung der maximalen Betriebstemperaturen	184
2.6.3.2	Zündtemperatur und Explosionsgrenzen	184
2.6.3.3	Flammenfront.....	185
2.6.4	Analyse der Betriebsfälle	185
2.6.5	Maximaler Wasserstoffmassenstrom	186
2.6.6	Schlussfolgerungen und Fazit.....	188
3	DARSTELLUNG DES NUTZENS UND DER VERWERTBARKEIT	189
3.1	FORTSCHREIBUNG DES VERWERTUNGSPLANES.....	189
3.1.1	Erfindungen/Schutzrechtsanmeldungen/erteilte Schutzrechte	189
3.1.2	Wirtschaftliche Erfolgsaussichten nach Projektende	189

3.1.3	Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten	190
3.2	FORTSCHRITT AUF DEM GEBIET DES VORHABENS BEI ANDEREN STELLEN	191
3.2.1	Literaturanalyse zu begleitenden Veröffentlichungen im Bereich der Verfahrensanalysen	191
3.2.1.1	Methanol-Synthese	191
3.2.1.2	DME-Synthesen	192
3.2.1.3	OME ₃₋₅ -Synthesen	192
3.2.2	Literaturanalyse zu begleitenden Veröffentlichungen im Bereich der Ökonomie von alternativen Kraftstoffen	194
3.2.3	Literaturanalyse zu begleitenden Veröffentlichungen im Bereich der LCA- Analysen von alternativen Kraftstoffen	195
3.2.4	Literaturanalyse zu begleitenden Veröffentlichungen im Bereich der industriellen Clusterforschung	197
3.2.5	Literaturanalyse zu begleitenden Veröffentlichungen im Bereich der sozialen Begleitforschung	198
3.3	ERFOLGTE UND GEPLANTE VERÖFFENTLICHUNGEN	201
LITERATURVERZEICHNIS		207

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Überblick der Arbeitspakete im ALIGN-CCUS Projekt, entnommen aus Annex 1 Grant Application S.25	21
Abbildung 2:	Projektstrukturplan (PSP) des Forschungszentrums Jülich im ALIGN-CCUS Projekt.....	23
Abbildung 3:	Ausgewählte Kraftstoffproduktionspfade im ALIGN-CCUS Projekt (WP4), eigene Darstellung nach Burger [15, S.7].....	25
Abbildung 4:	Beispiel für die Variabilität der Vorhersagegenauigkeit von verfahrenstechnischen Schätzungen, eigene Darstellung nach den Vorgaben der AACE [25], grau gestrichelter Bereich markiert die Klasse 4	26
Abbildung 5:	Wärmeintegration am Verbundstandort durch Dampfströme mit definierten Druckstufen	38
Abbildung 6:	Systemgrenzen der techno-ökonomischen Bewertung von PtF-Herstellungspfaden	38
Abbildung 7:	Prozessfließbild der CO ₂ -Wäsche mittels MEA	40
Abbildung 8:	Spezifische Energiebedarfe zur Abscheidung von CO ₂ mittel MEA aus industriellen Rauchgasen	41
Abbildung 9:	Prozessfließbild der CO ₂ -basierten Methanolsynthese, Prozessentwurf basiert auf Schemme [63]	43
Abbildung 10:	Kohlenstoffumsatz in Abhängigkeit von Methanol und direkter DME-Synthese bei unterschiedlichen Frischgaszusammensetzungen, eigene Simulationsdaten aus Prozesssimulation mit ASPEN Plus®, linke Seite wurde nach Renk [75, S.29] aufgebaut	44
Abbildung 11:	Prozessfließbild der 2-stufigen DME-Synthese	45
Abbildung 12:	Produktaufbereitung durch Kolonne K-1 in der 2-stufigen DME-Synthese	46
Abbildung 13:	Verfahrensfließbild der direkten DME-Synthese	47
Abbildung 14:	Sensitivitätsstudie der Leistungsgrößen des Reaktors R-1 zur direkten DME-Synthese	48
Abbildung 15:	Abschätzung der Auswirkungen einer in-situ Wasserabscheidung auf den Wirkungsgrad der direkten DME-Synthese.....	50
Abbildung 16:	Herausforderungen der Modellierung für die Simulation von OME ₃₋₅ -Herstellungspfaden, Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichtsmodell ist von Maurer [76] adaptiert, eigene Darstellung	51
Abbildung 17:	Validierung der VLE-Vorhersage des implementierten Modellierungsansatz im Vergleich mit Daten nach Maurer [76]	52
Abbildung 18:	Verfahrensfließbild der entwickelten Trioxansynthese	56
Abbildung 19:	Verfahrensfließbild der OME ₁ -Synthese	58
Abbildung 20:	Konzentrationsprofil der Kolonne K-1 innerhalb der Synthese von OME ₁	59
Abbildung 21:	Verfahrensfließbild der OME ₃₋₅ -Synthese nach Route A.....	60
Abbildung 22:	Validierung des Reaktorsmodells und des implementierten Modellierungsansatzes der OME ₃₋₅ Synthese nach Route A. Die Ergebnisse der Prozesssimulationen werden mit den Daten von Schmitz et al. [20] verglichen.....	60
Abbildung 23:	Verfahrensfließbild der OME ₃₋₅ -Synthese nach Route B.....	63
Abbildung 24:	Validierung der Produkttrennung im Herstellungsverfahren von OME ₃₋₅ nach Route B, Validierungsdaten sind Burger et al. [86] entnommen.....	64
Abbildung 25:	Validierung der Produkttrennung im Herstellungsverfahren von OME ₃₋₅ nach Route B anhand des Temperaturprofils der Kolonne K-1, Validierungsdaten sind Burger et al. [86] entnommen	64

Abbildung 26:	Vergleich der Produktverteilungen von Prozesssimulation und Experimenten von Haltenort et al. [87] für die Synthese von OME ₃₋₅ nach Route C	66
Abbildung 27:	Verfahrensfließbild der OME ₃₋₅ -Synthese nach Route C, veröffentlicht in der Dissertation von Schemme [63].....	66
Abbildung 28:	Vergleich der Massenanteile innerhalb der OME ₃₋₅ -Produktmischungen, Daten wurden einem internen Prüfbericht von ASG Analytics GmbH [88] und Burger et al. [86] entnommen	67
Abbildung 29:	Sensitivitätsanalyse der Wirkungsgrade von PtF-Produktionssystemen in Abhängigkeit der Parametrisierung der Elektrolyse und der CO ₂ -Abtrennung	69
Abbildung 30:	Kostenabschätzung für die Gesteuerung von Elektrizität aus erneuerbaren Quellen in Deutschland	74
Abbildung 31:	Sensitivitätsstudie der Produktgestehungskosten von H ₂ auf Basis von erneuerbaren Energien	75
Abbildung 32:	Sensitivitätsstudie zu den Kosten der CO ₂ -Abscheidung.....	77
Abbildung 33:	Vergleich zwischen spezifischen Investitionskosten in einer Methanolsyntheseanlage mit variabler Produktionskapazität, die Referenzwerte sind der Arbeit von Brynolf et al. [92] entnommen	79
Abbildung 34:	Skalierung der Syntheseeinheiten innerhalb des PtF-Produktionssystems anhand des Beispiels der OME ₃₋₅ -Synthese nach Route C.....	79
Abbildung 35:	Investmentkosten (FCI) für die Produktion von alternativen Kraftstoffen im Maßstab von 300 MW _{th} Syntheseleistung, Minimum und Maximum ist nach Klasse 4 der Klassifizierung der AACE übertragen	80
Abbildung 36:	Vergleich der Produktgestehungskosten von alternativen Kraftstoffproduktionssystemen mit einer Syntheseleistung von 300 MW _{th}	81
Abbildung 37:	Sensitivitätsstudien zu den Kostenbestandteilen von DME und OME ₃₋₅ nach Route C, Bestandteile wurden ±50 % variiert (Basissatz: 4,6 €/kg _{H2} ; 70 €/t _{CO2} ; 0,0976 €/kWh; i = 8 %).....	82
Abbildung 38:	Vergleich der Produktionskosten für alternative und konventionelle Kraftstoffe, die Daten für die konventionellen Kraftstoffe wurden aus dem jährlichen Bericht des deutschen Mineralölwirtschaftsverbandes (M WV) [104] adaptiert.	82
Abbildung 39:	Energiebedarfe und PtF-Wirkungsgrade der analysierten Kraftstoffproduktionen (η _{el} =0,7; e _{CO2} =3 MJ/kg _{CO2}).....	84
Abbildung 40:	LCA-Systemgrenzen des CCU-Demonstrators in Niederaußem. hellblau: in Niederaußem installierte Komponenten des Demonstrators, gelb schraffiert: modellierte Komponenten	89
Abbildung 41:	Treibhauspotential (GWP, kg CO ₂ -Äqv./km) für das Mobilitätsszenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie, PP = power plant, CC = carbon-capture.....	92
Abbildung 42:	Netto-Treibhauspotential (Net GWP, kg CO ₂ -Äqv./km) für das Mobilitätsszenario. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie.	93
Abbildung 43:	Feinstaubbildung (PM, g PM-Äqv./km) für das Mobilitätsszenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette.	

	Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie, PP = power plant, CC = carbon capture.....	94
Abbildung 44:	Erschöpfung fossiler Ressourcen (FDP, g Öl-Äqv./km) für das Mobilitätsszenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie, PP = power plant, CC = carbon capture.....	95
Abbildung 45:	Sommersmogbildung, Ökosysteme (POCP _e , g NO _x -Äqv./km) für das Mobilitätsszenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie, PP = power plant, CC = carbon capture.....	96
Abbildung 46:	Sommersmogbildung, Human Health (POCP _h , g NO _x -Äqv./km) für das Mobilitätsszenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie, PP = power plant, CC = carbon capture.....	98
Abbildung 47:	Terrestrische Versauerung, (AP, g SO ₂ -Äqv./km) für das Mobilitätsszenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie PP = power plant, CC = carbon capture.....	99
Abbildung 48:	Treibhauspotential, (GWP, g CO ₂ -Äqv./kWh) für das Peak Power Szenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und CO ₂ Abscheidung mit Windenergie; EGR = mit Abgasrückführung, PP = power plant, CC = carbon capture.....	100
Abbildung 49:	Netto-Treibhauspotential, (Net GWP, g CO ₂ -eqv./kWh) für das Peak Power Szenario. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und CO ₂ Abscheidung mit Windenergie, EGR = mit Abgasrückführung.....	101
Abbildung 50:	Feinstaubbildung (PM, g PM-Äqv./kWh) für das Peak Power Szenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und CO ₂ Abscheidung mit Windenergie, EGR = mit Abgasrückführung, PP = power plant (PP), CC = carbon capture.....	102
Abbildung 51:	Erschöpfung fossiler Ressourcen (FDP, g Öl-Äqv./kWh) für das Peak Power Szenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und	

	CO ₂ Abscheidung mit Windenergie, EGR = mit Abgasrückführung, PP = power plant, CC = carbon capture.....	103
Abbildung 52:	Sommersmogbildung, Ökosysteme (POCP _e , g NO _x -Äqv./kWh) für das Peak Power Szenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und CO ₂ Abscheidung mit Windenergie, EGR = mit Abgasrückführung, PP = power plant, CC = carbon capture.....	104
Abbildung 53:	Sommersmogbildung, Human Health (POCP _h , g NO _x -Äqv./kWh) für das Peak Power Szenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und CO ₂ Abscheidung mit Windenergie, EGR = mit Abgasrückführung, PP = power plant, CC = carbon capture.....	105
Abbildung 54:	Terrestrische Versauerung (AP, g SO ₂ -Äqv./kWh) für das Peak Power Szenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und CO ₂ Abscheidung mit Windenergie, EGR = mit Abgasrückführung, PP = power plant, CC = carbon capture.	106
Abbildung 55:	Räumliche Verteilung der Kohlenstoffdioxid-Quellen in Nordrhein-Westfalen. Die Farben geben jeweils den Industriezweig nach NACE-Klassifizierung an, eigene Darstellung basierend auf Bericht der Europäischen Umweltagentur [117].	110
Abbildung 56:	Analysebeispiel potenzieller Verunreinigungen am Beispiel eines Stahlwerkes	111
Abbildung 57:	Vergleich des absoluten Stickoxid-Ausstoßes (links) und des auf den CO ₂ -Ausstoß normierten Stickoxid-Ausstoßes (rechts) der dokumentierten Müllverbrennungsanlagen (pro Anlage ein Balken, x-Achse) in Nordrhein-Westfalen.....	112
Abbildung 58:	Entwicklung der absoluten Kohlenstoffdioxidemissionen in Nordrhein-Westfalen nach Industriezweig.....	114
Abbildung 59:	Räumliche Aufteilung der installierter Photovoltaik-Kapazität in Nordrhein-Westfalen	116
Abbildung 60:	Räumliche Aufteilung der installierten Wind-Kapazität in Nordrhein-Westfalen.....	117
Abbildung 61:	Stromlast-Zeitreihe für vier Wochen in Deutschland aus dem Jahr 2015	118
Abbildung 62:	Stromlast-Zeitreihe für vier Wochen in Deutschland aus dem Jahr 2015 (farbliche Markierung potenzieller Spitzenlast auf einem 95%-Niveau) ...	118
Abbildung 63:	Bedarf an Spitzenlasterzeugung in Nordrhein-Westfalen in Abhängigkeit des Tagesspitzenlast-Schwellenwertes	119
Abbildung 64:	DME-Menge als Funktion des Verbrennungsprozesses für die Erzeugung 1 TWh Strom (links) sowie der Zusammenhang zwischen DME-Menge und notwendigen CO ₂ -Mengen für die DME-Synthese (rechts).....	120
Abbildung 65:	Verwendung von synthetischen Kraftstoffen nach Kraftstoffart und geografischer Herkunft der synthetischen Kraftstoffe, basierend auf dem Bericht der ewi Energy Research & Scenarios GmbH [124]	121

Abbildung 66:	Projizierter DME-Bedarf und korrespondierender CO ₂ -Bedarf.....	121
Abbildung 67:	Durchschnittlicher Emissionsfaktor des Netzstromes für Deutschland und Nordrhein-Westfalen von 2012 - 2015.....	123
Abbildung 68:	Schematische Prozesskette des betrachteten großskaligen generischen Systems.....	123
Abbildung 69:	Schematische Prozesskette des betrachteten kleinskaligen generischen Systems.....	124
Abbildung 70:	Regionales Einspeisepotential für Wind (links) und PV (rechts) dargestellt als durchschnittliche Kapazitätsfaktoren	125
Abbildung 71:	Detailliertes Einspeiseprofil für Photovoltaik (oben) und Windenergie (unten), DEA2, 2016	125
Abbildung 72:	Stoff- und Energiebilanz für alle Systemkomponenten für das großskalige System (Werte sind gerundet) (t/h, Tonnen pro Stunde)	131
Abbildung 73:	Kostenaufteilung für alle Systemkomponenten des großskaligen Systems	132
Abbildung 74:	CO ₂ -Emissionsbilanz des großskaligen Systems	133
Abbildung 75:	Ergebnisse der Elastizitätsberechnungen für das großskalige System....	134
Abbildung 76:	DME-Gestehungskosten als Funktion des Strompreises.....	135
Abbildung 77:	CO ₂ -Emissionsbilanz als Funktion des CO ₂ -Fußabdrucks des Netzstroms.....	136
Abbildung 78:	DME-Gestehungskosten als Funktion einer möglichen Vergütung des produzierten Sauerstoffs	137
Abbildung 79:	Kostenoptimalen Kapazitäten und Speichergroößen (Modellierungsergebnis) des kleinskaligen Systems	138
Abbildung 80:	Kostenaufteilung für alle Systemkomponenten des kleinskaligen Systems	139
Abbildung 81:	Lastverhalten pro Stunde von (a) dem Elektrolyseur und (b) dem DME-Reaktor über den Zeitraum von einem Jahr	140
Abbildung 82:	Füllstand [%] und Verbrauch von (a) der Batterie und (b) des Wasserstoffspeichers pro Stunde über den Zeitraum eines Jahres	141
Abbildung 83:	Die kumulierte Abregelung ist die Differenz zwischen dem Stromerzeugungspotenzial und der tatsächlichen Stromerzeugung (hier ca. 20 % des Gesamtpotentials).....	142
Abbildung 84:	Geclusterte Abregelungs-Zeitreihe mit Lasthöhen und der Häufigkeit des Auftretens. Wenn der abgeregelte Strom für andere Prozesse genutzt werden soll, könnte ein typisches Erzeugungprofil wie die dargestellten geclusterten Daten aussehen.....	143
Abbildung 85:	Ergebnisse der Elastizitätsberechnungen für das kleinskalige System....	144
Abbildung 86:	DME-Gestehungskosten als Funktion der Flexibilität des DME-Reaktors (abgebildet als Minimallast).....	145
Abbildung 87:	Speichergroößen (für Batterie und Wasserstoffspeicher) in Abhängigkeit von der Mindestlast des DME-Reaktors	145
Abbildung 88:	Durchschnittliches Lastniveau des Elektrolyseurs und des DME-Reaktors und daraus resultierende Kürzung in Abhängigkeit von der Mindestlast des DME-Reaktors	146
Abbildung 89:	Prinzipielles Schema für die groß- und kleinskalige Produktion von DME in den Arbeitspaketen 4.4.2 und 5.3	148
Abbildung 90:	Abbildung der Wasserstoffproduktionskosten auf Basis verschiedener Parametersätze (A. IEK-14 Arbeitspaket 4.4.2, oben links und B. IEK-STE, Arbeitspaket 5.3 oben rechts, C. direkter Vergleich unten)	149
Abbildung 91:	Häufigkeit der von den Stakeholdern in Deutschland genannten Vorteile der CCUS-Implementierung	162

Abbildung 92:	Häufigkeit der Stakeholder-Erwähnung von Risiken für die CCUS-Implementierung in Deutschland	164
Abbildung 93:	Häufigkeit der von den Stakeholdern in Deutschland genannten Herausforderungen für die CCUS-Implementierung	165
Abbildung 94:	Häufigkeit der von den Stakeholdern genannten Chancen für die CCUS-Implementierung in Deutschland	166
Abbildung 95:	Häufigkeit der Nennungen der Stakeholder von Faktoren, die die öffentliche Akzeptanz für die Implementierung von CCUS in Deutschland erhöhen könnten	167
Abbildung 96:	Häufigkeit der von den Stakeholdern in Rumänien genannten Herausforderungen für die CCUS-Implementierung	170
Abbildung 97:	Häufigkeit der von den Stakeholdern in Rumänien genannten Aspekte für die CCUS-Unterstützung	171
Abbildung 98:	Häufigkeit der Stakeholder-Erwähnung von Risiken für die CCUS-Implementierung in Rumänien	172
Abbildung 99:	Häufigkeit der Nennungen der Stakeholder von Faktoren, die die öffentliche Akzeptanz für die Implementierung von CCUS in Rumänien erhöhen könnten	173
Abbildung 100:	Hauptfaktoren und Themen, die bei der Interviewanalyse in Rumänien identifiziert wurden	174
Abbildung 101:	Technische Zeichnung des Katalytbrenners (CAB 4) in der Ausführungsversion 2	182
Abbildung 102:	Hotspot-Analyse der Katalytbrenner (CAB 4) im Betrieb als PGT-System des DME-Demonstrators	184
Abbildung 103:	Geschwindigkeitsprofil im Katalytbrenner für den Betriebsfall 2	185
Abbildung 104:	Adiabate Verbrennungstemperatur und Umsätze von Wasserstoff und Sauerstoff in Abhängigkeit des Luftvolumenstroms für den Betrieb mit 0,9 kg/h Wasserstoff	187
Abbildung 105:	Temperaturverteilung im CAB 4 beim Betrieb mit 0,9 kg/h Wasserstoff	188

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Zielsetzungen der Arbeitspakete mit FZJ-Beteiligung im ALIGN-CCUS Projekt.....	22
Tabelle 2:	Übersicht der Kooperationen zwischen den beteiligten Partnern zur LCA, Teil 1	32
Tabelle 3:	Parametrisierung der entwickelten Verfahren	39
Tabelle 4:	Zusammenfassung der unteren Heizwerte für die Prozessbilanzierung	40
Tabelle 5:	Prozesseigenschaften der CO ₂ -basierten Methanolsynthese	42
Tabelle 6:	Prozessbewertung der CO ₂ -basierten Methanolsynthese	43
Tabelle 7:	Prozesseigenschaften der zweistufigen DME-Synthese	44
Tabelle 8:	Prozessbewertung der zweistufigen DME-Synthese	46
Tabelle 9:	Verfahrenseigenschaften der direkten DME-Synthese	47
Tabelle 10:	Prozessbewertung der direkten DME-Synthese	49
Tabelle 11:	Verfahrenseigenschaften der Formaldehydsynthese nach dem Silberkatalysatorverfahren	53
Tabelle 12:	Prozessbilanzierung der entwickelten Formaldehydsyntheseverfahren	54
Tabelle 13:	Verfahrenseigenschaften der Trioxansynthese nach dem Verfahren von Grützner [82]	55
Tabelle 14:	Prozessbewertungen des entwickelten Trioxansyntheseverfahrens	56
Tabelle 15:	Prozessbewertungen des entwickelten OME ₁ -Syntheseverfahrens	59
Tabelle 16:	Prozessbewertungen des entwickelten OME ₃₋₅ -Syntheseverfahrens nach Route A	62
Tabelle 17:	Prozessbewertungen des entwickelten OME ₃₋₅ -Syntheseverfahrens nach Route B	65
Tabelle 18:	Prozessbewertungen des entwickelten OME ₃₋₅ -Syntheseverfahrens nach Route C	67
Tabelle 19:	Zusammenfassung der Energiebedarfe und PtF-Wirkungsgrade der untersuchten Produktionssysteme ($\eta_{EI}=0,7$; $e_{CO_2}=3 \text{ MJ/kg}_{CO_2}$)	68
Tabelle 20:	Randbedingungen der ökonomischen Analyse von PtF-Produktionssystemen	72
Tabelle 21:	Parametersätze für die Analyse von Gestehungskosten von Elektrizität aus EE-Anlagen	73
Tabelle 22:	Parametrisierung für die Analyse von Produktgestehungskosten von erneuerbarem H ₂	75
Tabelle 23:	Parameterisierung für die Analyse von Produktgestehungskosten aus industriellen Rauchgasen abgetrennten CO ₂	77
Tabelle 24:	Übersicht über die Spalten der E-PRTR Datenbank inklusive einer kurzen Beschreibung	112
Tabelle 25:	Abgeschätzte Emissionsfaktoren für die verschiedenen Industriezweige	114
Tabelle 26:	Produktionsstandort für industrielle Chlor-Produktion in Nordrhein-Westfalen sowie die korrespondierende Wasserstoffmenge (nach Eurochlor [120])	115
Tabelle 27:	Übersicht über die verwendeten Heiz- und Brennwerte von Wasserstoff und DME	126
Tabelle 28:	Übersicht über die verwendeten techno-ökonomischen Parameter für die Modellierung der beiden generischen CCU-Systeme	128
Tabelle 29:	Annualisierte Gesamtkosten pro Systemkomponente des großskaligen Systems	132
Tabelle 30:	Spezifische CO ₂ -Bereitstellungskosten (Modellierungsergebnis) für das großskalige System	133

Tabelle 31:	Annualisierte Gesamtkosten für alle Systemkomponenten des kleinskaligen Systems.....	139
Tabelle 32:	Hauptannahmen, methodischer Hintergrund und Ergebnisse aus Arbeitspaket 4.2 und Arbeitspaket 5.3.....	151
Tabelle 33:	Randbedingungen der CFD-Studien	183
Tabelle 34:	Ergebnisse der Basisfallsimulationen mit einem CAB 4.....	186
Tabelle 35:	Finale Ergebnisse des PGT-System im Betrieb mit drei CAB 4.....	186
Tabelle 36:	Liste der Veröffentlichungen mit Beteiligung des Forschungszentrums Jülich aus dem ALIGN-CCUS Projekt heraus.....	201
Tabelle 37:	Liste geplanter Veröffentlichungen im Anschluss an das Ende des ALIGN-CCUS Projekt.....	202

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzungen

AAC	Annual capital costs
AACE	American Association of Cost Engineering
AP	Terrestrische Versauerung (Terrestrial Acidification Potential)
APU	Auxiliary power unit
BEIS (UK)	Ministerium für Wirtschaft, Energie und Industriestrategie (UK)
BMWi	Bundesministerium für Wirtschaft und Energie
CAB	Katalytbrenner
CFD	Computational fluid dynamics
COP	Coefficient of performance
DAC	Direct Air Capturing
DE	Deutschland
DRM	Dry Reforming of Methane
EU	Europäische Union
FCI	Fixed Capital Costs
FDP	Erschöpfung fossiler Ressourcen (Fossil Depletion Potential)
FET	Künftige und neu entstehende Technologien
FVV	Forschungsverein Verbrennungsmotoren
FZJ	Forschungszentrum Jülich GmbH
GWP	Treibhauspotenzial (Global Warming Potential)
HD	Hochdruck
HHV	Higher heating value, oberer Heizwert
IMPCA	INTERNATIONAL METHANOL PRODUCERS & CONSUMERS ASSOCIATION
LCA	Ökobilanz (Life Cycle Assessment)
LCI	Sachbilanz (Life Cycle Inventory)
LCIA	Wirkungsbilanz (Life Cycle Impact Assessment)
LHV	Lower heating value, unterer Heizwert
MD	Mitteldruck
MEA	Monoethanolamin

MWV	Mineralölwirtschaftsverband e.V.
ND	Niederdruck
NGO	Nichtregierungsorganisation (Non Governmental Organisation)
NL	Niederlanden
NO	Norwegen
OPEX	Operational expenditures
PCC	Post Combustion Capture
PCES	Property Component Estimation System
PGT	Purge gas treatment
PM	Feinstaubbildung (Fine Particulate Matter Formation)
POCP _e	Sommersmogbildung, Ecosystem (Photochemical Ozone Creation Potential, Ecosystems)
POCP _h	Sommersmogbildung, Human Health (Photochemical Ozone Creation Potential, Human Health)
PSP	Projektstrukturplan
PtJ	Projektträger Jülich
PV	Photovoltaikanlage
RO	Rumänien
RVO	Rijksdienst voor Ondernemend Nederland
rWGS	Reverse Water Gas Shift
SNG	Synthetic Natural Gas
SoA	Engl. State of the Art – Stand der Technik
THG	Treibhausgas
UEFISCDI	Unitatea Executiva Pentru Finantarea Invatamantului Superior a Cercetarii Dezvoltarii si Inovarii
UK	United Kingdom
UNIFAC	Universal Quasichemical Functional Group Activity Coefficients Modell
VI SGW	Virtuelles Institut „Strom zu Gas und Wärme“
VLE	Vapor-Liquid-Equilibrium
WKA	Windkraftanlage
WP	Work package, Arbeitspaket

Chemische Elemente und Moleküle

Ag	Silber
CO ₂	Kohlenstoffdioxid
DME	Dimethylether
Fe	Eisen
H ₂	Wasserstoff
HF	Hemiformale
MG	Methylen Glykol
Mo	Molybdän
NO _x	Stickstoffoxid
OME _n	Polyoxymethylen Dimethylether
PM 2.5	Particle matter, Staub mit einer Korngröße von 2,5 µm
SO ₂	Schwefeldioxid
THG	Treibhausgas
V	Vanadium

1 Kurzdarstellung

Die Kurzdarstellung liefert für das Verständnis des Abschlussberichts die notwendigen Grundlagen. In Abschnitt 1.1 wird die Aufgabenstellung in den allgemeinen Kontext der Energiewende und des Kampfs gegen den anthropogenen Klimawandel eingeordnet. Nachdem das Thema definiert ist, werden in Abschnitt 1.2 die Voraussetzungen geschildert, unter denen das Projekt durchgeführt wurde. Die Förderstrukturen und finanzierenden Institutionen werden genannt. Im Abschnitt 1.3 wird die Projektstruktur und die relevanten Arbeitspakete vorgestellt, um einen detaillierten Einblick in den Aufbau und die Wechselwirkungen innerhalb des ALIGN-CCUS Projekts zu ermöglichen. Für eine vollständige Darstellung der Forschungsergebnisse muss der Forschungsstand in den relevanten Themengebieten zu Beginn des Projekts dargestellt werden. Eine Literaturanalyse der Themengebiete erfolgt in Abschnitt 1.4. Die Kurzdarstellung wird durch die Beschreibung der Kooperationen des Forschungszentrums Jülich mit den Projektpartnern in Abschnitt 1.5 abgeschlossen.

1.1 Aufgabenstellung

Der anthropogene Klimawandel stellt eine der größten Herausforderungen des 21. Jahrhunderts dar. Um die Auswirkungen des Klimawandels einzuschränken haben 195 Nationen das Pariser Klimaschutzabkommen ratifiziert [1]. Das Pariser Klimaschutzabkommen definiert eine maximale Temperaturerhöhung von 2 K im Vergleich zum vorindustriellen Zeitalter als bindend. Der anthropogene Klimawandel wird maßgeblich durch den steigenden Anteil an CO₂ [2] in der Erdatmosphäre getrieben, welcher durch die Emissionen von CO₂ aus verschiedenen Quellen weiter ansteigt [3, S.16]. CO₂-Emissionen entstammen dabei zu großen Teilen aus der Verbrennung von fossilen Energieträgern.

Aus diesem Grund werden von allen beteiligten Nationen Anstrengungen unternommen, den Energieverbrauch und die damit einhergehenden CO₂-Emissionen in allen Sektoren (Energie, Industrie, Haushalt, Verkehr, etc.) zu verringern. Diese Anstrengungen können nur erfolgreich sein, wenn es gelingt, bestehende Strukturen energie-effizienter zu gestalten. Ein mögliches Lösungskonzept schlägt die Verbindung von verschiedenen Sektoren vor, auch Sektorkopplung genannt. Das Power-to-Fuel (PtF) Konzept [4] kann die Sektorkopplung im Bereich der Energiebereitstellung, Industrie und des Verkehr ermöglichen.

Für die Umsetzung eines PtF Konzepts wird ausgehend von erneuerbaren Energien (EE) in Form von Elektrizität über die Elektrolyse von Wasser Wasserstoff hergestellt. Zusammen mit aus industriellen Rauchgasen stammenden CO₂ können alternative Kraftstoffe synthetisiert werden. Diese Kraftstoffe besitzen das Potenzial die CO₂-Emissionen durch die stoffliche Wiederverwertung des CO₂ zu reduzieren. Falls nachhaltige CO₂-Quellen wie z. B. Biogasanlagen erschlossen werden, können diese Kraftstoffe in Synthese und Verbrennung CO₂-neutral bilanziert werden.

Im ALIGN Projekt wurden Wege untersucht eine vollständige CCUS-Produktionskette aufzubauen und die großskalige Implementierung solcher Technologien voranzubringen. Zu diesem Forschungsansatz konnte das Forschungszentrum Jülich auf verschiedenen Ebenen Beiträge leisten.

1.2 Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Mit ihren politischen Leitlinien legt die Europäische Union (EU) derzeit die Klimaneutralität als eines der zentralen Ziele eines europäischen Green Deals fest. Um die Partnerländer bei der Förderung von Klimaschutzmaßnahmen zu unterstützen, sind in der Vergangenheit und werden in Zukunft sowohl bilaterale als auch multilaterale Maßnahmen durchgeführt.

Die Europäische Union hat sich bisher verpflichtet, die Treibhausgasemissionen bis 2030 gegenüber 1990 um mindestens 40 % zu senken. Dies bedeutet, dass nicht nur die Stromversorgung Europas, sondern auch der industrielle Wärmebedarf – bisher meist auf Basis von Erdgas - und die damit einhergehenden Prozessemissionen zur Defossilisierung beitragen müssen. In allen Bereichen wird erwartet, dass CCUS-Technologien (Carbon Capture, Utilization and Storage) eine Schlüsselrolle spielen. Der in jüngster Vergangenheit oft verwendete Begriff der Sektorkopplung steht für den Einsatz eines Steuerungsinstruments in einem zukünftigen, auf erneuerbaren Primärenergien basierenden Energiesystem. CCUS ist ein Instrument der Sektorkopplung.

Die Technologie zur Kohlenstoffabscheidung und -speicherung ist eine Voraussetzung für die Dekarbonisierung energieintensiver Industrien, die in der EU für etwa ein Fünftel aller Treibhausgasemissionen verantwortlich sind. Gleichzeitig wurden Technologien zur Kohlenstoffabscheidung bisher nur in kleineren Maßstäben getestet und sind für die zahlreichen energieintensiven Branchen, die sie benötigen, noch nicht in großem Maßstab verfügbar. Um sich auf einen größeren CCUS-Einsatz in der Zeit nach 2030 vorzubereiten, wurden entsprechende Untersuchungen in einer Demonstrationsanlage im Projekt ALIGN-CCUS durchgeführt, um wirtschaftliche und politische Hindernisse zu beseitigen und damit die Entwicklung der wichtigsten Infrastruktur und Technologie zu unterstützen. Um das Scale-up zu fördern, sollte der Schwerpunkt zunächst auf industriellen Clustern liegen, in denen verschiedene CO₂-Quellen zu größeren Mengen kombiniert werden können. Das Verbundvorhaben ALIGN-CCUS wurde durch das Förderprogramm Horizon 2020 der Europäischen Union (EU) gefördert. Das Projekt wurde von RVO (NL), FZJ/PtJ (DE), Gassnova (NO), UEFISCDI (RO) und BEIS (UK) finanziert.

Relevante Aspekte im Förderprojekt sind:

Schwerpunkte	Themenfelder	Relevanz ALIGN-CCUS
Schwerpunkt I „Wissenschaftsexzellenz“	Künftige und neu entstehende Technologien (FET)	• Industrielle Defossilisierung durch CCUS. • Produktion von nachhaltigen, synthetischen Kraftstoffen.
Schwerpunkt III „Gesellschaftliche Herausforderungen“	Klimaschutz, Umwelt, Ressourceneffizienz und Rohstoffe	• Beitrag zur Energiewende im Verkehr durch die Produktion von nachhaltigen Kraftstoffen.

1.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Das Ziel des ALIGN-CCUS Projekts lag in der Beschleunigung des Übergangs der aktuellen Industrie- und Energiesektoren zu einer zukünftigen Ausrichtung mit Technologien mit niedrigen CO₂-Emissionen. Ein wesentlicher Bestandteil dieser zukünftigen Ausrichtung trägt das Konzept der CO₂-Abtrennung, - Nutzung und Speicherung (engl. carbon capture, utilization and storage, CCUS). Das Projekt sollte dazu beitragen, dass kosteneffektive CCUS-Technologien bis zum Jahr 2025 implementiert werden können. Um dieses Ziel zu erreichen wurden viele verschiedene Aspekte gebündelt adressiert. Die in das Projekt integrierten Themen reichen von der Abtrennung (Arbeitspaket 1, engl. work package 1, WP1) über den Transport (WP2) und Speicherung (WP3) bis hin zur Nutzung von CO₂ (WP4). Zusätzlich wurden industrielle Cluster (WP5) in verschiedenen Regionen als Beispielstandort für die Implementierung untersucht. Abgeschlossen wurde das Projekt durch eine umfangreiche Sozialforschung (WP6) um die Akzeptanz der entwickelten Technologien und Szenarien zu prüfen. Eine Übersicht über die einzelnen Arbeitspakete im Projekt gibt Abbildung 1.

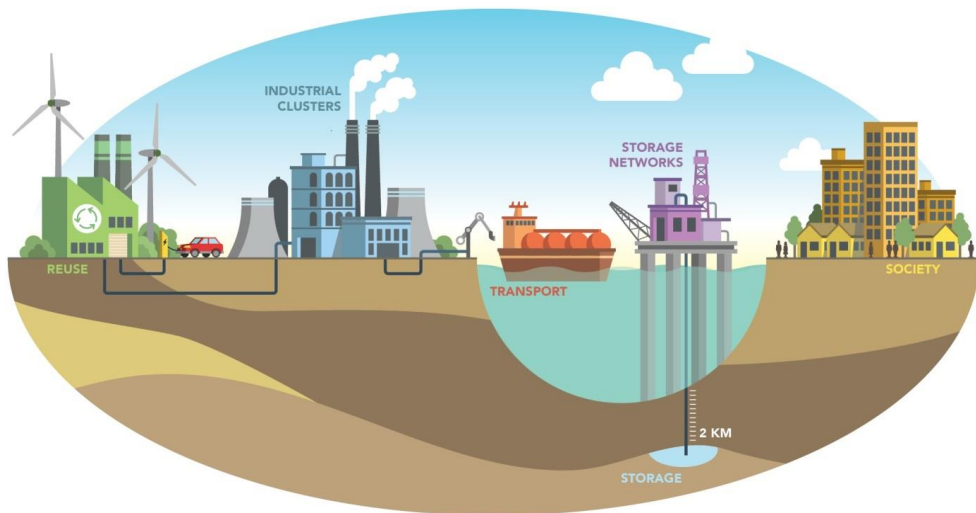


Abbildung 1: Überblick der Arbeitspakete im ALIGN-CCUS Projekt, entnommen aus Annex 1 Grant Application S.25

Das Forschungszentrum Jülich war dabei in WP4 Reuse, WP5 Industrial Clusters und WP6 Society aktiv an den Forschungsarbeiten beteiligt. Die Arbeitspakete WP1, WP2 und WP3 erfolgten ohne Beteiligung des Forschungszentrums. Die Ziele dieser relevanten Arbeitspakete werden im Folgenden näher beschrieben:

Tabelle 1: Zielsetzungen der Arbeitspakete mit FZJ-Beteiligung im ALIGN-CCUS Projekt

4	Utilization: Establish the contribution of CCUS as an element for large-scale energy storage and conversion	Es soll durch eine Demonstrationsanlage in industrieller Umgebung die Rolle von CCUS-Technologien als Schlüsseltechnologie gezeigt werden.
5	Industrial Clusters	Die Untersuchung von industriellen Ballungsräumen soll Aufschluss über eine mögliche Implementierungsstrategie von CCUS-Technologien aufzeigen.
6	Social acceptance: Implementing CCUS in society	Reduzierung von nicht-technischen Risiken für CCUS Implementierungen.

Das Arbeitspaket 4 wurde aufgrund der umfassenden Produktionskette stark strukturiert. Das Forschungszentrum Jülich trug im Projektablauf vorwiegend durch unterstützende Prozessanalysen zum Erfolg des Projekts bei. Der Ansatz bestand darin, die Simulationen und Analysen mit Daten der Demonstratoranlage zu prüfen und schließlich zu validieren. Die Analyse der Ergebnisse und der Abgleich mit den Simulationsergebnissen sind im WP 4.3 definiert. Ein Fokuspunkt bildete das WP 4.4.4 in dem Optimierungs- und Erweiterungsmaßnahmen der Demonstratoranlage untersucht wurden. Das Arbeitspaket 4.4.4 erforderte u. a. die Simulation und Analyse der CO₂-Abtrennung mittels Monoethanolamin (MEA), der Synthesen von Methanol, DME, Formaldehyd, Trioxan, Methylal und OME₃₋₅. Alle diese Verfahrensschritte mussten zu integrierten Produktionsanlagen verschaltet und sowohl technisch als auch ökonomisch bewertet werden.

Mithilfe eines Life Cycle Assessment (LCA) wurden im Arbeitspaket 4.4.3 vom Forschungszentrum Jülich Umweltauswirkungen durch die demonstrierte CCU-Kette erfasst.

Im Arbeitspaket 5 wurden potenzielle Cluster in verschiedenen Ländern analysiert. Das Arbeitspaket 5.3 hatte dabei den Standort Nordrhein-Westfalen im Fokus. Dazu wurden zwei generische Systeme beschrieben und modelliert, die mögliche Optionen abdecken sollten.

ALIGN-CCUS hatte außerdem das Ziel, durch sozialwissenschaftliche Forschung die öffentliche Akzeptanz von CCUS für industrielle Anwendungen zu ermitteln. Da der großtechnische Einsatz von CCS und die Nutzung bzw. Speicherung des abgetrennten CO₂ in Deutschland zu Projektbeginn nicht auf der politischen Agenda standen, war der deutsche Beitrag zum Arbeitspaket 6 daher die Erforschung der Auffassungen von relevanten politischen, wirtschaftlichen und zivilgesellschaftlichen Akteuren („Stakeholdern“) bezüglich der Bedingungen, unter denen CCUS in Deutschland wieder auf die politische Agenda gebracht werden könnte. Forschungszentrum Jülich hatte hier die Leitung im Arbeitspaket 6.3.1.

Die zeitlichen Abläufe der einzelnen Arbeitspakete und des gesamten Projekts werden von Abbildung 2 visualisiert, welche die ungefähren, realen Arbeitsabläufe im Projekt widerspiegelt. Das Projekt wurde kostenneutral bis zum 30.11.2020 verlängert. Diese Verlängerung ist ebenfalls in Abbildung 2 eingetragen. Diese Verlängerung kam u. a. der LCA-Analyse zu Gute, welche erhebliche, externe Verzögerungen beim Aufbau des Demonstrators ausgleichen musste. Die soziale Akzeptanzforschung konnte erst mit einer Verspätung von sechs Monaten im Projekt starten. Im Bereich der Techno-Ökonomie kam es zu keiner Verspätung. Das Forschungszentrum Jülich war in der Lage, alle aufgeführten Meilensteine

und Deliverables im Rahmen des ALIGN-CCUS Projekts zu verwirklichen und zu erreichen. Die Einbindung von Realdaten aus dem Demonstrator in die techno-ökonomischen und LCA-Analysen war allerdings aufgrund der Verzögerung der Inbetriebnahme des Demonstrators nicht möglich.

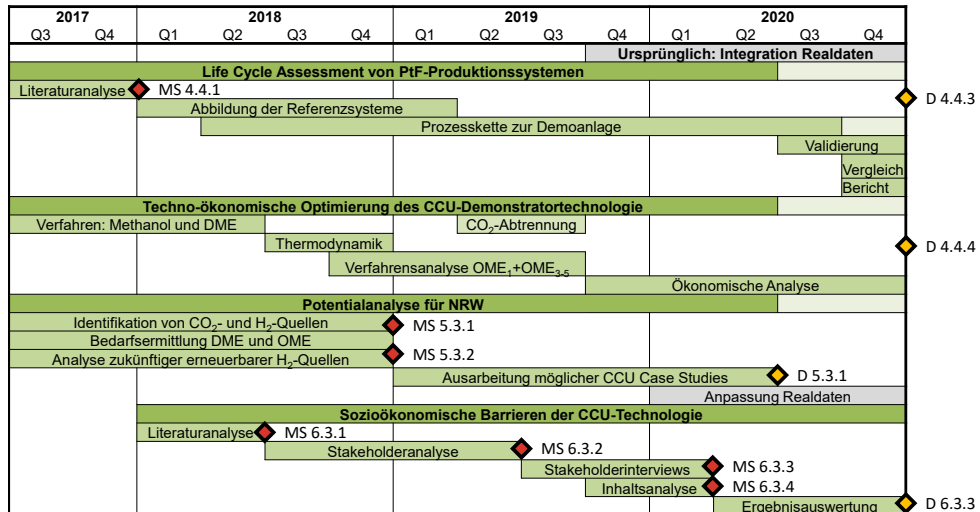


Abbildung 2: Projektstrukturplan (PSP) des Forschungszentrums Jülich im ALIGN-CCUS Projekt

1.4 Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

In diesem Kapitel wird der Stand der Technik (engl. State of the Art, SoA) zusammengefasst und alle relevanten Literaturquellen, welche vor Projektbeginn verfügbar waren, analysiert. Die relevanten Themengebiete für diese Literaturanalyse umfassen die Techno-Ökonomie von PtF-Kraftstoffen, deren LCA sowie die Sozialforschung zum ALIGN-CCUS Projekt.

1.4.1 Techno-Ökonomie von Power-to-Fuel Kraftstoffen

Im Folgenden werden relevanten Arbeiten aus der Literatur im Kontext des ALIGN-CCUS Projekts analysiert. Das Projekt und dieser Bericht verstehen den Aufbau der Demonstratorstechnologie als zentralen Baustein im des Vorhabens.

Die gesellschaftliche Relevanz von alternativen Kraftstoffen und deren Realisierung durch das Projekt wird von den Ergebnissen einer Studie des Umweltbundesamtes unterstützt. Schmidt et al. [5] zeigen die Bedeutung und die Chancen für einen nachhaltigen Verkehr auf Basis von Power-to-Liquid Kraftstoffen. Die Studie [5] thematisiert dabei Fischer-Tropsch-Produkte und Methanolkraftstoffe als zukünftige drop-in Kraftstoffe. Als Nachteil werden die aktuell zu hohen Investitionskosten gesehen. Das ALIGN-CCUS Projekt adressiert genau diesen kritischen Punkt, indem Kostensenkungen von spezifischen Komponenten innerhalb der CCUS-Produktionskette anvisiert werden. Die verfahrenstechnischen Synthesen erlauben große Kapazitäten und können daher große Anteile des Bedarfs zukünftig decken.

Schemme et al. [4] erarbeiten einen detaillierten Literaturüberblick, welcher das PtF Konzept im Rahmen der Energiewende in Deutschland einordnet und mögliche Kraftstoffe auf Basis ihrer individuellen Kraftstoffeigenschaften klassifiziert. Schemme et al. [4] wählen die Klassen der Kohlenwasserstoffe, Alkohole und Ether aus, um diese näher zu untersuchen. Connolly et al. [6] führen in ihrer well-to-wheel Analyse aus, dass Methanol und DME die attraktivsten Optionen sind, wenn es darum geht, Verkehrsmoden mit hohem Anspruch an die Energiedichte des Kraftstoffs mit erneuerbarer Energie zu versorgen. Die Idee der Methanolwirtschaft ist auf G. Olah zurückzuführen, welcher das chemische Recycling von CO₂ u. a. im 2009 erschienen Artikel [7] mit DME zusammenführt. Diese Schlussfolgerungen stehen im Einklang mit der Demonstratortechnologie im ALIGN-CCUS Projekt.

Eine detaillierte Literaturstudie zu Produktionstechnologien von DME ist bei Azizi et al. [8] zu finden. Azizi et al. [8] fassen gegenwärtige Entwicklungen in Bereichen der Katalyse- und Reaktorentwicklung zusammen und bilden somit eine Grundlage für die Entwicklung von Prozessvarianten. Diese Prozessvarianten werden im Laufe des Projekts mithilfe von Prozesssimulationen intensiv untersucht. Im Bereich der Methanol und DME Synthesen kann auf die Dissertation von Otto [9] zurückgegriffen werden, welcher sowohl konventionelle als auch erneuerbare Verfahren simulativ mit ASPEN Plus® abgebildet hat. Diese Prozesssimulationen werden als Grundlagen für die eigenen Analysen genutzt. Bereits Otto [9] hat mit seiner Arbeit das große CO₂-Reduktionspotenzial von nachhaltigem DME gezeigt.

Nach Ullmann's Enzyklopädie [10] existieren zwei unterschiedliche Verfahren um DME herzustellen. Das konventionelle Verfahren nutzt Methanol als Edukt und arbeitet somit in zwei voneinander getrennten Prozessen (Methanol- und DME-Synthese). Diesem zweistufigen Verfahren steht das innovativere Konzept der Direktsynthese gegenüber. Bei der Direktsynthese von DME laufen die Synthese von Methanol und die Dehydratation von Methanol zu DME in einem Reaktor gleichzeitig ab. Die notwendigen Reaktionsgleichungen (Gl. 1 bis Gl. 4) mit Bildungsenthalpien entstammen der Arbeit von Chen et al. [11].



DME kann neben dem Einsatz als alternativer Kraftstoff auch in chemischen Verfahren als Edukt eingesetzt werden, um verschiedenste Moleküle zu synthetisieren. Somit kann DME zu höherwertigen Kraftstoffen weiterverarbeitet werden. Höherwertig ist in diesem Zusammenhang mit weiteren Vorteilen zu verstehen. Eine dieser Veredlungsoptionen kann OME₃₋₅ sein. OME₃₋₅ gilt als blend-in Kraftstoff und kann somit mit konventionellen Kraftstoffen gemischt werden und so sukzessiv in den Markt eingeführt werden. Omari et al. [12, 13] haben diese Kraftstoffmischungen untersucht und festgestellt, dass deutliche Reduktionen der Ruß-Emissionen möglich sind. Deutz et al. [14]¹ zeigen in ihrer LCA zum Einsatz von OME₁, dass dieser Kraftstoff das Potenzial besitzt Umwelteinflüsse im Vergleich zu konventionellen Kraftstoffen zu reduzieren. Diese Ergebnisse unterstützen die weitere Forschung im Gebiet der langkettigen Ether. Burger [15, S.7] fasst in seiner Dissertation die unterschiedlichen Herstellungspfade für OME₃₋₅ zusammen und benennt diese mit Route A, Route B und Route

¹ Paper wurde 2018 während der Projektlaufzeit veröffentlicht.

C. Diese Routen sind zusammen mit den beiden Synthesepfaden für DME in der folgenden Abbildung 3 miteinander verknüpft dargestellt.

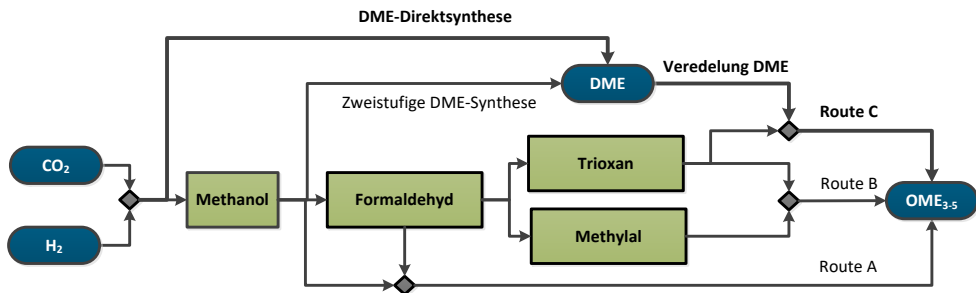


Abbildung 3: Ausgewählte Kraftstoffproduktionspfade im ALIGN-CCUS Projekt (WP4), eigene Darstellung nach Burger [15, S.7]

Die verschiedenen Routen zur OME₃₋₅-Herstellung unterscheiden sich deutlich in ihren verfahrenstechnischen Abläufen. Route B gilt als die konventionelle Route unter den drei Alternativen. Hier wird im finalen Syntheseschritt aus Trioxan und OME₁ OME₃₋₅ gebildet. Bei dieser besonderen Verfahrensführung wird die Bildung von Wasser vermieden. Entstehendes Produktwasser müsste andernfalls sehr aufwändig durch Destillation von den Produkten getrennt werden. Für diese Verfahrensführung stehen die Arbeiten von Ouda et al. [16] und Burger et al. [17, 18] als Grundlagen für die eigene Prozessauslegung zur Verfügung. Peters [19] zeigt in seinem Artikel zur thermodynamischen Analyse von OME_n-Synthesen, dass Direktsynthesen aus H₂ und CO₂ für langkettige Ether nicht möglich sind. Die Direktsynthese von OME₁ ist thermodynamisch möglich, aber durch die notwendigen Betriebsbedingungen (p>100bar und T<373 K) unwahrscheinlich. Aus diesem Grund wird OME₁ aus Formaldehyd und Methanol gebildet. Es wird bereits hier ersichtlich, dass für die Synthese von OME₃₋₅ einige Umwandlungsschritte betrachtet werden müssen. Deutlich weniger Syntheseschritte sind für das Verfahren nach Route A notwendig. Schmitz et al. [20] haben ein Verfahren entwickelt um OME₃₋₅ aus Formaldehyd und Methanol zu synthetisieren. Dieser Verfahrensentwurf beruht auf der kinetischen Modellierung [21] der Direktsynthese, welche ebenfalls als Grundlage für die Verfahrensauslegung im ALIGN-CCUS Projekt herangezogen wurde. Die im Projekt relevanteste Methode ist Route C, da hier DME verwendet wird um OME₃₋₅ zu synthetisieren. Oestreich et al. [22] haben für diesen Reaktionsweg Versuche mit einem Batchreaktor durchgeführt. Die veröffentlichten Daten zur Produktverteilung können als Grundlage für die Modellierung der Reaktion in den Prozesssimulationen verwendet werden.

Aus dem Flussdiagramm (Abbildung 3) ist ersichtlich, welche Einzelschritte im Produktionssystem der techno-ökonomischen Analyse für WP4 zusammengefasst werden müssen, um die verschiedenen Varianten einer integrierten Produktionsanlage darzustellen. Die ökonomische Bewertung der verschiedenen Kraftstoffalternativen erfolgt anhand der zu bestimmenden Produktgestehungskosten. Für die Bestimmung der Produktgestehungskosten können unterschiedliche Methoden herangezogen werden. In diesem Bericht werden die Produktgestehungskosten auf Basis der jährlichen Kapitalkosten (engl. annual capital costs, AAC) und den Betriebsausgaben (engl. operational expenditures, OPEX) abgeschätzt. Der vollständige Zusammenhang ist untenstehend dargestellt (Gl. 5).

$$\left[\frac{\text{€}}{\text{kg}_{\text{product}}} \right] = \frac{AAC + OPEX}{M_{\text{product}}} = \frac{FCI \cdot \bar{a} + C_{H_2} + C_{CO_2} + C_U + C_{\text{side}}}{M_{\text{product}}} \quad \text{Gl. 5}$$

Die Betriebskosten können nach dem Verbrauch von Betriebsmitteln aufgeschlüsselt werden. Für eine PtF-Anlage fallen Kosten für die Bereitstellung von H₂, CO₂, Betriebsmitteln wie Elektrizität und Dampf, sowie weitere Nebenkosten an. Die weiteren Nebenkosten vereinigen dabei Kosten für die Belegschaft, Reparaturen, Steuern, Patente, Versicherungen etc. Die Kosten für die Belegschaft werden mithilfe der Korrelationen nach Alkhatay and Gerrard [23] bestimmt. Alle weiteren Größen sind von den Investitionskosten (engl. fixed capital investments, FCI) abhängig. Für die Bestimmung der FCI wird die Komponentenkostenmethode nach R. Turton [24] herangezogen. Diese Methodik gibt für jedes Bauteil spezifische Korrelationen vor, um die Grundausslegung der Komponenten auf eine Investitionssumme umzurechnen.

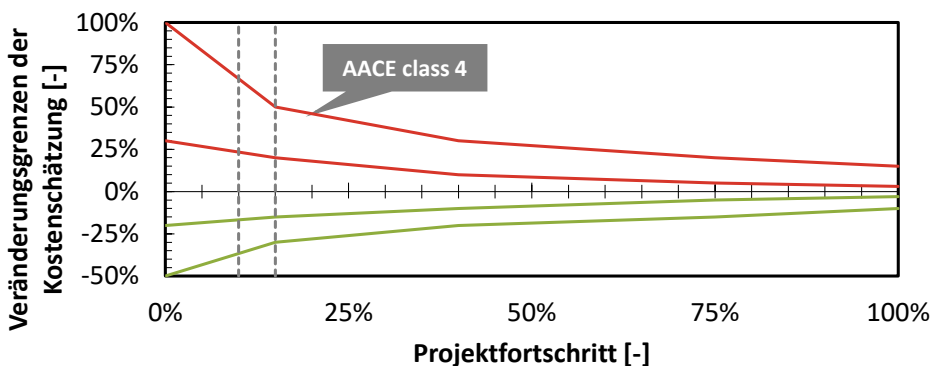


Abbildung 4: Beispiel für die Variabilität der Vorhersagegenauigkeit von verfahrenstechnischen Schätzungen, eigene Darstellung nach den Vorgaben der AACE [25], grau gestrichelter Bereich markiert die Klasse 4

Die vorgestellte Methodik der Kostenschätzung beruht also auf der detaillierten Auslegung der verschiedenen Verfahren mithilfe von Prozesssimulationen und der Komponentenkostenmethode nach R. Turton [24]. Der amerikanische Verband für Kostenschätzung (engl. american association of cost engineering, AACE) klassifiziert dieses Vorgehen in Kategorie 4, was einer Machbarkeitsstudie entspricht.

In einer artverwandten Weise wird in WP5 eine ähnliche ökonomische Bewertung durchgeführt. Allerdings unterscheiden sich sowohl die Methodik als auch die Randbedingungen, da hier mit anderen Tools verschiedene Szenarien analysiert werden. Für WP5.3 wurden zwei generische Prozessketten entworfen, welche schon bei der Stromerzeugung beginnen. Dies geschieht, unter anderem, um das regionale Erzeugungspotential und Einspeiseprofile erneuerbarer Energiequellen innerhalb des Industrieclusters Nordrhein-Westfalen zu berücksichtigen. Die beiden Prozessketten weisen unterschiedliche Schlüsseleigenschaften auf, beispielsweise unterscheiden sich die Anlagengröße und die CO₂-Versorgung. Im Gegensatz zu den detaillierten Prozesssimulationen aus WP4 werden innerhalb von WP5.3 techno-ökonomische Parameter genutzt, welche heute oder zeitnah gelten. Die entwickelten Prozessketten wurden in ein lineares Optimierungsmodell übersetzt und hinsichtlich ihrer annualisierten

Gesamtsystemkosten [26] optimiert. Die Produktgestehungskosten werden aus den annualisierten Gesamtsystemkosten und der Produktmenge abgeschätzt. Die detaillierte mathematische Methodik der genutzten Open-Source Software Calliope ist online verfügbar [27].

1.4.2 Life-Cycle-Assessment von Power-to-Fuel Kraftstoffen

Um die ökologischen Auswirkungen, die mit dem Einsatz von CCU einhergehen zu bewerten, müssen sowohl die CO₂ Quellen bzw. Abscheidetechnologien wie auch die stoffliche Nutzung des CO₂ berücksichtigt werden. Aufbauend auf eine methodische Auswertung zu LCAs zu CCS von Schreiber et al. [28] sowie eigenen Arbeiten zu Abscheidetechnologien von Troy et al. [29] mussten die Analysen um den Prozesskettenabschnitt der CO₂-Nutzung für das ALIGN-CCUS Projekt erweitert werden. Die Nutzung von CO₂ muss nicht per se zu einer umweltfreundlicheren Lösung führen, wenn die Aufwendungen zur Nutzbarmachung zu groß werden. Zu Projektbeginn existierten erste Studien, die ganze CCU-Prozessketten berücksichtigten. Dabei stand eine Vielzahl von untersuchten Aspekten im Mittelpunkt der unterschiedlichen Studien. Der ökologische Vergleich verschiedener CO₂-Quellen (z. B. abgetrenntes CO₂ aus Chemieanlagen, Erdgasverarbeitung, Papierfabriken, Kraftwerken, Eisen- und Stahlwerken) für Power-to-Chemicals-Prozesse standen im Fokus der Studie von von der Assen et al. [30]. Bei den CO₂ Quellen spielt zum einen die Rauchgaszusammensetzung und zum anderen die eingesetzte Abscheidetechnologie eine entscheidende Rolle. Während zunächst die CO₂ Abscheidung von Kraftwerken, insbesondere von Kohlekraftwerken, im Mittelpunkt stand, werden heute weitere CO₂ Quellen diskutiert. In einem von von der Assen et al. entwickeltem Merit-Order-Ansatz erstellen sie ein Ranking von ökologisch geeigneten CO₂-Quellen in Abhängigkeit der Netto-Einsparungen auf.

Mehrere LCA-Studien wurden für verschiedene PtX-Pfade durchgeführt. Sternberg und Bardow [31] präsentierten einen Umweltvergleich von Power-to-Power, -to-Mobility, -to-Heat, -to-Fuel und -to-Chemical Feedstock. Ihre Analyse ergab, dass die höchste Reduktion der Treibhauspotentiale und Erschöpfung fossiler Rohstoffe durch die Nutzung von Überschussstrom in Wärmepumpen mit Warmwasserspeicher und batterieelektrischen Fahrzeugen erzielt werden kann. Reiter und Lindorfer [32] verglichen die Produktion von H₂ und Methan (CH₄) aus erneuerbarem Strom mittels Power-to-Gas-Technologie mit der konventionellen Erdgasversorgung. Sie zeigten, dass die Produktion von H₂ und CH₄ aus erneuerbaren Quellen, wie z. B. Windkraft oder Photovoltaik, ein erhebliches Potenzial zur Reduzierung des GWP und des Primärenergiebedarfs bietet, eine Nutzung von überwiegend aus fossilen Ressourcen erzeugtem Strom jedoch nicht zu empfehlen ist. Für H₂ liegt der Break-Even Point für den CO₂-Gehalt des Strommixes bei 190 g CO₂/kWh, für CH₄ sogar bei nur 73 g/kWh. Eine Studie von van der Giesen et al. [33] untersuchte den Reverse Water Gas Shift (rWGS)-Prozess als Zwischenschritt zur Herstellung von flüssigen Kohlenwasserstoff-Kraftstoffen (Power-to-Fuel) als Alternative zu Diesel. Eine Reduktion der CO₂-Emissionen wird nur bei der Nutzung von Solarenergie und atmosphärischem CO₂ erreicht. Dennoch sahen sie durch die Herstellung von synthetischen Kohlenwasserstoffbrennstoffen zur Speicherung großer Mengen an erneuerbarer Energie eine Option für zukünftige Anwendungen. Zhang et al. [34] diskutierten verschiedene Systemvarianten von Power-to-Gas-Technologien. Power-to-Gas kann die THG-Emissionen, abhängig von der Stromversorgung und der CO₂-Quelle, im Vergleich zu konventionellen Gasproduktionstechnologien reduzieren. Sternberg und Bardow [35] fokussierten ihre Analyse auf synthetisch hergestelltem Erdgas. Die Autoren analysierten Power-to-Gas-Prozesse

(Power-to-SNG) durch Sabatier-Reaktion im Vergleich zu Power-to-Syngas durch rWGS und Dry Reforming of Methane (DRM). Sie weisen darauf hin, dass beide letztgenannten Power-to-Syngas-Wege einen höheren Umweltnutzen haben als Power-to-SNG. Es sind einige LCA-Studien verfügbar, die Prozesse mit CO₂-basiertem Syngas als Zwischenprodukt für Kraftstoffe [33, 36] analysieren.

Weitere LCAs zu Kraftstoffen wurden in einer Literaturstudie zu Beginn des ALIGN-CCUS Projekts analysiert. Schwerpunkt wurde dabei auf die Produktion von DME und OME gelegt. Lediglich drei Publikationen beschrieben zu diesem Zeitpunkt eine LCA zur DME Produktion.

Das von Matzen et al. [37] untersuchte System unterscheidet sich grundlegend von dem im ALIGN-CCUS Projekt entwickelten Demonstrator. Es ist zudem die einzige Quelle in dem die Nutzung von DME (zur Mobilität) berücksichtigt wird. Rohstoffe für die DME Produktion sind aus Windenergie erzeugter Wasserstoff und CO₂, das aus einem Ethanol-Fermentationsprozess stammt. Da CO₂ ein Co-Produkt bei der Ethanol Produktion ist, musste eine Allokationsmethode für die entstehenden Emissionen gewählt werden. Es wurde eine ökonomische Allokation festgelegt. Die LCA wurde mit Hilfe von GREET durchgeführt.

Im untersuchten System von Dacosta et al. [38] wird CO₂ an einer Raffinerie mittels Post Combustion Capture (PCC) MDEA Wäsche abgeschieden. Abgesehen von DME wird zusätzlich Polyolen produziert. Die Systemgrenze beinhaltet alle Schritte bis zur Produktion von DME und Polyolen, berücksichtigt aber nicht ihre Anwendung. Energie und Stromquellen sind nicht explizit (rein) erneuerbar, der Strom stammt aus dem Netz. Es wurden Ergebnisse für CCS und CCU ermittelt. Die Ergebnisse zeigen keine signifikanten Verbesserungen durch die Umsetzung von CCU im Vergleich zum herkömmlichen Produktionsprozess ohne CO₂-Abscheidung und Nutzung. Dies liegt hauptsächlich am hohen Energiebedarf der DME Umwandlungsprozesse, der hauptsächlich durch nicht erneuerbare Energiequellen gedeckt wird.

Ein ähnliches System wurde von Schakel et al. [39] untersucht. CO₂ wird ebenfalls an einer Raffinerie mittels PCC und MDEA Wäsche abgeschieden. In diesem Ansatz ist DME das einzige Produkt, das aus dem abgeschiedenen CO₂ synthetisiert wird. In dieser Untersuchung wird jedoch keine spezifisch rein erneuerbare Energiequelle genutzt, Strom stammt aus dem Netz.

Auch in dieser Untersuchung lassen sich keine signifikanten Verbesserungen des GWP für den Einsatz von CCU im Vergleich zum Referenz-Szenario ableiten. Dagegen konnte die Untersuchung eine Verschlechterung in mehreren anderen Wirkungskategorien feststellen. Auch hier liegt die Ursache im hohen Energiebedarf aus nicht erneuerbaren Energiequellen.

Insgesamt ließ sich aus den gesichteten Arbeiten bereits die Tendenz ableiten, dass eine Nutzung nicht-erneuerbarer Energiequellen beim Einsatz von CCU vermutlich das erwünschte Ziel (CO₂-Einsparung) behindert. Daraus ergab sich die Fragestellung, inwieweit unterschiedliche Strom-Mixe diesen Umstand beeinflussen können. Diese wurde im Projektverlauf intensiv untersucht. Des Weiteren wurde eine Erweiterung der Systemgrenze bis zur DME-Nutzung angestrebt, um zu sehen, inwieweit sich Ergebnisse ändern.

1.4.3 Industriecluster Nordrhein-Westfalen

Im Jahr 2014 war NRW mit 292,3 Mio. t CO₂-Äquivalenten für etwa ein Drittel der deutschen CO₂-Emissionen verantwortlich [40]. Im NRW Klimaschutzplan sind deshalb für die einzelnen Sektoren jeweils Reduktionsziele und Aktivitäten definiert. So sollen die CO₂-Emissionen im Energiesektor bis 2020 um 30 %, im Industriesektor um 29 % und im Transportsektor um 8 %

gesenkt werden [41]. Eine Vielzahl von Studien befasst sich daher mit der techno-ökonomischen Analyse von einzelnen Aspekten der Transformation des bestehenden Systems.

Für die Reduktion von CO₂ durch Abscheidung und anschließende Nutzung hat z. B. das Wuppertal Institut für Klima, Umwelt, Energie in einer Studie CO₂ Punktquellen (> 0,4 Mt/a) in NRW von 42,4 Mt/a identifiziert [40]. Verfügbare H₂ Quellen, die nicht direkt für den Einsatz in der chemischen Industrie produzieren, wurden dort mit 1000 km_N³/Tag im Jahr 2008 ausgewiesen. Für eine umfassende Nutzung von Wasserstoff wird zukünftig die Erzeugung von Wasserstoff durch Elektrolyse mit Strom aus erneuerbaren Energien angesehen. Dies ist Thema vieler Power-to-Gas, -to-Chemicals oder -to-Heat Studien. Das Forschungszentrum Jülich ist derzeit Partner in einem von Land NRW geförderten Virtuellen Institut „Strom zu Gas und Wärme“ (VI SGW) [42], in dem notwendigen Flexibilitäts- und Speicheroptionen, wie z. B. durch Elektrolyse, im zukünftigen Energieversorgungssystem untersucht werden. Zuvor hatte das Forschungszentrum Jülich zusammen mit der RWTH Aachen ein Gutachten zur „Power to Gas/Energiespeicher“ der Enquetekommission zur Zukunft der chemischen Industrie in NRW vorgelegt [43].

Die Verteilung von CO₂, Wasserstoff oder DME/OME kann nicht auf bestehende flächendeckende Transport- und Verteilungsstruktur und insbesondere existierende Nachfrage aufsetzen. Der Aufbau neuer oder die wesentliche Anpassung bestehender Energieinfrastrukturen sind zeitaufwendige Projekte mit kapitalintensiven und risikoreichen Investitionen. Es gilt entsprechende Infrastrukturaufgaben zu analysieren und geeignete Standorte der Produktion zu lokalisieren. Dabei kann auf Erfahrungen im Bereich der Modellierung von CO₂- und Wasserstoffinfrastrukturen im Forschungszentrum Jülich zurückgegriffen werden [44].

Um die Abhängigkeit von Diesel aus Russland, dem Mittleren Osten oder der USA zu reduzieren stehen neue Kraftstoffe im Zentrum weiterer Forschung. Eine Übersicht über „Zukünftige Kraftstoffe für Verbrennungsmotoren und Gasturbinen“ gibt der Forschungsverein Verbrennungsmotoren (FVV) in seinem 2013 veröffentlichten Kraftstoffbericht [45]. In der Studie werden DME und OME ökologische Vorteile zugeschrieben, jedoch noch deutliche Nachteile bei der Wirtschaftlichkeit identifiziert.

Aufgrund der Vielzahl der Analysen ist es daher Aufgabe des Arbeitspaketes diese Facette von Einzelaspekten zu einem Gesamtsystem von der CO₂-Abscheidung, über die Synthesebrennstoffproduktion bis hin zum Einsatz im stationären Bereich sowie beim Transport zusammenzufügen, Synergien zu identifizieren und Potentiale aufzuzeigen.

1.4.4 Soziale Akzeptanzforschung von CCUS

Ursprünglich war die Wahrnehmung von CCS durch die Stakeholder in Europa überwiegend positiv. In einer 2006 durchgeführten Umfrage von Shackley et al. [46], bei der zahlreiche Stakeholder aus dem Energiebereich (Industrie, Regierung, Umwelt-NGOs, Forscher und Parlamentarier) aus 28 europäischen Ländern befragt wurden, waren drei Viertel der Befragten der Meinung, dass ein weit verbreiteter Einsatz von CCS "definitiv" oder "wahrscheinlich" notwendig sei, um in ihrem eigenen Land eine tiefgreifende Reduzierung der CO₂-Emissionen zu erreichen. Umwelt-NGOs hatten eine weniger positive Meinung zu CCS. Von einer Reihe identifizierter Risiken waren 20-40 % aller Befragten der Meinung, dass diese "moderat" oder "sehr ernst" wären, während 60-80 % der Meinung waren, dass es kein Risiko gäbe oder dass die Risiken "minimal" wären. Eine Befürchtung, die geäußert wurde war, dass

die Entwicklung von CCS die Investitionen in Technologien für erneuerbare Energien verringern würde; allerdings war die Hälfte der Befragten der Meinung, dass die Anreize für CCS auf dem gleichen Niveau wie die für erneuerbare Energien oder auf einem höheren Niveau liegen sollten.

Eine umfangreiche Online-Delphi-Befragung von Experten auf dem Gebiet von CCS in Großbritannien ergab außerdem, dass als größte Hindernisse für die CCS-Implementierung in Großbritannien ein fehlender langfristiger politischer Rahmen und die Kosten gesehen wurden [47]. Beim Vergleich der Meinungen niederländischer Akteure mit den Standpunkten der Bürger in Bezug auf CCS fanden Huijts et al. [48] heraus, dass Regierung, Industrie und Umwelt-NGOs daran interessiert waren, Speicherprojekte zu starten, während die Bürger, die in der Nähe einer potenziellen Speicherstätte lebten, eine leicht negative Einstellung hatten. Unter den Interessenvertretern genossen die NGOs das meiste und die Industrie das geringste Vertrauen in der Öffentlichkeit. Mit dem Ziel, einen Überblick über das Potenzial für die Anwendung von CCS in den nordischen Ländern (Schweden, Finnland, Dänemark, Norwegen und Island) zu geben, gingen Teir et al. [49] auf die Themen öffentliches Bewusstsein für CCS, energie- und klimapolitische Rahmenbedingungen und politische Fragen ein, die für die CCS-Einführung in den nordischen Ländern relevant sind.

Johnsson et al. [50] führten als erste einen globalen Vergleich der Einstellungen von Stakeholdern zu CCUS in den drei großen Regionen Nordamerika, Japan und Europa durch. Diese Umfrage wurde mit einer Folgestudie im Jahr 2019 fortgesetzt. Die Ergebnisse zeigten geringe Unterschiede zwischen den Regionen und zwischen verschiedenen Gruppen von Stakeholdern. Alle waren der Ansicht, dass CCUS und erneuerbare Technologien (wie z. B. Solarenergie) in den nächsten 10-20 Jahren in großem Umfang in den Stromsektor eintreten werden. Die nordamerikanischen Befragten schätzten die Bedrohung durch den Klimawandel im Vergleich zu den Befragten der anderen Regionen als weniger wichtig ein; die Befragten aus Japan waren eher besorgt über die Belastung der Industrie durch die Emissionsbeschränkungen. Laut der Folgestudie sind die Befragten der Ansicht, dass CCUS in der nationalen Klimadebatte eine größere Rolle spielen wird.

Zu Projektbeginn fehlte es in Deutschland an gesellschaftlichem und politischem Willen, CCUS wieder auf die politische Agenda zu bringen. Ein wichtiger Grund dafür war die hohe Ablehnung von CCS in großen Teilen von Politik und Gesellschaft. Für eine Rückkehr von CCUS auf die Agenda wäre ein konstruktiver, gesellschaftlicher Dialog notwendig. Die Auffassungen von Stakeholdern in Deutschland zu CCS wurden das erste Mal im Rahmen des Gemeinschaftsprojekts „Sozioökonomische Begleitforschung zur gesellschaftlichen Akzeptanz von Carbon Capture and Storage (CCS) auf nationaler und internationaler Ebene“ untersucht [51, 52]. Dieses vom BMWi geförderte Projekt wurde vom Wuppertal Institut für Klima, Umwelt, Energie (WI) koordiniert und von 2006 bis 2007 gemeinsam mit dem Forschungszentrum Jülich und weiteren umgesetzt. Es war das erste Projekt, das die Bedeutung technischer und nicht-technischer Aspekte von CCS für die gesellschaftliche Akzeptanz von CCS in Deutschland gleichermaßen untersuchte [53]. Die Vorstellungen der Stakeholder zu CCS wurden mit einem spezifischen Fragebogen untersucht, mit dem Einstellungen von Energieexperten, Studenten, Journalisten und Umweltorganisationen erhoben wurden. Die Ergebnisse der Befragung und der Interviews verdeutlichten unterschiedliche Positionen in den verschiedenen Stakeholdergruppen: Regierungs- und Industrievertreter sowie Energieexperten hatten überwiegend eine neutrale oder positive Einstellung zu CCS, während die meisten Umweltorganisationen CCS ablehnten.

Anschließend an dieses Projekt konzentrierte sich die Forschung zur Akzeptanz von CCS in Deutschland auf die Untersuchung der Akzeptanz in der Bevölkerung [54-58]. Hierzu gehörten folgende Projekte:

- „Erhebung des Einflusses der CCS-Kommunikation auf die breite Öffentlichkeit sowie auf lokaler Ebene („CCS-Kommunikation“), Forschungszentrum Jülich gemeinsam mit dem WI (2009-2010),
- „Folgeprojekt CCS-Kommunikation – Multivariate Analysen der Einflussfaktoren auf die Akzeptanz von CCS“, Forschungszentrum Jülich gemeinsam mit dem WI (2011-2012),
- „Chancen für und Grenzen der Akzeptanz von CCS in Deutschland“ (CCS-Chancen), durchgeführt vom Fraunhofer-Institut für System- und Innovationsforschung ISI, Forschungszentrum Jülich und WI (2012-2014).

Des Weiteren führt das Forschungszentrum Jülich seit Ende 2011 jährlich eine repräsentative Befragung der deutschen Bevölkerung (Panelbefragung) durch, um eine zuverlässige Abschätzung der Akzeptanz der Transformation des Energiesystems zu ermöglichen. Im Rahmen dieser Panelbefragung wurden in den Jahren 2011/12 und 2015 die Bekanntheit, das Wissen und die Einstellungen in der Bevölkerung zu CCS erhoben.

Die durchgeführten Projekte und Befragungen zur Akzeptanz von CCS in der deutschen Bevölkerung haben bislang insbesondere aufgezeigt:

- Die Bekanntheit von CCS ist in der Bevölkerung im Zeitverlauf gestiegen: In 2011 hatten 62 % der Bevölkerung noch nie von CCS gehört, in 2016 waren es nur noch 49 %. Gleichzeitig bleiben falsche Vorstellungen über CCS bestehen oder verbreiten sich weiter.
- Die Bekanntheit, das Wissen und die Einstellungen zum CO₂-Transport und zur CO₂-Speicherung unterscheiden sich nach Regionen und soziodemographischen Merkmalen. CO₂-Speicherung findet in der deutschen Bevölkerung kaum Zustimmung.
- Die bedeutsamsten direkten Einflussfaktoren auf die Einstellungen zum CO₂-Transport per Pipeline bzw. zur CO₂-Speicherung sind die Einschätzungen des persönlichen und gesellschaftlichen Risikos des Transports/der Speicherung sowie die Einschätzungen des persönlichen und gesellschaftlichen Nutzens von CCS

Während somit die Akzeptanz von CO₂-Transport und Speicherung in der deutschen Bevölkerung umfassend erforscht wurde, wurden die Auffassungen von Stakeholdern bezüglich CCUS nur sporadisch untersucht. Dementsprechend waren auch die Vorstellungen von Stakeholdern hinsichtlich der Bedingungen unter denen CCUS wieder auf die politische Agenda in Deutschland zurückkehren könnte, noch nicht systematisch erforscht worden.

1.5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

1.5.1 Integrale Analyse der Demonstratortechnologie (WP4)

Das Forschungszentrum Jülich hat im WP4 an der techno-ökonomischen und ökologischen Bewertung der alternativen Kraftstoffsynthese und –nutzung in enger Absprache mit den im WP4 beteiligten Partnern gearbeitet. Die verschiedenen Syntheserouten und

Verfahrensrouten wurden mit den Projektpartnern diskutiert. Ein wesentlicher Aspekt war in diesem Bereich die technische Optimierung der Demonstratorstechnologie.

- TNO hat im Rahmen der Untersuchung von Optimierungsstrategien für die Demonstratorstechnologie die eigne COMAX-Technologie weiterentwickelt. Mithilfe von Adsorptionsverfahren kann eine Wassergas-Shift-Stufe der Hydrierung von CO₂ vorgeschaltet werden, um eine initiale Umwandlung von CO₂ in CO zu ermöglichen. Durch die erhöhte Menge an CO im Frischgas der Synthesen werden typische Limitierungen der CO₂-basierten Synthesen überwunden und die Verfahren produktiver. Das Verfahren wurde letztlich nicht in die Prozessanalysen eingebunden. Die in-situ Wasserabscheidung in der direkten DME-Synthese stellt ein artverwandtes Verfahren dar, was aber keinen inhaltlichen Bezug zu der COMAX-Technologie aufweist.

Die auf diesen Ergebnissen aufbauende LCA hat zusätzlich Daten zur Herstellung der einzelnen Komponenten in der Demonstrationsanlage eingebunden. Für die Zusammenstellung der Sachbilanz (Life Cycle Inventory - LCI) der LCA war eine enge Zusammenarbeit mit allen beteiligten Partnern aus dem Arbeitspaket 4 notwendig. Eine übersichtliche Darstellung der relevanten Kooperationen ist in Tabelle 2 aufgeführt.

Tabelle 2: Übersicht der Kooperationen zwischen den beteiligten Partnern zur LCA, Teil 1

Einheit	Kooperation
Kraftwerk	Repräsentativ für eine industrielle CO ₂ -Quelle ist das Rauchgas aus dem 1 GWnet-Braunkohlekraftwerk der RWE Power AG in Niederaußem der Ausgangspunkt für die Prozesskette. Die technischen Kraftwerksparameter ohne CO ₂ -Abscheidung sowie Daten für die Betriebsphase lieferte der Projektpartner RWE Power AG.
CO ₂ -Abscheidung	In Niederaußem wird eine MEA-Wäsche in Demonstratorgröße seit 2009 bereits mehr als 80.000 Stunden betrieben. Die Daten für den Bau und Betrieb der großtechnischen MEA-Anlage wurde von RWE zur Verfügung gestellt. In einem 18-monatigen Testlauf im Arbeitspaket 1 des ALIGN-CCUS Projektes wurden weitere Betriebsdaten erhoben, welche ebenfalls ihren Weg in die LCI fanden.
Elektrolyseur	Für den untersuchten Demonstrator wurde Wasserstoff mittels einer modernen alkalischen Wasserelektrolyse von Asahi Kasei bereitgestellt. Die installierte Einheit kann bis zu 22 kg H ₂ pro Tag produzieren. Eine detaillierte Komponentenliste, die Gewichte und Materialien für den Aufbau des Elektrolyseurs beschreibt, wurde vom Projektpartner zur Verfügung gestellt. Dies gilt auch für Daten bezüglich der Betriebsparameter.

Tabelle 2: Übersicht der Kooperationen zwischen den beteiligten Partnern zur LCA, Teil 2

Einheit	Kooperation
Synthese-einheit	Für den Syntheseschritt wurden zwei verschiedene Konzepte untersucht: die DME-Synthese und die OME ₃₋₅ -Produktion. Beide Konzepte beinhalten die CO ₂ -Konditionierungseinheit, in der die CO ₂ -Eigenschaften an die, für die nachfolgende Syntheseinheit erforderlichen Bedingungen angepasst werden. DME wird in einer innovativen einstufigen MeOH/DME-Syntheseinheit hergestellt, die von der Mitsubishi Power Europe GmbH (MPE) entwickelt wurde. Die Einhaltung der Rauchgasgrenzwerte werden durch den Einsatz eines katalytischen Nachbrenners des Forschungszentrums Jülich ermöglicht. Für den Bau der Anlage hat MPE eine Komponentenliste mit Materialien und Gewichten für den Demonstrator geliefert, der vor Ort in Niederaußem mit einer Produktionskapazität von 50 kg DME pro Tag errichtet wird. Die Aufbereitung des entstehenden MeOH/DME/H ₂ O-Gemisches zu reinem DME ist dabei nicht Teil des demonstrierten Prozesses. Da keine Daten zu den verschiedenen Komponenten einer Konditionierungsanlage vorlagen, wurden diese Daten nicht in die LCA inkludiert. Der Syntheseschritt von OME ₃₋₅ wurde im ALIGN-CCUS Projekt nicht vor Ort demonstriert. Aufgrund von Verzögerungen bei der Entwicklung des Demonstrators waren innerhalb der Projektlaufzeit keine Betriebsdaten für die DME-Synthese verfügbar. Der Betrieb sowohl der DME- als auch der OME ₃₋₅ -Synthese wurde mit Aspen Plus® im Arbeitspaket 4.4.2 simuliert, die resultierenden Daten sind in der LCI enthalten.
Spitzenlast-motor	Der Dieselmotor (DEUTZ-Motor TCD 2013 L6 4V) eines stationären Stromerzeugers der Firma Henkelhausen wurde vom VKA der RWTH Aachen, FEV Europe und Bosch adaptiert, um die Spitzen- und Reservestromerzeugung durch DME zu demonstrieren. Für die LCA der Betriebsphase wurden die Ergebnisse der Prüfstands-Testmessungen des VKA der RWTH Aachen zur Verfügung gestellt. Da der untersuchte Motor nicht mit einem AGR-System (Abgasrückführung) ausgestattet war, wurde ein weiterer Satz von Emissionsdaten, der eine fundierte Abschätzung bezüglich der Emissionsveränderungen bei Anwendung der AGR beinhaltet, vom Projektpartner zur Verfügung gestellt.
PKW	Bezüglich der Fahrzeugleistung wurde der Dieselmotor eines Jaguar XE entsprechend des OME ₃₋₅ spezifischen Verbrauchs angepasst. Die Prüfstand-Testmessungen mit Diesel und OME ₃₋₅ wurden vom VKA an der RWTH Aachen, FEV Europe und Bosch durchgeführt und die Daten für die LCA bereitgestellt.

1.5.2 Industriecluster Nordrhein-Westfalen (WP5)

Bellona & Sustainable Decisions Limited (SDL)

Im Arbeitspaket 5.6 arbeiten Bellona und Sustainable Decisions Limited (SDL) gemeinsam an der Entwicklung von Querschnittsthemen und kommerziellen Modellen für die Entwicklung von CO₂-Clustern. Aufgabe ist es, die Perspektive der verschiedenen Projektpartner zu verstehen, um technische und betriebliche Gemeinsamkeiten bei der Entwicklung von CO₂-Abscheidung, -Transport und -Speicherung in Industrieclustern, wie z. B. für Nordrhein-Westfalen, zu identifizieren. Zu den Hauptzielen gehören die Identifizierung und Kodifizierung von Gemeinsamkeiten/Unterschieden bei der Initiierung und Entwicklung von Clustern und die Identifizierung von übergreifenden technischen, kommerziellen und praktischen Anforderungen zur Anwendung auf Cluster.

Imperial College London

Ausgehend von den in Arbeitspaket 5.3 modellierten optimalen DME-Anlagendesigns des Forschungszentrums Jülich wurde vom Imperial College London (ICL) das Upscaling der kleinskaligen und großskaligen Systemen bis 2035 untersucht. Dafür wurden geeignete Standorte für die Installation solcher Anlagen und der dafür notwendigen Infrastruktur identifiziert.

Für das großskalige System werden zwei Szenarien betrachtet, eines mit dezentraler DME-Produktion, eines mit zentraler DME-Produktion und einem CO₂-Transportnetz. Ein vom ICL selbstentwickeltes CO₂-Transport-Optimierungsmodell (Pipelines und LKWs) wurde angewandt, um zentralisierte CO₂-Transportnetzwerke zu identifizieren. Daneben wurde auch ein CO₂-Abscheidungskostenmodell für verschiedene Industrien entwickelt, um die optimalen Standorte der DME-Anlagen zu bestimmen. Aus Sicht der zukünftigen Entwicklung wird der DME-Bedarf in Deutschland insgesamt bis zum Jahr 2035 auf etwa 3 Mio. Tonnen pro Jahr (mtpa) geschätzt, bei einem CO₂-Bedarf von etwa 6 mtpa (vgl. Abschnitt 2.4.2). Das sind nur 3 % der derzeitigen industriellen CO₂-Emissionen von NRW. Daher sollte die DME CCU als ein Technologiepfad unter vielen verschiedenen Emissionsminderungsmaßnahmen betrachtet werden.

Für die DME-Kleinanlage wird ein Standortauswahlverfahren festgelegt, das sich an den Kosten und der Verfügbarkeit von regenerativer Stromerzeugung orientiert. Für die großskalige DME-Produktion werden sowohl die dezentrale Produktion ohne CO₂-Transport als auch die zentrale Produktion mit CO₂-Pipelinetransport betrachtet. Die wichtigste Erkenntnis aus dem Vergleich dieser beiden Szenarien ist, dass die zentrale Produktion eine höhere Zugänglichkeit von CO₂-Quellen und eine höhere Flexibilität in Bezug auf den Betrieb ermöglicht, während die dezentrale DME-Produktion weniger regulatorische und politische Hindernisse aufweist, da keine großen Pipeline-Netzwerke gebaut werden müssen.

Die detaillierten Ergebnisse der Arbeiten des ICL innerhalb des Arbeitspaketes 5.3 finden sich in dem gemeinsamen Deliverable 5.3.2.

1.5.3 Soziale Akzeptanzforschung (WP6)

In WP 6 hat eine enge Zusammenarbeit der Partner aus den am Projekt beteiligten Ländern stattgefunden (Universität Leiden (NL), ECN (NL), Shell (NL), Universität Edinburgh (UK),

NUSPA (RU), Bellona (NO)). Da es keine einheitliche Wahrnehmung von CCUS Projekten in den verschiedenen Ländern gibt, wurde die Ermittlung der nicht-technischen Risiken jeweils aus Sicht der einzelnen Länder erarbeitet und verglichen. Ziel war es dabei länderspezifische theorie- und evidenzbasierten Kommunikations- und Kompensationsstrategien, die Vertrauen schaffen und eine positive Wirkung auf die gesellschaftliche Akzeptanz von CCUS haben, zu entwickeln. Im Arbeitspaket 6.3 wurde unter Leitung des Forschungszentrums Jülich zusammen mit der Nationalen Universität für politische Studien und öffentliche Verwaltung (NUSPA/SNSPA) in Bukarest, Rumänien, Stakeholderbefragungen in den beiden Ländern durchgeführt. Neben deutschen Akteuren aus dem ALIGN-CCUS Projekt (z.B. RWE) wurden weitere Stakeholder aus Industrie, Wissenschaft, Politik und Umweltorganisationen befragt.

2 Eingehende Darstellungen zu den erzielten Ergebnissen

Die Darstellungen der Ergebnisse stammen aus den Arbeitspaketen 4, 5 und 6 und weisen aus diesem Grund bereits eine große thematische Vielfalt auf, was allerdings durch die Ausrichtung des ALIGN-CCUS Projekts und der Arbeit des Forschungszentrums Jülich in einen kohärenten Rahmen gebracht wird. Die Ergebnisse beginnen mit der verfahrenstechnischen Analyse der untersuchten PtF-Produktionssysteme in Abschnitt 2.1. Die Ergebnisse der verfahrenstechnischen Analysen werden anschließend in der ökonomischen Bewertung derselben Systeme aufgegriffen und in Abschnitt 2.2 beschrieben. Den inhaltlichen Abschluss von Arbeitspaket 4 liefert dann eine umfassende LCA in Abschnitt 2.3. Abschnitt 2.4 gibt die Ergebnisse der Systemanalyse aus Arbeitspaket 5 wieder. Die Darstellung der Ergebnisse der durchgeführten Stakeholderanalyse wird in Abschnitt 2.5 bereitgestellt.

2.1 Technische Analyse der Herstellungsverfahren der Kraftstoffe

Die technische Analyse der Herstellungsverfahren ist durch die Einteilung in sieben Abschnitte strukturiert. Die notwendige Transparenz der Analyse wird durch die Darstellung der getroffenen Randbedingungen in Abschnitt 2.1.1 hergestellt. Die Rohstoffbereitstellung für alle Synthesen wird durch die Verfahrensanalyse der CO₂-Abtrennung im Absorptionsverfahren mit MEA in Abschnitt 0 vorgestellt. Mit diesem Hintergrund kann die Synthese von Methanol auf Basis von H₂ und CO₂ als Grundlage für alle folgenden Verfahren ausgelegt werden (siehe Abschnitt 2.1.3). Kernelement der verfahrenstechnischen Analyse ist die Synthese von DME, welche in das konventionelle, zweistufige Verfahren (siehe Abschnitt 2.1.4) und die innovative Direktsynthese (siehe Abschnitt 2.1.5) aufgeteilt ist. Die Veredlung von DME zu OME₃₋₅ wird in Abschnitt 2.1.6 untersucht, wobei zusätzlich alle weiteren Routen (A, B und C) mit entsprechenden Zwischenschritten analysiert werden. Den Abschluss bildet Abschnitt 2.1.7 mit einer kurzen Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse aus der verfahrenstechnischen Analyse.

2.1.1 Randbedingungen der verfahrenstechnischen Analysen

Für die Ausarbeitung der verfahrenstechnischen Analysen war es von entscheidender Bedeutung das Referenzsystem mit allen Schnittstellen und Grenzen zu definieren. Wie bereits in Abbildung 3 dargestellt wurde, bestand das zu entwickelnde Produktionssystem aus mehreren Syntheseschritten, welche in eigenen Prozesssimulationen analysiert und mit dem Gesamtsystem verknüpft werden mussten. Der Austausch zwischen diesen einzelnen Prozessen wurde dabei über die Massen- und Energiebilanzierung geregelt, so konnten Stoff- und Wärmeströme zwischen den Prozessen ausgetauscht werden. Zusätzlich war jeder Prozess in der Lage Elektrizität für den Betrieb von Balance-of-Plant Komponenten zu beziehen. Der Austausch von Wärmeströmen orientierte sich dabei an dem Muster eines integrierten Verbundstandortes, welcher eine Infrastruktur für den Transport von Wasserdampf auf unterschiedlichen Druck- bzw. Temperaturniveaus bietet. Abbildung 5 verdeutlicht diese Annahme.

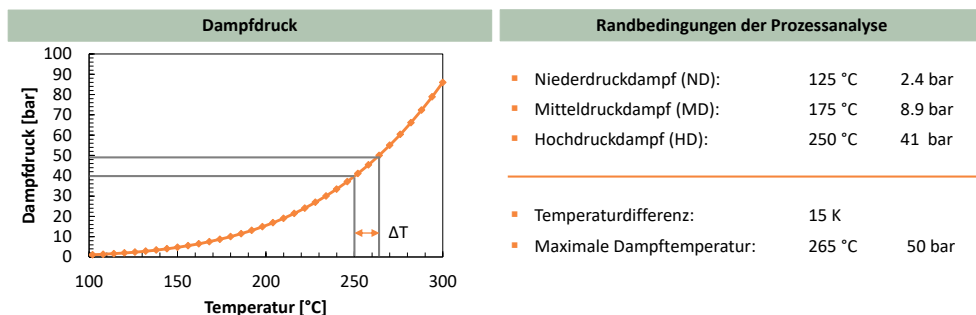


Abbildung 5: Wärmeintegration am Verbundstandort durch Dampfströme mit definierten Druckstufen

Das Design des Referenzsystems orientierte sich an der aufgebauten Demonstratorstechnologie. Die DME-Syntheseeinheit wurde durch einen alkalischen Elektrolyseur mit Wasserstoff versorgt. Das verwendete CO₂ stammte aus der Abscheideanlage des Kraftwerks Niederaußem. Allerdings wurde auf eine direkte Kopplung dieser beiden Anlagen verzichtet, sodass das CO₂ im Projekt verflüssigt und in Form von Flaschen der Syntheseeinheit zugeführt wurde. Um das verflüssigte CO₂ in der Syntheseeinheit zu verwenden, musste eine zusätzliche Einheit für die Kommissionierung des CO₂ entwickelt und eingesetzt werden. In den Prozessanalysen wurde auf die Abbildung dieses Schrittes verzichtet, da in einer optimierten Anlage eine solche Prozessführung nicht vorkommen würde. Aus dieser Betrachtung wurde ersichtlich, dass im Fall der Prozessanalysen die Randbedingungen für den Eingangsprozess von den Randbedingungen der H₂ und CO₂ Versorgung definiert werden. Der Elektrolyseur wird mit einem Druck von 10 bar betrieben, der Wasserstoff steht mit einer Temperatur von 25 °C zur Verfügung. Der Desorber der CO₂-Wäsche besitzt einen Druck von ca. 2 bar. Außerdem wurde angenommen, dass das CO₂ mit einer Temperatur von 25 °C in die Syntheseeinheit eintritt. Die Anforderungen an den produzierten Kraftstoff unterscheiden sich je nach vorliegendem Produktionspfad und werden spezifisch zu jedem einzelnen Prozess im Verlauf des Berichts vorgestellt. Eine Visualisierung zu den Systemgrenzen des Referenzsystems, sowie der gewählten Randbedingungen ist Abbildung 6 entnehmen.

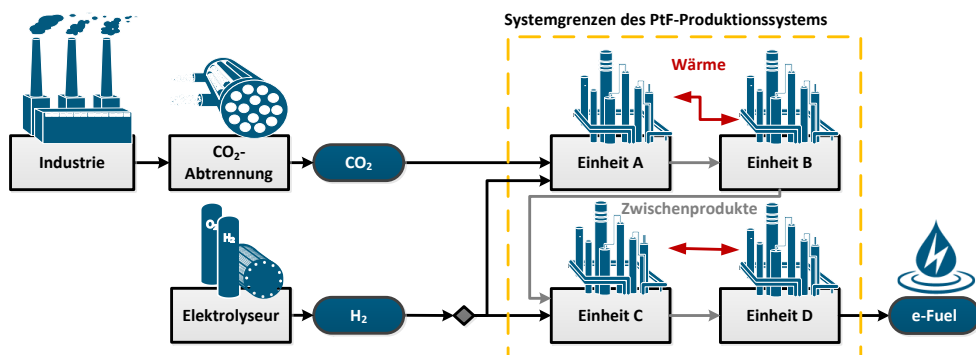


Abbildung 6: Systemgrenzen der techno-ökonomischen Bewertung von PtF-Herstellungspfad

Neben den äußeren Randbedingungen musste ebenfalls die innere Parametrisierung des PtF-Produktionssystems definiert werden. Der Wirkungsgrad der Gesamtkette ergab sich aus den Wirkungsgraden der einzelnen Verfahren und diese wiederum waren abhängig von den Parametern der einzelnen Komponenten. In vielen Fällen wurde bei einmaligem Durchlaufen der Reaktionszonen nur ein anteiliger Umsatz der Edukte erzielt, sodass Rezyklierungen in die Verfahren eingebracht werden mussten. Diese Aufgabe erledigen Pumpen und Verdichter, was diese Komponenten besonders einflussreich in Bezug auf die Prozessbewertung werden lässt.

Tabelle 3: Parametrisierung der entwickelten Verfahren

Parameter	Einheit	Basis	Einordnung
Wirkungsgrad der Elektrolyse (System)	%	70	Typischer Wert für SoA PEM und alkalische Elektrolyseure nach Smolinka et al. [59, 60]
Spezifischer Energieaufwand zur Abscheidung von CO ₂	MJ/kg _{CO2}	3	Typischer Wert für Aminwäsche mittels MEA von industriellen Rauchgasen (hier Braunkohlekraftwerk)
Isentroper Verdichterwirkungsgrad	%	76	Standardwert der Verfahrenstechnik, nach Hirschberg [61]
Pumpenwirkungsgrad	%	60	Standardwert der Verfahrenstechnik, nach Hirschberg [61, S.762]
Maximales Verdichtungsverhältnis	-	3	Der Wert ist dem Regelwerk „rules of thumb engineering“ [62] nach Woods entnommen. Wird ebenfalls in der Dissertation von Schemme [63] verwendet.
Minimale Temperaturdifferenz	K	10	Standardwert

Für die energetische Bewertung der Verfahren bot sich die Bestimmung des PtF-Wirkungsgrades an. König et al. [64] definieren diesen PtF-Wirkungsgrad als das Verhältnis zwischen der im Kraftstoffprodukt gebundenen Energie zu allen energetischen Aufwendungen während des Herstellungsprozesses. Dieses Prinzip ist im folgenden mathematischen Zusammenhang dargestellt (Gl. 6).

$$\eta_{PtF} = \frac{\dot{m}_F \cdot LHV_F}{\frac{\dot{m}_{H_2} \cdot LHV_{H_2}}{\eta_{El}} + \sum P_U + \sum Q_U} \quad \text{Gl. 6}$$

Die notwendige elektrische Energie für die Elektrolyse ist in diesem Zusammenhang bereits in den Wirkungsgrad integriert. Für die Prozessbewertung anhand des obenstehenden PtF-Wirkungsgrades mussten die unteren Heizwerte (engl. lower heating value, LHV) der einzelnen Kraftstoffe bekannt sein. Die Produktionspfade zur Herstellung von OME₃₋₅ geben Mischungen mit unterschiedlichen Anteilen der einzelnen Stoffgruppen aus. Für die Bilanzierung wurden nach den herrschenden Massenanteilen die einzelnen Heizwerte zu einem Gemischheizwert zusammengefasst. Die Heizwerte der einzelnen Kraftstoffe sind in Tabelle 4 eingetragen.

Tabelle 4: Zusammenfassung der unteren Heizwerte für die Prozessbilanzierung

Untere Heizwerte in MJ/kg								
H ₂	MeOH	DME	OME ₁	OME ₂	OME ₃	OME ₄	OME ₅	OME ₆
119,96	19,92	27,6	23,3	20,30	19,60	19,00	18,50	18,00

2.1.2 Bereitstellung von nachhaltigem H₂ und CO₂

Die Versorgung der PtF-Produktionsanlage mit nachhaltigem H₂ wurde durch einen alkalischen Elektrolyseur gewährleistet. Innerhalb der Prozessanalysen von WP4 wurde die Elektrolyse als „Black Box“ angesehen, d.h. der H₂-Versorgung wurde wie zuvor beschrieben als Randbedingung abgebildet.

Im Systementwurf von WP5 wurde die Elektrolyse innerhalb der jeweiligen Prozesskette abgebildet. Wasserstoff gilt dort somit stets als ein Zwischenprodukt, dessen Nachhaltigkeit über die Strombezugsquelle definiert ist.

Die Bereitstellung von CO₂ wurde für die Systemauslegung ebenfalls als eine „Black Box“ angenommen. Im Gegensatz zur H₂-Bereitstellung wurde allerdings der grundlegende Prozess mit Prozesssimulationen abgebildet. Das verwendete Modell wurde vom Projektpartner TNO zur Verfügung gestellt. Es beschreibt den typischen, absorptionsbasierten Prozessablauf einer CO₂-Wäsche. Als Waschmittel wurde MEA eingesetzt. Das Fließbild der Simulation ist in Abbildung 7 zu sehen.

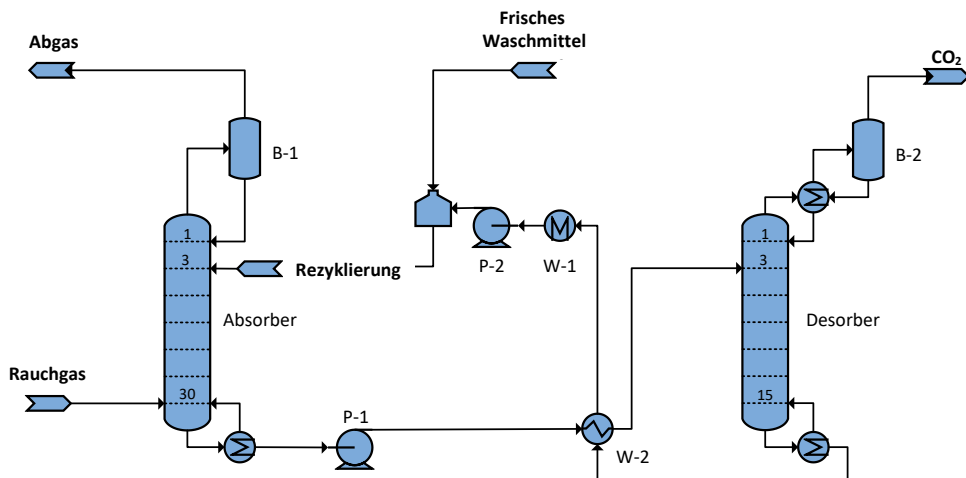


Abbildung 7: Prozessfließbild der CO₂-Wäsche mittels MEA

Das vorbereitete Rauchgas wird in den Absorber eingeleitet. Vom Kopf des Absorbers ausgehend durchströmt die CO₂-abgereicherte Lösung des Waschmittels die Kolonne. Das Waschmittel wird mit Wasser versetzt, somit ergibt sich eine MEA-Konzentration von 30 Massen-%. Beim Durchströmen der Absorberkolonne findet die Absorption statt, das CO₂ aus dem Rauchgas wird im Waschmittel gebunden. Die nun CO₂-angereicherte Lösung verlässt

den Absorber am Sumpf der Kolonne in flüssiger Form. Sie wird vom Sumpfstrom der Desorberkolonne vorgewärmt und in den Desorber eingeleitet. Die erhöhten Temperaturen im Desorber führen zur Desorption des im Waschmittel gebundenen CO_2 . Das nahezu reine CO_2 kann nun am Kopf der Kolonne abgezogen werden. Am Sumpf des Desorber wird die CO_2 -abgereicherte Lösung des Waschmittels ausgeleitet und geringe Verluste am Waschmittel wieder ausgeglichen (engl. Make-up stream). Mit der Rezyklierung des Waschmittels in den Absorber wird der Kreisprozess geschlossen. Im Rahmen der Analysen wurde die Rauchgaszusammensetzung an wechselnde industrielle Quellen angepasst. Die Ergebnisse der Simulationsreihen sind in Abbildung 8 zusammengefasst.

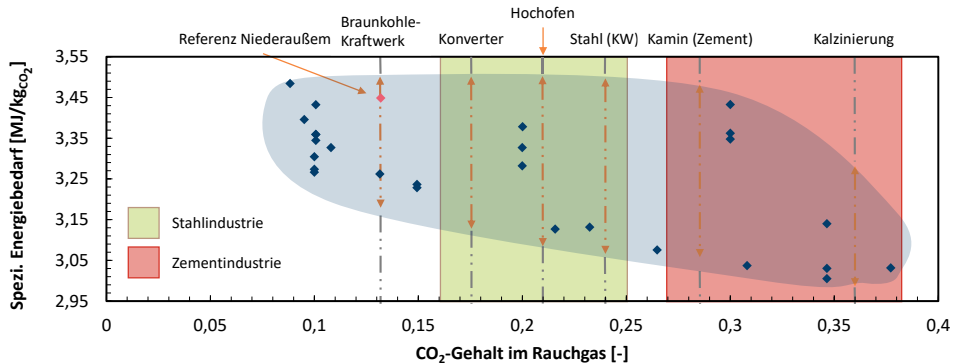


Abbildung 8: Spezifische Energiebedarfe zur Abscheidung von CO_2 mittel MEA aus industriellen Rauchgasen

Durch die in Abbildung 8 dargestellte Simulationsreihe kann ein weiterer Bereich von ca. 3-3,5 MJ/kgCO_2 als spezifischer Energiebedarf der CO_2 -Abscheidung identifiziert werden. Als ein Best-case Szenario für MEA wurde 3 MJ/kgCO_2 angesehen. Dieses Best-case Szenario lag nur leicht über dem spezifischen Energieverbrauch, welcher im WP1 durch den Einsatz von CESAR-1 ermittelt werden konnte. Daher wurde dieser Wert ebenfalls als repräsentativ für innovative Waschmittel ausgewählt.

2.1.3 Methanolherstellung als Basisverfahren für alternative Kraftstoffsynthesen

Die Verfahrensanalyse zur CO_2 -basierten Herstellung von Methanol steht der techno-ökonomischen Bewertung aller weiteren alternativen Kraftstoffe in diesem Bericht voran. Alle Zwischenprodukte für die Synthese von OME_{3-5} werden auf Basis von Methanol hergestellt und auch DME kann im zweistufigen Verfahren ausgehend von Methanol erzeugt werden. Diese Betrachtungsperspektive verdeutlicht die Bedeutung der Methanolsynthese innerhalb dieser Bewertung. In der Literatur sind viele Verfahrensanalysen zur Methanolsynthese zu finden. Die folgenden Analysen stützten sich daher auf die grundlegenden Auslegungen nach Otto [9] und Schemme [63]. Typische Prozessparameter der Synthese sind in Tabelle 5 zusammengetragen.

Tabelle 5: Prozesseigenschaften der CO₂-basierten Methanolsynthese

Verhältnis	Druck	Temperatur	Katalysator	Nebenprodukte	Quellen
H ₂ /CO ₂	bar	°C	-	(ppm)	-
3,4-10	69-80	240-250	CuO/ZnO/Al ₂ O ₃	Wasser	Doss et al. [65]
			Cu/ZnO/ZrO ₂ /	Alkohole (<390)	Pontzen et al. [66]
			Al ₂ O ₃ /SiO ₂	Methylformiat (<460)	
				Esther	Toyir et al. [67]

Ein in 2020 von Dieterich et al. [68] veröffentlichter Review beschreibt die Eigenschaften der Methanolsynthese sehr detailliert und vergleicht zusätzlich die konventionelle und CO₂-basierte Synthese. Nebenprodukte der CO₂-basierten Methanolsynthese fallen nur in geringen Mengen an (vgl. Tabelle 5) und können daher in der Prozesssimulation vernachlässigt werden. Für die Modellierung der Methanolsynthese wurde ein R-Gibbs-Reaktor eingesetzt. Dieser Reaktortyp bestimmt die Lage des chemischen Gleichgewichts, indem die Gibbs'sche Energie (auch freie Enthalpie) des Produktstroms minimiert wird. Diese Modellierung basiert nur auf der Bestimmung des chemischen Gleichgewichts und vernachlässigt in realen Reaktoren auftretende kinetische Limitierungen. Um die Kinetik der Methanolsynthese in die Modellierung einzubinden, müssten kinetische Modelle wie die von Graaf [69], Bussche und Froment [70] oder Seidel et al. [71] verwendet werden. Das Herstellungsverfahren beginnt mit der Kompression der beiden Edukte auf den Betriebsdruck des Reaktors (80 bar). Mit steigendem Betriebsdruck kann die Lage des chemischen Gleichgewichts in Richtung der Produkte verschoben werden (Prinzip von Le Chatelier), sodass die Reaktionsbedingungen die Bildung von Methanol begünstigen. Das Produktgas des Reaktors wird genutzt, um den Eduktstrom vorzuwärmen. Da im Reaktor nur ein teilweiser Umsatz der Edukte erfolgen kann, müssen die nicht umgesetzten Edukte (H₂ und CO₂) vom restlichen Produktgas abgetrennt und recycelt werden. Diese Aufgabe übernehmen zwei Flashtanks, welche bei unterschiedlichen Drücken betrieben werden, um eine energieeffiziente Rezyklierung mit geringem Druckverlust zu realisieren. Durch diese Rezyklierung ist es möglich, einen nahezu vollständigen Umsatz in dem beschriebenen Verfahren zu erzielen. Nach dem zweiten Flashtank besteht der Produktstrom aus einer annähernd gleichverteilten Mischung an Methanol und Wasser. Für die Produktaufbereitung wird daher eine Kolonne eingesetzt. Wasser ist in diesem Fall der Schwertsieder und wird im Kolonnensumpf abgeführt. Methanol verlässt die Kolonne am Kopf. Das Methanol wird schließlich auf 25 °C abgekühlt und gelöstes CO₂ kann durch einen weiteren Flashtank zurückgewonnen werden. Das beschriebene Verfahren wird durch das Prozessfließbild in Abbildung 9 repräsentiert.

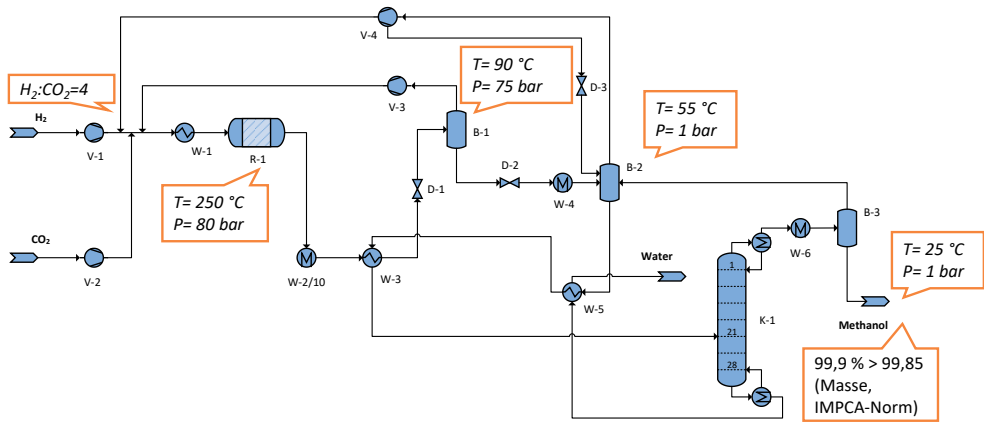


Abbildung 9: Prozessfließbild der CO₂-basierten Methanolsynthese, Prozessentwurf basiert auf Scheme [63]

Das synthetisierte Methanol verlässt den Prozess mit einer Reinheit von 99,9 % (massenspezifisch), was den Vorgaben der Internationalen Norm [72] zum Handel von Methanol des Verbandes der Methanolproduzenten und –konsumenten (engl. INTERNATIONAL METHANOL PRODUCERS & CONSUMERS ASSOCIATION (IMPCA)) entspricht. Die CO₂-basierte Methanolsynthese erreicht in der gezeigten Ausführung einen PtF-Wirkungsgrad von 52,7 %. Die vollständige Prozessanalyse wird durch die Bilanzierung der einzelnen Stoffströme und Betriebsmittel in Tabelle 6 gezeigt.

Die negativen Werte für die Dampfauskopplung auf Mitteldruck und Niederdruck-Niveau machen deutlich, dass der gesamte Prozess als exotherm bilanziert wird und die anfallende Wärme auf den unterschiedlichen Temperaturniveaus zur Verfügung steht. Der aus der Methanolsynthese ausgekoppelte Dampf kann z. B. in die CO₂-Abscheidung eingekoppelt werden und dort den spezifischen Energiebedarf bis zu 40 % decken. Diese Wärmeintegration kann den PtF-Wirkungsgrad auf 55,4 % steigern. Van-Dal et al. [73, 74] bestimmen in ihrer Prozessanalyse ähnliche Werte für die Wärmeauskopplung und –integration, sodass diese Analyse als validiert angesehen werden kann.

Tabelle 6: Prozessbewertung der CO₂-basierten Methanolsynthese

H ₂	CO ₂	Elektrizität	HD-Dampf	MD-Dampf	ND-Dampf
kg _{H2} /kg _{MeOH}	kg _{CO2} /kg _{MeOH}	MJ/kg _{MeOH}	MJ/kg _{MeOH}	MJ/kg _{MeOH}	MJ/kg _{MeOH}
0,189	1,373	1,296	0	-1,656	-0,094

2.1.4 Konventionelle Synthese von Dimethylether (DME)

Es wurde bereits beschrieben, dass für die Synthese von DME auf Basis von H₂ und CO₂ zwei unterschiedliche Verfahren genutzt werden können. Die direkte Synthese von DME besitzt dabei den Vorteil, dass das initial gebildete Methanol durch die DME Synthese abgebaut wird

und so höhere Umsätze möglich sind [75, S.29]. Um diesen Aspekt detailliert darzustellen, wurden die Methanol- und DME-Synthesen thermodynamisch analysiert. Diese Analyse bestimmt über das R-Gibbs Modell von ASPEN Plus® die Lage des chemischen Gleichgewichts, so können schließlich die potenziell möglichen Umsätze der Reaktionen bestimmt werden. Zusätzlich zeigt diese Analyse durch den Einsatz von CO-reichen und CO₂-reichen Synthesegasen die Herausforderungen der CO₂-basierten Synthesen. Die Ergebnisse der thermodynamischen Analyse der Verfahrenswege sind in Abbildung 10 dargestellt.

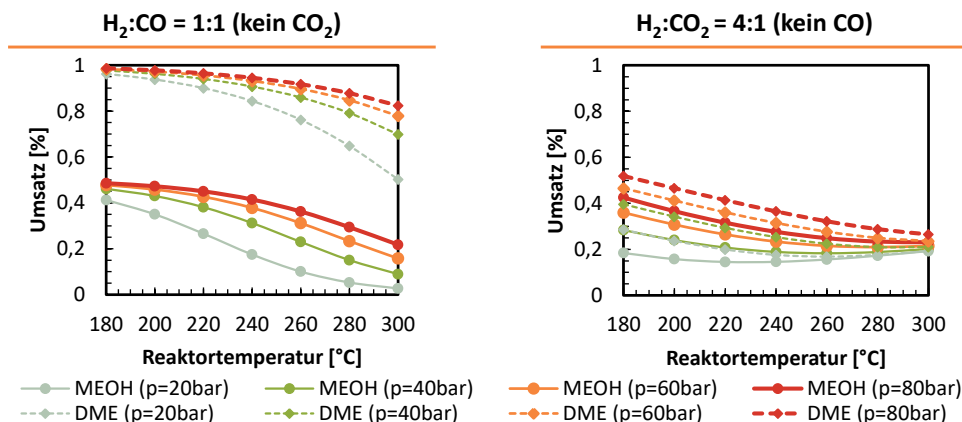


Abbildung 10: Kohlenstoffumsatz in Abhängigkeit von Methanol und direkter DME-Synthese bei unterschiedlichen Frischgaszusammensetzungen, eigene Simulationsdaten aus Prozesssimulation mit ASPEN Plus®, linke Seite wurde nach Renk [75, S.29] aufgebaut

Abbildung 10 macht deutlich, dass bei einer Synthese ausgehend von konventionellem Synthesegas mit einem hohen Anteil an CO, die direkte DME-Synthese sehr hohe Umsätze im Vergleich zur Methanolsynthese ermöglicht. Im Fall der Nutzung von erneuerbarem Frischgas, welches zu großen Teilen aus CO₂ besteht und kein CO enthält, kehrt sich das Bild um. Die Potenzialunterschiede in den Synthesen rücken deutlich näher zusammen und verschieben die maximal möglichen Umsätze in einen Bereich unter 60 %. Dennoch bleibt festzuhalten, dass auch in diesen Fällen die direkte DME Synthese deutlich höhere Potenziale aufzeigt als die Methanolsynthese. Dieser Potenzialunterschied ist ein wesentlicher Grund für die Untersuchung der direkten DME-Synthese im ALIGN-CCUS Projekt. Nach dieser anfänglichen Potenzialstudie wurden die beiden Verfahren der DME-Synthese durch Prozesssimulationen detailliert ausgearbeitet und miteinander verglichen.

Diese tiefgreifende Bewertung startete mit der Analyse der zweistufigen DME-Synthese. Der konventionelle Herstellungspfad für DME bildete somit die Grundlage der Analyse. In Analogie zur Methanolsynthese wurden zunächst die Prozesscharakteristiken in Tabelle 7 zusammengefasst.

Tabelle 7: Prozesseigenschaften der zweistufigen DME-Synthese

Verhältnis	Druck	Temperatur	Katalysator	Nebenprodukte	Quellen

Methanol	bar	°C	-	(ppm)	-
Ca. 100 %	16	250-350	γ -Al ₂ O ₃ HSZM-5	Wasser	Azizi et al. [8]

Das entwickelte Verfahren beruht auf der Vorarbeit von Otto [9]. Das in ASPEN Plus® implementierte Modell wird durch das Verfahrensfliessbild in Abbildung 11 visualisiert.

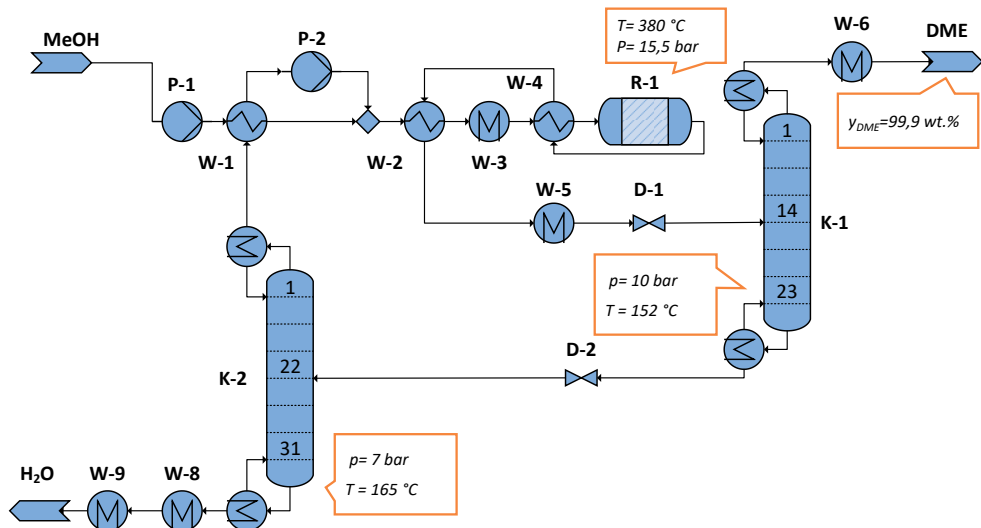


Abbildung 11: Prozessfließbild der 2-stufigen DME-Synthese

Für die zweistufige DME-Synthese wird nahezu reines Methanol als Edukt verwendet. Das Methanol muss zunächst auf den Betriebsdruck des Reaktors von 15,5 bar verdichtet werden. Danach wird der Frischgasstrom durch eine Kaskade von Wärmetauschern (W-1, W-2, W-3 und W-4) auf die notwendigen 260 °C vorgewärmt. Die Anordnung der Wärmetauscher erlaubt es, die durch die Produktströme zur Verfügung stehende Wärme in das Verfahren zu integrieren. Der Reaktor R-1 gilt als adiabat und gibt damit keine Reaktionswärme nach außen ab bzw. wird nicht aktiv gekühlt. Aus diesem Grund steigt die Temperatur innerhalb des Reaktors durch die Exothermie der Synthesereaktion auf 380 °C an. Der abgekühlte Produktstrom wird auf 10 bar gedrosselt und in die Kolonne K-1 eingeleitet. Die Kolonne K-1 trennt das Produkt DME von den restlichen Bestandteilen wie Methanol und Wasser. Auf diese Weise kann das Produkt DME mit einer Reinheit von 99,9 % (Masse) als Leichtsieder am Kopf der Kolonne K-1 entnommen werden. Anschließend wird das DME verflüssigt und auf relativ milde Lagerungsbedingungen von 45 °C und 10 bar abgekühlt. Die Stofftrennung innerhalb von Kolonne K-1 wird durch die Darstellung der Stoffmengenprofile in Abbildung 12 verdeutlicht.

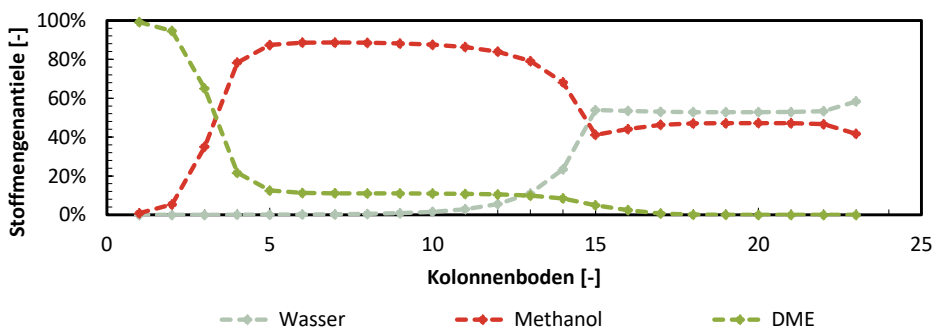


Abbildung 12: Produktaufbereitung durch Kolonne K-1 in der 2-stufigen DME-Synthese

Bei Mischungen von Wasser, Methanol und DME können sich Mischungslücken ausbilden. Diese Mischungslücken bestehen immer dann, wenn hohe Anteile an Wasser, mittlere Anteile an DME und niedrige Anteile an Methanol in der Mischung vorliegen. Eine solche Mischungszusammensetzung wird erfolgreich in der Kolonne K-1 vermieden, sodass auch die Mischungslücken als nicht relevant für die Prozessauslegung gelten. Wie in Abbildung 12 zu sehen ist, verlässt eine annähernd gleichverteilte Mischung aus Wasser und Methanol die Kolonne K-1 am Sumpf. Für ein effizientes Verfahren ist die Nutzung des nicht umgesetzten Methanols eine wesentliche Voraussetzung. Aus diesem Grund wird die Kolonne K-2 in das Verfahren integriert. Kolonne K-2 wird mit 7 bar betrieben und ermöglicht das Abziehen von Methanol am Kolonnenkopf. Dieses Methanol wird erneut auf den Betriebsdruck komprimiert und dem Frischgasstrom zugeleitet. Auf diese Weise findet eine Rezyklierung des Methanols statt. Am Sumpf der Kolonne K-2 wird das entstehende Produktwasser aus dem Verfahren herausgeleitet. Die energetische und stoffliche Bilanzierung des so aufgebauten Verfahrens wird durch Tabelle 8 zusammengefasst.

Tabelle 8: Prozessbewertung der zweistufigen DME-Synthese

MeOH	Elektrizität	HD-Dampf	MD-Dampf	ND-Dampf
kg _{MeOH} /kg _{DME}	MJ/kg _{DME}	MJ/kg _{MeOH}	MJ/kg _{MeOH}	MJ/kg _{MeOH}
1,391	0,005	0	-1,964	-0,571

2.1.5 Innovative Direktsynthese von Dimethylether (DME) aus H₂ und CO₂

Die Entwicklung der direkten DME-Synthese begann in den 90er Jahren [68]. Firmen wie Haldor Topsøe, KOGAS, JFE (ehemals NKK) und Air Products etablierten die Synthese von DME aus Synthesegas. Die Herstellungskapazitäten dieser meist im Bench-Verfahren ausgeführten Prozesse lag zwischen 50 kg pro Bench oder unterhalb von 9 t pro Tag. Azizi et al. [8] haben zusätzlich zur Literaturstudie der konventionellen DME-Synthese auch die Literatur zur Direktsynthese zusammengefasst. Die Eigenschaften des Verfahrens werden in Tabelle 9 komprimiert dargestellt.

Tabelle 9: Verfahrenseigenschaften der direkten DME-Synthese

Verhältnis	Druck	Temperatur	Katalysator	Nebenprodukte	Quellen
H ₂ :CO ₂	bar	°C	-	(ppm)	-
3-4	30-80	250-350	CuO/ZnO/Al ₂ O ₃ + γ-Al ₂ O ₃ HSZM-5	Wasser or	Azizi et al. [8]

Ein grundlegendes Konzept zur Nutzung von CO₂ in der direkten Synthese von DME wurde von Pontzen et al. [66] publiziert. Auch hier stützen sich die Verfahrensanalysen auf die Vorarbeit von Otto [9]. Otto [9] untersucht verschiedene Prozessbedingungen und identifiziert den Betrieb mit 30 bar als energetisches Optimum. Ein Betriebsdruck von 30 bar erscheint allerdings vor dem Hintergrund der Druckanforderung der Methanolsynthese als niedrig.

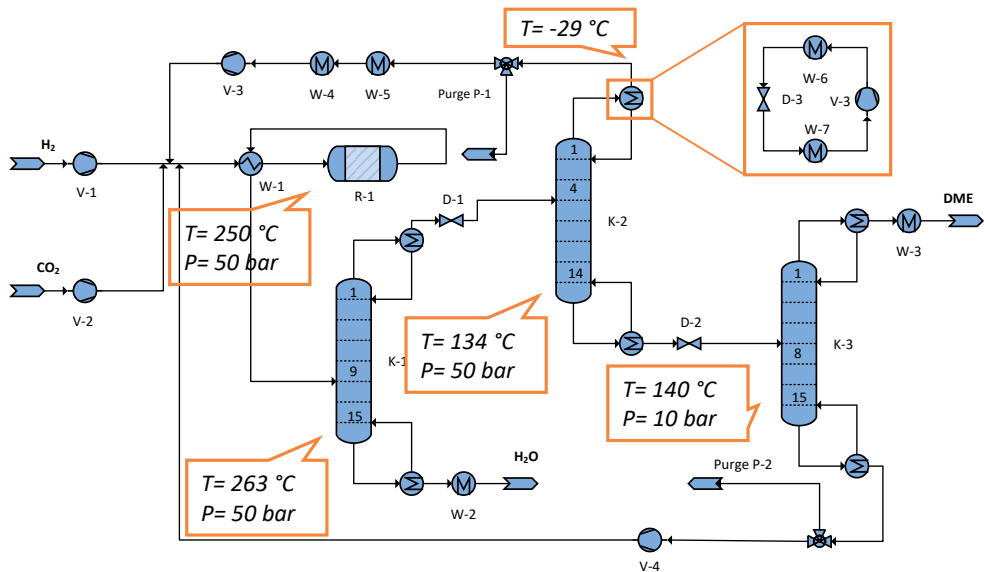


Abbildung 13: Verfahrensfliessbild der direkten DME-Synthese

Daher werden an dieser Stelle die Betriebsbedingungen an das Optimum der Methanolsynthese angepasst, d.h. der Reaktor R.1 wird mit einem erhöhten Druck von 50 bar und einer Temperatur von 250 °C betrieben. Der entwickelte Prozess ist in Abbildung 13 aufgezeichnet.

Der Kern der hier durchgeführten Prozesssimulation steckt in der Modellierung des chemischen Reaktors. Der Umsatz bei der direkten Synthese von DME wird mithilfe des R-Gibbs Reaktormodells von ASPEN Plus® abgeschätzt. Um die Darstellung der Reaktionsmodellierung in Verbindung mit Abbildung 10 tiefergehend zu analysieren, muss nicht nur der Kohlenstoffumsatz betrachtet werden sondern auch die Selektivität. Diese beiden

Größen werden in Abbildung 14 in Abhängigkeit des Betriebsdrucks und der Betriebstemperatur nebeneinander aufgezeigt.

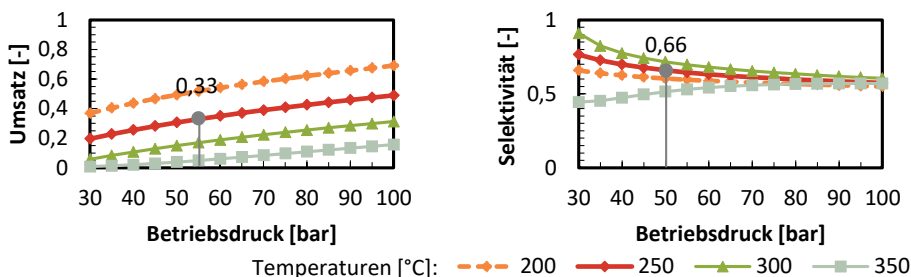


Abbildung 14: Sensitivitätsstudie der Leistungsgrößen des Reaktors R-1 zur direkten DME-Synthese

In dieser Sensitivitätsstudie werden der Betriebsdruck und die Betriebstemperatur variiert, während die Frischgaszusammensetzung konstant gehalten wird. Die Frischgaszusammensetzung wurde für die vorliegende Analyse aus der Prozesssimulation mit 250 °C Reaktortemperatur und 50 bar Betriebsdruck entnommen. In dieser Konfiguration besteht das Frischgas zu 72,6 vol.% aus H_2 und zu 24,2 vol.% aus CO_2 . Die restlichen Anteile im Frischgas sind auf CO, Methanol und DME zurückzuführen. Abbildung 14 zeigt, dass die theoretischen Umsätze im Reaktor mit steigenden Betriebsdrücken zunehmen. In diesem Zusammenhang sind die Umsätze antiproportional zu den Temperaturen zugeordnet, was bedeutet, dass im Einklang mit dem Prinzip nach Le Chatelier niedrige Temperaturen bevorzugt werden. Im Gegensatz zum Umsatz, fällt die Selektivität mit zunehmenden Drücken. Allerdings stabilisiert sich das Niveau mit zunehmend Drücken im Bereich von ca. 60 % für alle Betriebstemperaturen. Für die Simulation bedeutet diese Reaktorstudie, dass hohe Umsätze von ca. 33 % im Reaktor vorliegen. Dieser Wert und damit auch die gesamte Prozessanalyse müssen daher als eine Abschätzung zur positiven Seite gesehen werden. In realen Anwendungen werden die Umsätze voraussichtlich niedriger sein. Ein wesentlicher Aspekt in diesem Bereich sind die vorliegenden Katalysatoraktivitäten. Dieterich et al. [68] identifizieren einen möglichen Betriebsbereich zwischen 200 °C und 300 °C. Durch eigene CFD Simulationen mit bewährten kinetischen Modellen aus der Literatur wurde eine optimale Synthesetemperatur von 280 °C identifiziert. Die Prozessbewertung der direkten Synthese von DME erfolgt auf Basis der Prozesssimulation. Die Kompressionskältemaschine wird mit einem COP (engl. coefficient of performance) von 2 in die Bilanzierung eingerechnet. Typische Werte für Kältemaschinen können deutlich über dem angenommenen Wert liegen und so ist diese Parametrisierung als Abschätzung zur sicheren Seite zu betrachten. Im Gegensatz zur CO_2 -basierten Methanolsynthese und dem zweistufigen Verfahren der DME-Synthese ergibt sich für den entwickelten Prozess der direkten DME-Synthese ein zusätzlicher Energiebedarf für den Betrieb der Kolonne K-1. Die Sumpftemperatur liegt mit 263 °C oberhalb der maximalen Dampftemperatur der Betriebsmittel, was dazu führt, dass in diesem Ansatz eine zusätzliche Wärmequelle in das System eingebunden werden muss, um diesen Verbraucher zu versorgen (hier als Zusatzwärme deklariert). Zusammengefasst ergeben sich die in Tabelle 10 aufgeführten Bilanzgrößen.

Tabelle 10: Prozessbewertung der direkten DME-Synthese

H₂	CO₂	Elektrizität	HD-Dampf	MD-Dampf	ND-Dampf	Zusatzwärme
kg _{H2} /kg _{DME}	kg _{CO2} /kg _{DME}	MJ/kg _{DME}	MJ/kg _{DME}	MJ/kg _{DME}	MJ/kg _{DME}	MJ/kg _{DME}
0,266	1,930	1,065	0	0,96	-0,27	1,68

Tabelle 10 nimmt durch die direkte Synthese Bezug auf einen vollständigen Produktionspfad und kann nicht direkt mit Tabelle 8 verglichen werden, da dies nur den einzelnen Schritt der DME-Synthese innerhalb des zweistufigen Verfahrens bilanziert. Eine detaillierte Gegenüberstellung der beiden Verfahren folgt im Abschluss der technischen Analyse (siehe Abschnitt 2.1.7). Die Bilanzierung der direkten DME-Synthese steht im Einklang mit den Simulationsergebnisse von Otto [9]. Im direkten Vergleich mit Otto [9] wurden aber leicht höhere Werte für den Wärme- und Elektrizitätsbedarf bestimmt. Es kann bereits anhand des erhöhten Energiebedarfs abgelesen werden, dass die direkte Synthese im Vergleich zum zweistufigen Verfahren einen geringeren Wirkungsgrad besitzt. Ein marginaler Unterschied wird durch die Integration der Spülgasströme (engl. purge gas streams) hervorgerufen. Im Fall der direkten DME-Synthese war es aus Konvergenzgründen notwendig kleine Teile der Rückführströme (ca. 0,1 %) aus dem Prozess auszuleiten.

Im Zuge der Analyse der DME-Produktionspfade wurde auch nach möglichen Optimierungen der Verfahrensführung gesucht. Als eine innovative Möglichkeit die Reaktionsführung der direkten DME-Synthese zu verbessern wird der in-situ Abzug von Produktwasser aus dem Reaktor angesehen. Durch den Abzug des Produktwassers aus dem Reaktionsraum, wird das chemische Gleichgewicht verschoben und Produktinhibierungen abgebaut. Dadurch sind theoretisch höhere Umsätze möglich. Ein derartiges Verfahren kann adsorptiv ausgeführt werden, wenn z.B. Zeolithe in das Festbett des Reaktors integriert werden. Das Adsorbens wird mit zunehmendem Betrieb stärker beladen. Eine Entladung oder Regenerierung ist durch das Anheben der Betriebstemperatur möglich, d.h. in einem technischen Verfahren würden mehrere Reaktoren genutzt werden, welche wechselweise mit Wasser be- und entladen werden würden. Ein solches System wurde durch eine sehr simple Modellierung in ASPEN Plus ® analysiert. Der bestehende Reaktor R-1 wurde um eine selektive Wasserabscheidung im Produktstrom erweitert. Im Anschluss an diese Abscheideeinheit wurde ein zweiter Reaktor platziert um das neue chemische Gleichgewicht zu bestimmen. Eine Variation der Abscheiderate des Produktwassers wurde durchgeführt, um die Potenziale dieser Technologie und deren Einfluss auf das Verfahren der direkten DME-Synthese zu prüfen. Die Ergebnisse dieser Simulationsstudie werden in Abbildung 15 gezeigt.

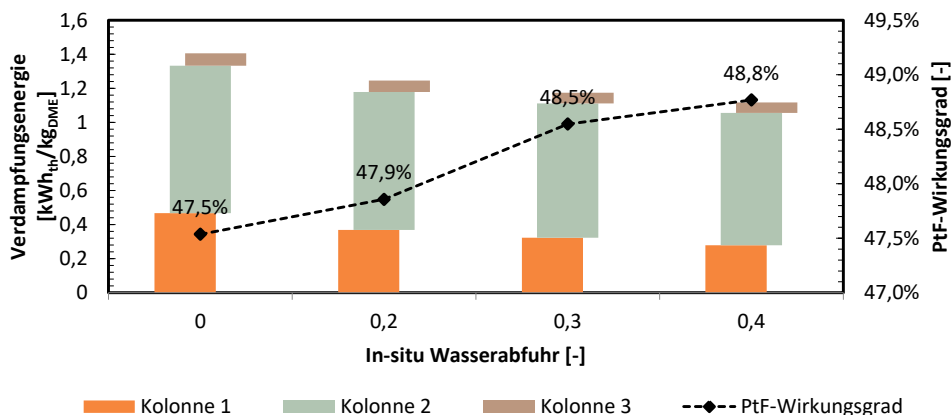


Abbildung 15: Abschätzung der Auswirkungen einer in-situ Wasserabscheidung auf den Wirkungsgrad der direkten DME-Synthese

Der initiale CO₂-Umsatz von 37,2 % wird durch den Einsatz der in-situ Wasserabscheidung auf 43,62 % erhöht, wenn zeitgleich 40 % des im Produktstrom enthaltenen Wasser abgeführt wird. Diese Prozessintensivierung entlastet die Kolonnen und steigert den Wirkungsgrad des gesamten Verfahrens. Der Wirkungsgrad und die bestimmten Energiebedarfe der einzelnen Kolonnen sind in Abbildung 15 über der postulierten Abscheiderate aufgetragen. Der PtF-Wirkungsgrad steigt in Abhängigkeit von der Abscheiderate von 47,5 auf 48,8 %. Aus dieser Analyse kann geschlossen werden, dass durch innovative Verfahren wie der in-situ Wasserabscheidung die direkte DME-Synthese verbessert werden kann, aber diese Verbesserungen können nicht die Wirkungsgradunterschiede zu dem zweistufigen Verfahren ausgleichen. Aus diesem Grund wird im folgenden Bericht das zweistufige Verfahren als Referenzverfahren ausgewählt um die techno-ökonomische Bewertung abzuschließen.

2.1.6 Verfahrenstechnische Analysen zur Optimierung der Demonstratorstechnologie durch die Synthesen von langkettigen Polyoxymethyldimethylether (OME₃₋₅)

Im Rahmen des ALIGN-CCUS Projekts galt es die Eignung von OME₃₋₅ als alternativen Kraftstoff und die Erweiterbarkeit der Demonstratoranlage zur Produktion von OME₃₋₅ zu untersuchen. Auf Basis der Ergebnisse dieser techno-ökonomischen Analyse der Produktionspfade für OME₃₋₅ wird am Ende des Berichts eine Empfehlung für die weiteren Ausbaustufen der Anlage ausgesprochen. Die folgende technische Analyse der Produktionspfade von OME₃₋₅ wurde durch die Herausforderungen der Modellierung und die notwendigen Einzelschritte (nach Abbildung 3) strukturiert. Nach Burger et al. [15] existieren die Routen A,B und C für die Synthese von OME₃₋₅.

- Route A: „Direkte“ Synthese ausgehend von Methanol und Formaldehyd
- Route B: Wasserfreie (konventionelle) Route über Methylal und Trioxan
- Route C: Veredelung von DME mit Trioxan

Die verschiedenen Verfahren wurden wie die Methanol- und DME-Synthesen mithilfe der Prozesssimulationssoftware ASPEN Plus® modelliert. Die Modellierung mittels ASPEN Plus zeigte sich dabei als sehr komplex, da zwei grundlegende Herausforderungen überwunden werden mussten:

- Zum einen treten in den Prozessen Mischungen aus Methanol, Formaldehyd und Wasser auf. Diese Mischungen besitzen ein hochgradig nicht ideales thermodynamisches Verhalten, was auf die Bildung von instabilen Zwischenprodukten wie Methylen Glykolen (MG_n) und Hemiformalen (HF_n) zurückzuführen ist. Dieses Verhalten kann u. A. durch das von Maurer [76] entwickelte Modell widergegeben werden. Die erfolgreiche Implementierung dieses Modells in ASPEN Plus® war eine zentrale Arbeitsaufgabe innerhalb dieser Analyse.
- Zum anderen fehlen viele notwendige Stoffdaten für die Modellierung innerhalb der von ASPEN Plus® zur Verfügung stehenden Datenbanken.

Die beiden Herausforderungen werden durch Abbildung 16 visualisiert und deutlich gemacht. Die Ausführung und Validierung der entwickelten Modellierungsansätze wurde von Schemme et al. [77] publiziert. Für detaillierte Ausführungen wird auf diese Veröffentlichung verwiesen werden, es folgt eine Kurzfassung. Das VLE-Modell (engl. vapor-liquid-equilibrium) von Maurer [76] verwendet das Universal Quasichemical Functional Group Activity Coefficients Modell (UNIFAC). Das UNIFAC-Modell beruht auf der Identifizierung von funktionalen Gruppen und ermöglicht es, Stoffeigenschaften und Aktivitätskoeffizienten von einzelnen Komponenten hervorzusagen. Das Modell nach Maurer [76] im Vergleich zu dem von ASPEN Plus® verwenden unterschiedliche mathematische Formen um die Gleichgewichte zu beschreiben. Aus diesem Grund war eine direkte Übersetzung des Modells von Maurer [76] in ASPEN Plus® nicht möglich. Mit dem Ziel eine bestmögliche Wiedergabe des ursprünglichen Modells in ASPEN Plus® zu übersetzen, wurde eine numerische Regression mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate nach Gauss durchgeführt. Diese Regression wurde auf einen Temperaturbereich von 0-100 °C limitiert, da dies der anvisierte Einsatzbereich innerhalb der OME₃₋₅-Synthesen ist. Für die Bestimmung der zugehörigen Zustandsgrößen wurde die Redlich-Kwong Gleichung für das Realgasverhalten angewendet. Hier war ein weiterer Unterschied zwischen der implementierten Modellierung und dem Modell nach Maurer festzuhalten, denn im Originalmodell wurde das ideale Gasgesetz angewendet. Die Verwendung der Redlich-Kwong Zustandsgleichung verbessert die Vorhersagegenauigkeit in Anwendungen mit erhöhten Drücken.

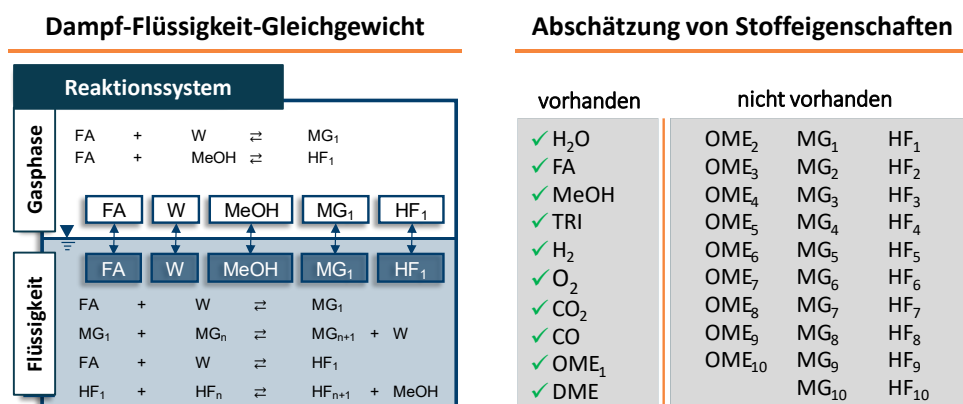


Abbildung 16: Herausforderungen der Modellierung für die Simulation von OME₃₋₅-Herstellungspfaden, Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichtsmodell ist von Maurer [76] adaptiert, eigene Darstellung

Abbildung 17 demonstriert die hervorragende Übereinstimmung des implementierten Modellierungsansatzes mit den von Maurer bestimmten experimentellen Daten.

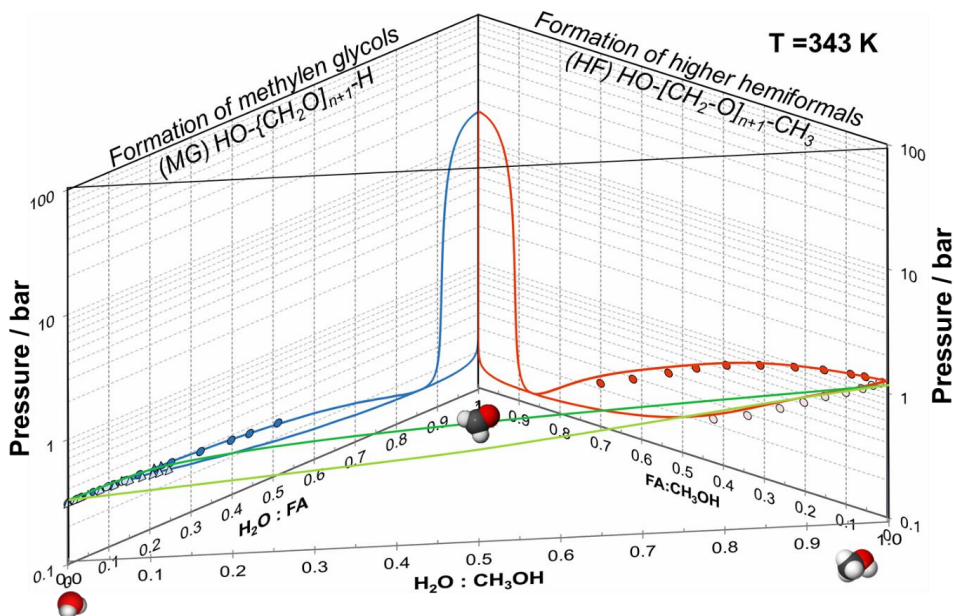


Abbildung 17: Validierung der VLE-Vorhersage des implementierten Modellierungsansatz im Vergleich mit Daten nach Maurer [76]

Abgesehen von Mischungen mit hohem Formaldehyd-Anteilen (ca. 90 %) betrugen die normierten Abweichungen zwischen der Modellierung und den experimentellen Daten niemals mehr als 4,88 %. Diese sehr hohe Genauigkeit validierte somit den Modellierungsansatz mit der beschriebenen Limitierung. Für die Modellierung der OME₃₋₅-Produktionspfade waren Mischungen mit derartig hohem Formaldehydanteil nicht zu erwarten und daher konnte der Modellierungsansatz auch für sämtliche Verfahren innerhalb des Produktionssystems eingesetzt werden.

Für die Schätzung von Stoffdaten besitzt ASPEN Plus® verschiedene Methoden wie z. B. Joback und Gani. Das in ASPEN Plus® implementierte Property Component Estimation System (PCES) setzt die Kenntnisse von Molekülstrukturformeln und Normalsiedepunkten voraus. Die Normalsiedepunkte der langkettigen OME_n-Moleküle und auch der instabilen Zwischenprodukte mussten daher abgeschätzt werden. In diesen Fällen wurde die Annahme getroffen, dass die Abstände der Siedepunkte innerhalb der homologen Reihen konstant sind. In mathematischer Form gibt die folgende Gleichung (Gl. 7) die Verhältnisse wider.

$$\Delta T_s \quad T_s(OME_n) - T_s(OME_{n-1}) \quad = \quad T_s(MG_n) - T_s(MG_{n-1}) \quad = \quad T_s(HF_n) - T_s(HF_{n-1}) \quad \text{Gl. 7}$$

Für die Anwendung in der Modellierung mussten also die Normalsiedepunkte der kurzkettigen OME_n-Moleküle bekannt sein. Boyd [78] hat eben diese homologe Reihe ($2 \leq n \leq 5$) untersucht und experimentelle Daten zu den Dampfdrücken veröffentlicht. Diese Daten wurden in der Modellierung genutzt um eine lineare Regression an den Korrelationsparametern

durchzuführen. Abschließend wurden die benötigten Normalsiedepunkte bestimmt. Mit der vorgestellten Methodik zur Parameterschätzung und zur Beschreibung von Dampf-Flüssigkeitsgleichgewichten ist es möglich die verschiedenen Verfahren der OME₃₋₅-Produktion durch Prozesssimulationen zu analysieren.

2.1.6.1 Synthese von Formaldehyd

Die Synthese von Formaldehyd ist für alle Routen innerhalb des OME₃₋₅-Produktionssystems von Bedeutung, da entweder ausgehend von Formaldehyd Trioxan (Routen B und C) oder Formaldehyd direkt für die Synthese von OME₃₋₅ (Route A) verwendet wird. Für die Herstellung von Formaldehyd stehen nach Ullmann's Enzyklopädie [79] das Silberkatalysatorverfahren (auch BASF-Prozess) und der Metalloxid (auch FORMOX-Prozess) zur Verfügung. Pelaez et al. [80] haben gezeigt, dass Formaldehyd auch durch die partielle Oxidation von DME hergestellt werden kann, aber dieses Verfahren wurde für die techno-ökonomische Bewertung ausgeschlossen. Franz et al. [79] schlussfolgern, dass das Silberkatalysatorverfahren eine bessere ökonomische Leistungsfähigkeit im Vergleich zum FORMOX-Prozess besitzt. Aus diesem Grund wurde das Silberkatalysatorverfahren für die folgende Analyse ausgewählt und modelliert. Abgesehen von den ökonomischen Aspekten ermöglicht der verwendete Silberkatalysator kürzere Verweilzeiten aufgrund von höheren Aktivitäten. Der Edelmetallkatalysator kann zudem deutlich besser und schneller regeneriert werden. Diese verbesserten Katalysatoreigenschaften führen u. a. dazu, dass der Produktstrom eine höhere Produktqualität besitzt als im Metalloxidverfahren. Die wesentlichen Merkmale des Silberkatalysatorverfahrens sind in Tabelle 11 zusammengefasst.

Tabelle 11: Verfahrenseigenschaften der Formaldehydsynthese nach dem Silberkatalysatorverfahren

Verhältnis	Druck	Temperatur	Katalysator	Nebenprodukte	Quellen
Methanol	bar	°C	-	(ppm)	-
Ca.100 %	1	590-650	Ag Fe-MoO _x -V _y O _z	Wasser Ameisensäure Methylenglykole Hemiformale	Franz et al. [79] Emig et al. [81]

Tabelle 11 zeigt, dass das Produkt der CO₂-basierten Methanolsynthese als Eduktstrom in die Formaldehydsynthese eingeleitet werden kann. Der Eduktstrom besteht nahezu vollständig aus Methanol. Das Methanol wird verdampft und mit vorgewärmter Luft vermischt. Die vorgewärmte Luft kann durch eine Verbrennung von Restgasen aus dem Absorber bereitgestellt werden. Im Reaktor R-1 wird das Methanol partiell oxidiert. Für die Abbildung dieser Reaktion wurde das von Emig et al. [81] entwickelte kinetische Modell implementiert. Die im Reaktor herrschenden hohen Temperaturen von ca. 590-650 °C unterdrücken die Bildung von Nebenprodukten wie z. B. Ameisensäure [79]. Daher konnte die Bildung von Ameisensäure in der Modellierung ebenso unterdrückt werden. Die Leistung des Reaktors R-1 konnte anhand einer Sensitivitätsstudie optimiert werden. In dieser Simulationsstudie wurden die Katalysatormasse und das Frischgasverhältnis aus Methanol und Sauerstoff variiert. Die maximale Ausbeute von 0,015 g_{cat}/g_{MeOH} konnte bei einem molaren Verhältnis

von 0,5 (Sauerstoff zu Methanol) erreicht werden. In diesem Fall lag der Umsatz an Methanol bei 72,4 %. Neben dem gewünschten Produkt wird auch aufgrund der zusätzlichen Verbrennung CO₂ aus dem Prozess emittiert. Der Produktstrom des Reaktors besteht aus Formaldehyd, Wasser und Methanol. Um diese Mischung aufzutrennen, wird ein spezielles Waschverfahren angewendet. Als Waschmittel in Kolonne C-1 wird Wasser verwendet. Die Dosierung des Wassers wird so eingestellt, dass am Sumpf der Kolonne C-1 ein Verhältnis von 1:1 an Formaldehyd und Wasser austritt. Über den Kopf der Kolonne C-1 wird eine kleine Menge an Methanol ausgeleitet, welche im Abgasbrenner R-2 umgesetzt wird, um die notwendige Wärme für die Luftvorwärmung bereitstellen zu können. Anstelle des Wassers könnte auch eine Mischung aus der OME₁-Produktion genutzt werden. Da dieser Prozess nur in der Route B verwendet wird, besteht diese Möglichkeit nicht für die Routen A und C. Der Sumpfstrom der Kolonne C-1 besitzt allerdings immer noch Anteile an Methanol. Diese Lösung (Formalin I) kann für die Synthese von OME₁ und OME₃₋₅ nach Route A genutzt werden, da hier im ersten Verfahrensschritt Methanol zugemischt wird. Für die Routen B und C muss die vorliegende Mischung weiter aufbereitet werden, d. h. durch eine zusätzliche Kolonne C-2 wird das restliche Methanol abgetrennt und dem Prozess zugeführt. Die aufbereitete Mischung von Formaldehyd und Wasser (Formalin II) kann dann am Sumpf von Kolonne C-2 abgezogen werden. Die Bilanzierung der verschiedenen Prozesse ist in Tabelle 12 festgehalten.

Tabelle 12: Prozessbilanzierung der entwickelten Formaldehydsyntheseverfahren

MeOH	MeOH	Elektrizität	HD-Dampf	MD-Dampf	ND-Dampf
	kg _{MeOH} /kg _{FA}	MJ/kg _{FA}	MJ/kg _{FA}	MJ/kg _{FA}	MJ/kg _{FA}
Formalin I,A	0,763	0	-4,148	-0,264	-0,174
Formalin I,B	0,740	0	-3,948	-0,256	-0,168
Formalin II	0,706	0	-5,07	-0,323	4,68

Die Bilanzierung der einzelnen Anordnungen in der Formaldehydsynthese zeigt den deutlichen Einfluss der zusätzlichen Kolonne. Dennoch bleiben alle entwickelten Verfahren in der Summe exotherm.

2.1.6.2 Synthese von Trioxan

Trioxan wird im OME₃₋₅-Produktionssystem für die Synthesen nach den Routen B und C verwendet. Trioxan wird typischerweise aus Formaldehyd hergestellt. Grützner [82] hat ein Syntheseverfahren entwickelt, welches auf Destillation beruht. Dieses Verfahren wurde als Vorlage für die eigene Prozessentwicklung genutzt. Der Ringschluss von Trioxan wird homogen in Schwefelsäure katalysiert. Um die Bildung typischer Nebenprodukte wie Ameisensäure und Methylformiaten zu unterdrücken, wird der Reaktor bei niedrigen Temperaturen von ca. 90 °C betrieben. Wie bereits bei der Verfahrensbeschreibung der Formaldehydsynthese erwähnt, wird für die Trioxansynthese eine Mischung von Formaldehyd und Wasser (1:1) genutzt. Wichtig ist, dass an dieser Stelle kein Methanol in der Mischung vorliegt, d. h. hier wird die Formalin II Mischung verwendet. Eine Zusammenstellung der typischen Prozessbedingungen ist in Tabelle 13 zu finden.

Tabelle 13: Verfahrenseigenschaften der Trioxansynthese nach dem Verfahren von Grützner [82]

Verhältnis	Druck	Temperatur	Katalysator	Nebenprodukte	Quellen
Fa-H ₂ O- MeOH	bar	°C	-	(ppm)	-
50:50:0	1	90	Schwefelsäure	Wasser Ameisensäure Methylformiate	Grützner [82]

Das adaptierte Fließbild der modellierten Trioxansynthese ist in Abbildung 18 dargestellt. In dem entwickelten Verfahren zur Synthese von Trioxan wird ein Gleichgewichtsreaktor eingesetzt, um die Synthesereaktion abzubilden. Die Reaktion läuft dabei über das instabile Methylenglykol (n=3) ab. Die Methylenglykole liegen nach dem Modell von Maurer [76] in einer Gleichgewichtsverteilung in der flüssigen Phase vor. Das benötigte Methylenglykol mit der Kettenlänge 3 liegt allerdings mit einem Anteil von 3,8 % nur zu einem sehr geringen Anteil im Eduktstrom vor. Das bedeutet, dass die für die Reaktion notwendigen Triebkräfte nur im geringen Maße von der Eduktseite ausgehen. Eine auf diese Weise eingeleitete Reaktion kann nur sehr geringe Umsätze erzielen. Nach dem Reaktor besitzt Trioxan lediglich einen Anteil von 1,65 % am Produktstrom. Aus diesem geringen Umsatz wird die zentrale Herausforderung der Trioxansynthese deutlich. Die geringen Mengen an produziertem Trioxan müssen aufkonzentriert werden. Für diese Aufgabe werden in dem Verfahren mehrere Kolonnen vorgesehen. Die Destillation beherbergt mit zwei Azeotropen (A1: 91,3 °C & 1 bar; A2: 98,6 °C & 1 bar) zusätzliche Herausforderungen. In der ersten Kolonne wird die Konzentration von Trioxan auf 15,7 % erhöht. Die restlichen Bestandteile können dem Prozess erneut zugeführt werden. Mit Kolonne K-2 ist es dann möglich die Konzentration von Trioxan bis in die Nähe des azeotropen Punktes zu erhöhen. Für eine weitere destillative Trennung muss der Druck angepasst werden. Daher wird Kolonne K-3 mit 4,2 bar betrieben. Auf dieser Druckstufe ist es möglich die Reinheit des Trioxans auf 99,98 % zu erhöhen. Der Sumpfstrom von Kolonne K-3 enthält neben dem Produktwasser auch noch große Bestandteile an unverbrauchten Edukten, sodass aus Gründen der Prozesseffizienz eine weitere Stofftrennung erfolgen muss. Auch hier muss der Druck auf ein erhöhtes Niveau von 3 bar angepasst werden, damit Kolonne K-4 das Wasser abscheiden kann.

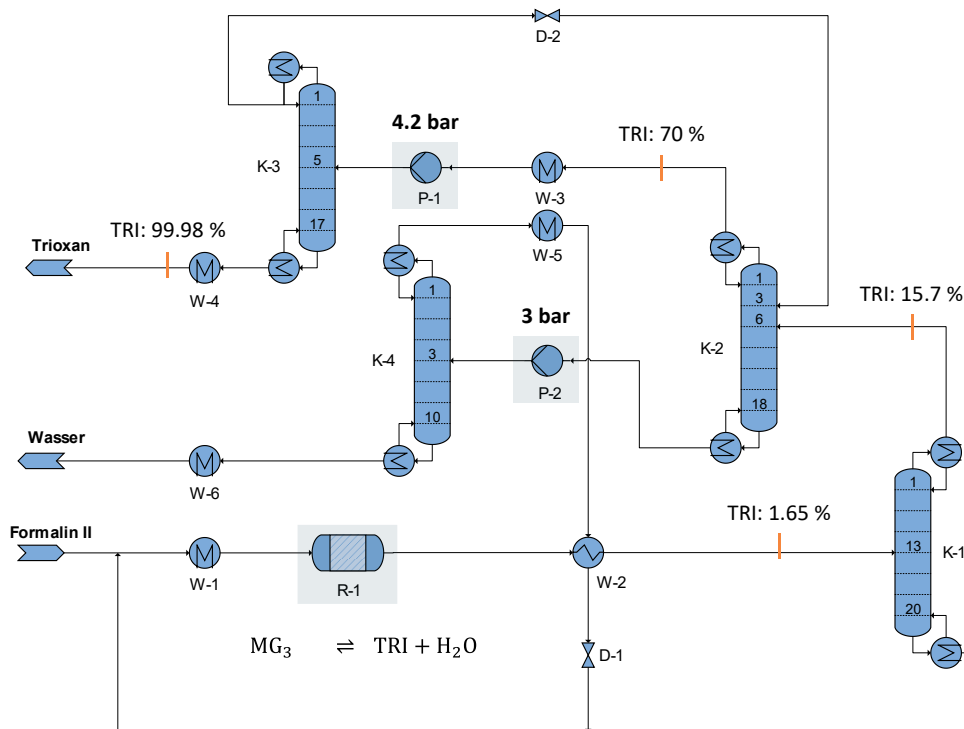


Abbildung 18: Verfahrensfließbild der entwickelten Trioxansynthese

Die Energie- und Massenbilanz des entwickelten Trioxanprozesses ist in Tabelle 14 dargestellt.

Tabelle 14: Prozessbewertungen des entwickelten Trioxansyntheseverfahrens

FA	Elektrizität	HD-Dampf	MD-Dampf	ND-Dampf
kg _{FA} /kg _{TRI}	MJ/kg _{TRI}	MJ/kg _{TRI}	MJ/kg _{TRI}	MJ/kg _{TRI}
2,013	0,006	15,619	18,911	-2,035

Die Bilanzierung macht deutlich, dass das Trioxanverfahren für den Betrieb der zahlreichen Kolonnen sehr viel Energie benötigt (HD- und MD-Dampf). Dies kann als Schlüsselement in der Prozessbewertung angesehen werden, da so erheblicher Einfluss auf die Bilanzierung der gesamten Produktionskette genommen wird. Es soll an dieser Stelle zusätzlich festgehalten sein, dass in der Literatur u. A. bei Grutzner [82, S.151] von unlösbaren Konvergenzproblemen bei der Modellierung mit ASPEN Plus® gesprochen wird. Die hier beschriebene Prozessanalyse beweist, dass diese Probleme und mit einem geeigneten Modellierungsansatz überwindbar sind.

2.1.6.3 Synthese von kurzkettigen Polyoxymethyldimethylether (OME₁)

OME₁ wird in der Synthese von OME₃₋₅ als Zwischenprodukt nach Route B benötigt. Die Synthese von OME₁ findet in saurer Umgebung statt und verwendet den ersten Oligomer aus der Reihe der Hemiformalen. Zusätzlich zu OME₁ wird zeitgleich auch Produktwasser gebildet. Die Reaktionsgleichung ist der Arbeit von Weidert et al. [83] entnommen (siehe Gl. 8).



Die Verfahrensentwicklung setzte an der Arbeit von Drunsel [84] an. In diesem Verfahren wird das Hemiformal HF₁ durch Oligomerisierungsreaktionen gebildet, welche in wässrigen Formaldehydlösungen auftreten. Das Fließbild des Verfahrens ist in der folgenden Abbildung 19 aufgezeichnet.

Zu Beginn des Verfahrens wird die Formaldehydlösung (Formalin I) mit einem hohen Überschuss an Methanol gemischt. Der Methanolüberschuss sorgt dafür, dass die Bildung von langkettigen OME_n-Molekülen unterdrückt wird [84, S.70]. Das Massenverhältnis von Methanol zu Wasser zu Formaldehyd wird auf 8:1:1 definiert. Zudem stellt der Methanolüberschuss sicher, dass das vorliegende Formaldehyd vollständig umgesetzt wird, was die weiteren weitere Prozessauslegungen und im Speziellen das Design der nachfolgenden Kolonnen vereinfacht. Für die Modellierung der Synthesereaktion wird das kinetische Modell nach Drunsel [84] verwendet. Unter den eingestellten Reaktionsbedingungen entsteht OME₁, was einen Massenanteil von 22,2 % im Produktstrom vorweisen kann.

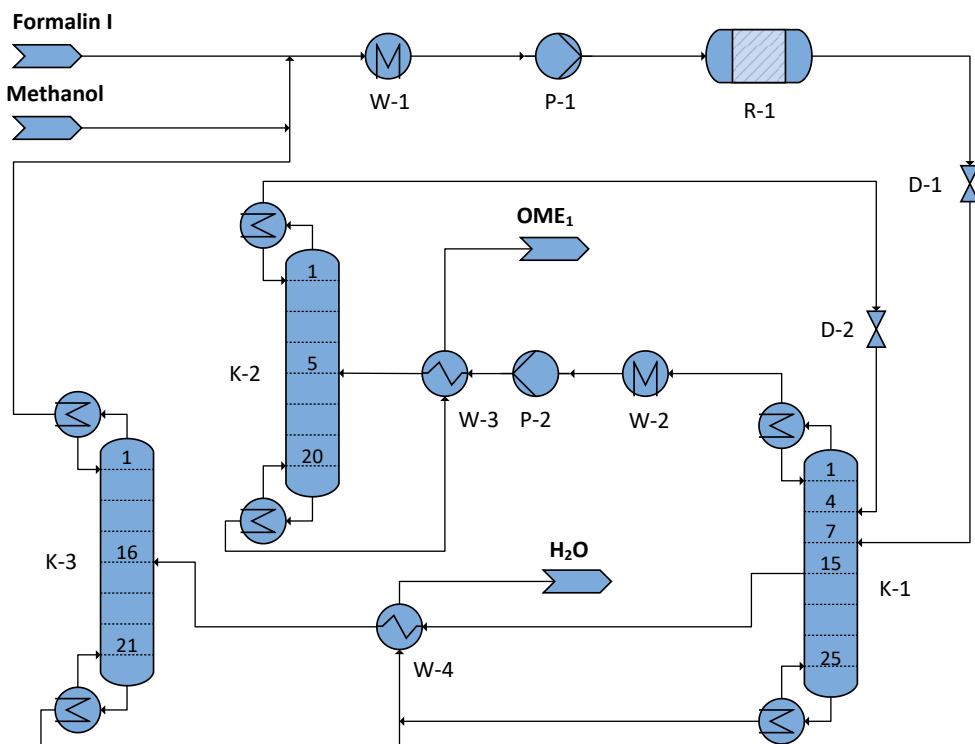


Abbildung 19: Verfahrensfliessbild der OME₁-Synthese

Die Mischung im Produktstrom weist einen azeotropen Punkt auf, sodass die Mischung nicht in einem einzelnen Verfahrensschritt aufgereinigt bzw. getrennt werden kann. Kolonne K-1 führt über den Kopfstrom das Zielprodukt OME₁ mit einer Reinheit von 93,9 % (Masse) ab. Um auf eine deutlich höhere Reinheit zu kommen, wird der Druck zwischen K-1 und K-2 auf 4 bar erhöht. Der Schwertsieder in Kolonne K-2 ist diesmal das OME₁, welches mit einer Reinheit von 99,9 % den Prozess verlässt. Die Abtrennrate in Kolonne K-2 ist allerdings nicht besonders gut, sodass ein großer Anteil an OME₁ ebenfalls über das Kopfprodukt ausgeschleust wird. Aus diesem Grund muss dieser Strom im Prozess rezykliert werden. Die Massenanteile von diesem ersten Rezyklierstrom passen gut in das Konzentrationsprofil der Kolonne K-1, sodass dieser Strom nach der zugehörigen Entspannung im oberen Bereich der Kolonne K-1 eingeleitet werden kann. Die Kolonne K-1 ist eine spezielle Anordnung, da hier zusätzlich zu den vorhandenen zwei Eingängen ein Seitenabzug integriert ist. Dieser Seitenabzug nutzt aus, dass in der Mitte der Kolonne sehr hohe Konzentrationen an Methanol vorliegen. Dieses Methanol lässt sich leicht von den Restbeständen an Wasser in Kolonne K-3 trennen. Das Methanol kann auf diese Weise wieder dem Prozess zur Verfügung gestellt werden. Über die beiden Sumpfe der Kolonnen K-1 und K-2 wird dann schließlich das Produktwasser aus dem Prozess abgeführt. Das Konzentrationsprofil der Kolonne K-1 wird durch Abbildung 20 gezeigt.

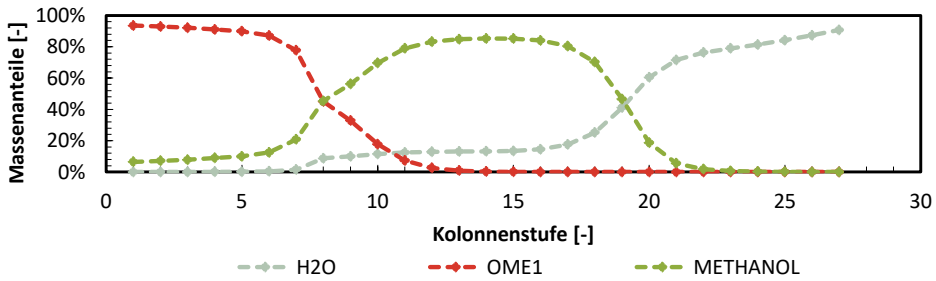


Abbildung 20: Konzentrationsprofil der Kolonne K-1 innerhalb der Synthese von OME₁

Der entwickelte Prozess benötigt vorwiegend thermische Energie für den Betrieb der verschiedenen Kolonnen. Dadurch, dass die Kolonnen mit Temperaturen unterhalb von 100 °C arbeiten, kann in diesem Fall ausschließlich auf den Gebrauch von Niederdruckdampf zurückgegriffen werden. Der Bedarf an Elektrizität ist durch den Einsatz der Pumpen und das niedrige Druckniveau sehr gering. Die Ergebnisse werden von Tabelle 15 festgehalten.

Tabelle 15: Prozessbewertungen des entwickelten OME₁-Syntheseverfahrens

FA	Formalin I	Elektrizität	HD-Dampf	MD-Dampf	ND-Dampf
kg _{MeOH} /kg _{OME1}	kg _{FA} /kg _{OME1}	MJ/kg _{TRI}	MJ/kg _{TRI}	MJ/kg _{TRI}	MJ/kg _{TRI}
0,612	1,109	0,002	0	0	10,625

2.1.6.4 Synthese von langkettigen Polyoxymethyldimethylether (OME₃₋₅) nach Route A

Auch die Synthese von OME₃₋₅ aus Formaldehyd und Methanol (Route A) ist säurekatalysiert. Das Reaktionsschema (siehe Gl. 9) beschreibt die Reaktion von Methanol und Hemiformalen verschiedener Kettenlänge zu OME_n und Wasser [85, S. 94].



Oestreich et al. [85, S. 103] nutzen für die Synthese ein Ionenaustauscharz (engl. ion-exchange resin) wie Doewx50Wx2 als Katalysator. Im Gegensatz dazu verwenden Schmitz et al. [20] Amberlyst 46 als Katalysator. Eine simple Methode um die Reaktion nach Gleichung Gl. 9 zu modellieren, ist die Anwendung einer logarithmischen Funktion wie sie von Oestreich et al. vorgeschlagen wird [85].

$$\ln(K_x) = \alpha + \frac{\beta}{T} \quad \text{Gl. 10}$$

Schmitz et al. [20] schlagen in ihrer Arbeit vor, einen Kettenwachstumsmechanismus zu integrieren. Dieser Aspekt wurde bereits durch den beschriebenen Modellierungsansatz in die Verfahrensauslegung integriert. Das Kettenwachstum der Methylenglykolen und Hemiformalen wurde durch das Modell von Maurer [76] ausreichend beschrieben. Der

entwickelte Prozess zur Synthese von OME₃₋₅ wird durch das folgende Fließbild in Abbildung 21 visualisiert.

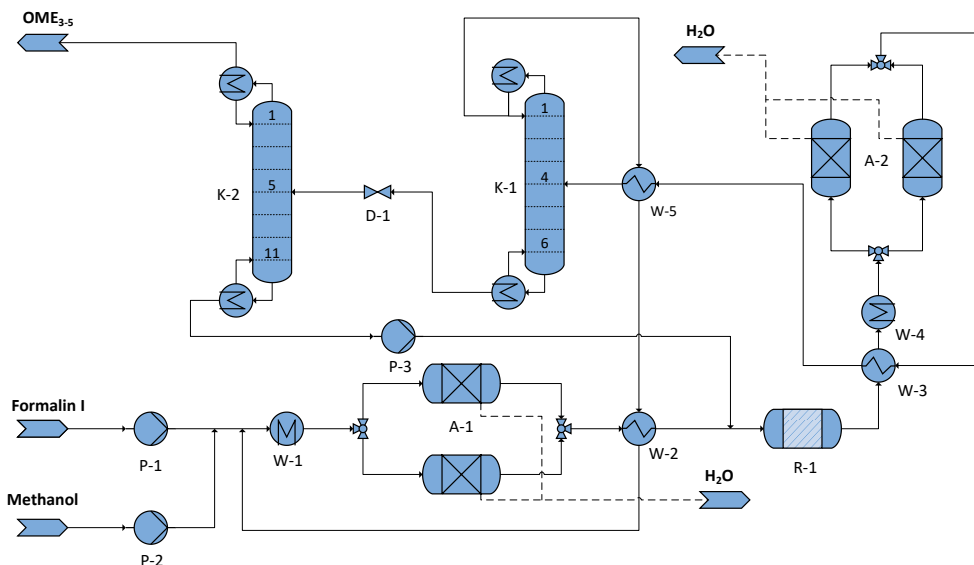


Abbildung 21: Verfahrensfliessbild der OME₃₋₅-Synthese nach Route A

Der Kern der Prozesssimulation ist auch in diesem Fall die Modellierung der Reaktion. Zur Validierung der Simulation wird die vom Modell ausgegebene Produktverteilung mit der von Schmitz et al. [20] veröffentlichten Produktverteilung abgeglichen (siehe Abbildung 22).

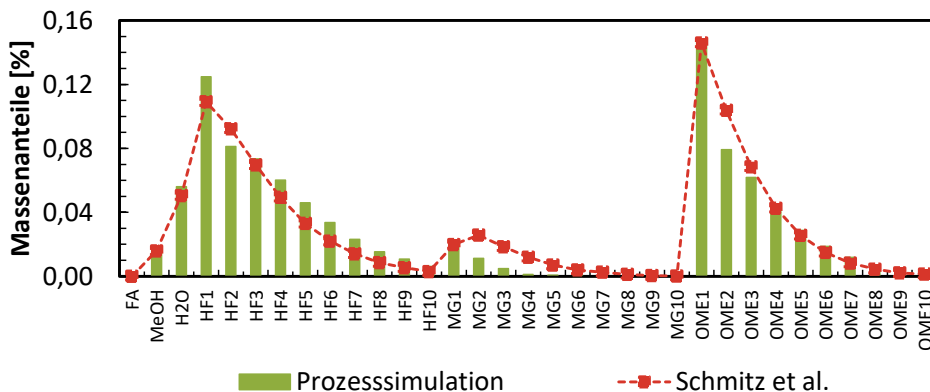


Abbildung 22: Validierung des Reaktorsmodells und des implementierten Modellierungsansatzes der OME₃₋₅ Synthese nach Route A. Die Ergebnisse der Prozesssimulationen werden mit den Daten von Schmitz et al. [20] verglichen.

Die Eingangszusammensetzung in den Reaktor R-1 besteht zu 60 % aus der Formaldehydlösung I (Formalin) und zu 40 % Methanol. Die Betriebstemperatur des Reaktors

beträgt 70 °C und die Reaktionen finden bei 1 bar statt. Aus Abbildung 22 wird ersichtlich, dass die Produktverteilung der Prozesssimulation sehr gut mit der von Schmitz et al. [20] angegebenen Produktverteilung übereinstimmt. Die Prozesssimulation unterschätzt die Anteile an kurzkettigen Methylenglykolen ein wenig, aber die hier aufgezeigten Abweichungen können als vernachlässigbar eingestuft werden.

Der adaptierte Prozessentwurf stammt von Oestreich et al. [85], welche fossilen Dieseldieselkraftstoff als Extraktionsfluid für den Prozess vorschlagen. Der Einsatz von Diesel eignet sich besonders dann, wenn ein Blend aus fossilem Diesel und OME₃₋₅ hergestellt werden soll. Das anvisierte Ziel der Prozessauslegung ist allerdings die Herstellung von OME₃₋₅ als vollständiger, alternativer Kraftstoff ohne Zusätze oder als Blend. Aus diesem Grund kann der vorgeschlagene Prozessentwurf nur ansatzweise adaptiert werden. Der von Schmitz et al. [20] erarbeitete Prozess ist vor diesem Hintergrund eher geeignet. Schmitz et al. [20] integrieren eine selektive Wasserabscheidung mittels Adsorption in ihren Prozess. Als besonders herausfordernd ist in diesem Prozessentwurf die Auslegung der ersten Kolonne einzuschätzen, da hier eine Mischung aus Formaldehyd, Wasser und OME_x aufgetrennt werden muss. Dieses System enthält einen azeotropen Punkt. Der azeotrope Punkt kann umgangen werden, wenn nur kleine Anteile von Wasser in die Kolonne K-1 eingeleitet werden. Aus diesem Grund werden zwei Adsorptionsstufen vor und nach dem Reaktor R-1 in den Prozessentwurf integriert. Durch diese beiden Stufen kann die Beladung mit Wasser sowohl im Reaktor R-1 als auch in der Kolonne K-1 reduziert werden. Der Reaktor wird mit 3 bar betrieben und das Massenverhältnis zwischen Formalin I und Methanol wird auf das Verhältnis 3:2 reguliert. Dieses Massenverhältnis ermöglicht hohe Ausbeuten an OME₃₋₅ [20].

Die beiden Adsorptionsstufen sind mit jeweils zwei Adsorbern ausgestattet, die abwechselnd betrieben und regeneriert werden können. In den Adsorbern werden Molekularsiebe eingesetzt um das Wasser selektiv zu binden. Die sehr gute Leistungsfähigkeit dieser Adsorptionsstufen wird durch die experimentelle Arbeit von Schmitz et al. [20] belegt. Betriebstemperaturen von 25 °C ermöglichen die Bindung eines Großteils des eingeleiteten Wassers. Nur ein kleiner Anteil von 0,01 % (Masse) bleibt zurück. In den Prozesssimulationen wurde ein Wert von 0,04 % nach der zweiten Adsorptionsstufe erreicht. Die Adsorption ist ein exothermer Prozess, was bedeutet, dass für die Einhaltung dieser Betriebstemperaturen die einzelnen Adsorber aktiv gekühlt werden müssen. Die sensible Wärme des Edukt- und Produktstroms kann über die integrierten Wärmeübertrager teilweise zurückgewonnen werden. Im Gegensatz zum Prozess nach Schmitz [20], wird in diesem Prozessentwurf das Produktwasser der Kolonne K-1 durch die zusätzliche Adsorptionsstufe aus dem Prozess entfernt. Dieses Verfahren ermöglicht eine scharfe Trennung der Produkte in Kolonne K-1. Am Sumpf werden die langkettigen Bestandteile abgezogen, während am Kopf der Kolonne K-1 die kurzkettigen Edukte rezykliert werden können. Um eine Trennung der langkettigen OME_n-Bestandteile zu ermöglichen, muss die Kolonne K-2 mit Unterdruck betrieben werden. Der Absolutdruck in der Kolonne wird auf 0,3 bar geregelt. Auch die langkettigen Bestandteile (n>5) werden im Prozess rezykliert, um durch die Erhöhung der Anteile auf die Reaktion einzuwirken und das chemische Gleichgewicht in Richtung der gewünschten Kettenlängen zu verschieben.

Für die Bilanzierung des Prozesses muss die notwendige Wärme für die Adsorption in den Molekularsieben bestimmt werden. Die Adsorption wurde innerhalb der Prozesssimulation durch einen Separator modelliert. Dieser Separator ermöglicht das selektive Abtrennen einer Komponente aus einer Mischung. Die Adsorption wurde also nicht direkt simuliert, aber deren Effekt ist durch eine simple Modellierung in die Prozesssimulation integriert. Die

Prozesssimulation liefert in diesem Fall den Massenstrom an Wasser, welcher durch die Adsorption gebunden wird. Die Regenerierung der Adsorber erfolgt durch das Durchströmen mit vorgewärmter Luft. Der für die Regenerierung vorgesehene Temperaturbereich liegt zwischen 200 °C und 300 °C [20, supporting information] und kann daher mit Hochdruckdampf (250 °C) versorgt werden. Für die Regenerierung müssen also die Adsorber aufgeheizt und dann die für die Desorption notwendige Wärme bereitgestellt werden. Die Wärmebilanz ist dabei auch von der Beladung der Adsorber abhängig. Die nachfolgenden Formeln (Gl. 11 bis Gl. 13) fassen die notwendigen Rechenschritte zur Bestimmung des Energiebedarfs für die Regenerierung zusammen.

$$Q_R = m_w \cdot q_D + m_M \cdot c_{p,M} \cdot \Delta T \quad \text{Gl. 11}$$

$$m_M = \frac{m_w}{b_{eq}} \quad \text{Gl. 12}$$

$$b_{eq} = b_{max} \cdot \frac{K_{eq} \cdot x_{W,eq}}{1 + K_{eq} \cdot x_{W,eq}} \quad \text{Gl. 13}$$

Die Parametrisierung für die Adsorption wurde ebenfalls Schmitz et al. [20] entnommen. Die Wärmekapazität der Adsorptionsstufe beträgt 0,96 kJ/kg_w. Die Wärme der Adsorption bzw. Desorption wird mit 4.1874187 kJ/(kgK) angegeben. Die maximale Beladung wurde anhand der Adsorptionsisothermen auf 0,166 kW/kg_M bei 25 °C bestimmt. Die Reaktionskonstante der Adsorptionsreaktion kann mit 419 in die Berechnung eingehen. Unter den beschriebenen Randbedingungen wird die notwendige Wärme für die Regenerierung der Adsorberstufen auf 5,112 MJ/kg_{OME(A-1)} und 1,083 MJ/kg_{OME(A-2)} berechnet. Diese Werte wurden mit den Ergebnissen der Prozesssimulation verrechnet. Die Gesamtbilanz der OME₃₋₅-Synthese nach Route A ist in Tabelle 16 zusammengetragen.

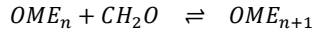
Tabelle 16: Prozessbewertungen des entwickelten OME₃₋₅-Syntheseverfahrens nach Route A

FA	MeOH	Elektrizität	HD-Dampf	MD-Dampf	ND-Dampf
kg _{FA} /kg _{OMEn}	kg _{MeOH} /kg _{OMEn}	MJ/kg _{OMEn}	MJ/kg _{OMEn}	MJ/kg _{OMEn}	MJ/kg _{OMEn}
1,730	0,1	0,039	21,811	0	-0,238

2.1.6.4.1 Synthese von langkettigen Polyoxymethyldimethylether (OME₃₋₅) nach Route B

Die Synthese von OME₃₋₅ aus Trioxan und OME₁ wurde von Burger et al. [17] anhand von Experimenten mit einem Batch-Reaktor untersucht. Der grundlegende Vorteil dieser Prozessroute liegt darin begründet, dass in diesem Syntheseschritt kein Wasser gebildet wird. Aus diesem Grund wird das Verfahren auch der wasserfreie Weg genannt (engl. anhydrous). Das Reaktionsschema der Synthese kann vereinfacht durch die beiden folgenden Gleichungen (Gl. 14 und Gl. 15) dargestellt werden.





Gl. 15

Das hier vorgestellte und vereinfachte Reaktionssystem spiegelt natürlich nicht die tatsächlich ablaufenden Reaktionen wider, aber es liefert einen Ansatz für das Verständnis des Reaktionsmechanismuswieder. Auch diese Synthesereaktion erfolgt in saurer Umgebung. Burger et al. [17] schlussfolgern, dass das Reaktionssystem über simple Gleichgewichtsmodellierungen beschrieben werden kann, daher wurde in dieser Analyse auf denselben Ansatz zurückgegriffen. Wie bereits erwähnt, entsteht während der Reaktion kein Wasser. Zudem ist es wichtig, dass von außen kein Wasser eingebracht wird, da sonst eine Reihe an Nebenprodukten gebildet werden würde. Ein geeigneter Katalysator ist vor diesem Hintergrund ein entscheidender Faktor. Auch für diese Synthese können Amberlyst 46 oder ein Ionenaustauscharz [85] eingesetzt werden. Burger et al. [86] schlagen vor, dass die Reaktortemperatur so hoch wie möglich liegen sollte und identifizieren ungefähr 70 °C als passende Betriebstemperatur. Diese Betriebstemperatur wurde für die Prozessanalysen übernommen. Die Modellierung der Reaktion folgt dabei wieder demselben Gleichgewichtsansatz wie schon für Route A (siehe Gl. 9 und Gl. 10). Die relevante Parametrisierung wurde ebenfalls aus der Veröffentlichung von Burger et al. [17] übernommen. Mit dieser Modellierung konnte im Anschluss das Verfahren zur Herstellung von OME₃₋₅ ausgelegt werden. Das Prozessfließbild ist in Abbildung 23 zu sehen.

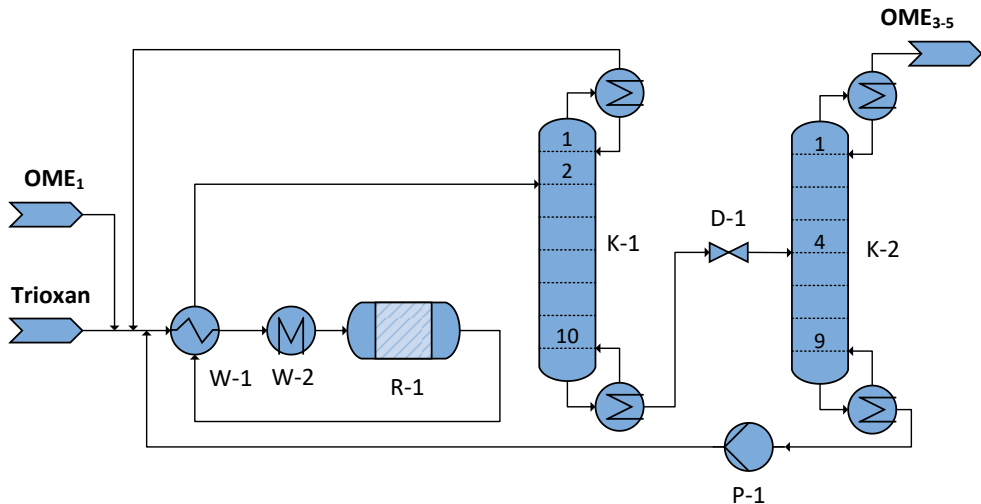


Abbildung 23: Verfahrensließbild der OME₃₋₅-Synthese nach Route B

Dem Prozessentwurf aus Abbildung 23 zufolge werden OME₁ und Trioxan vermisch. Beide Edukte werden direkt aus den jeweiligen Syntheseprozessen entnommen und treten mit 50 °C bzw. 70 °C in den Prozess ein. Das Massenverhältnis von OME₁ zu Trioxan beträgt dabei 2 zu 1. Diese beiden Ströme werden daraufhin mit dem Rezyklierströmen aus den Kolonnen K-1 und K-2 gemischt. Die Eingangsmischung des Reaktors R-1 wird durch einen Wärmeaustausch mit dem Produktstrom und einem zusätzlichen Wärmetauscher temperiert. Kolonne K-1 besitzt die Aufgabe Trioxan, Formaldehyd, OME₁ und OME₂ von den restlichen Bestandteilen innerhalb des Produktstroms zu trennen. Die Konzentrationsprofile innerhalb der Kolonne K-1 sind in Abbildung 24 eingezeichnet.

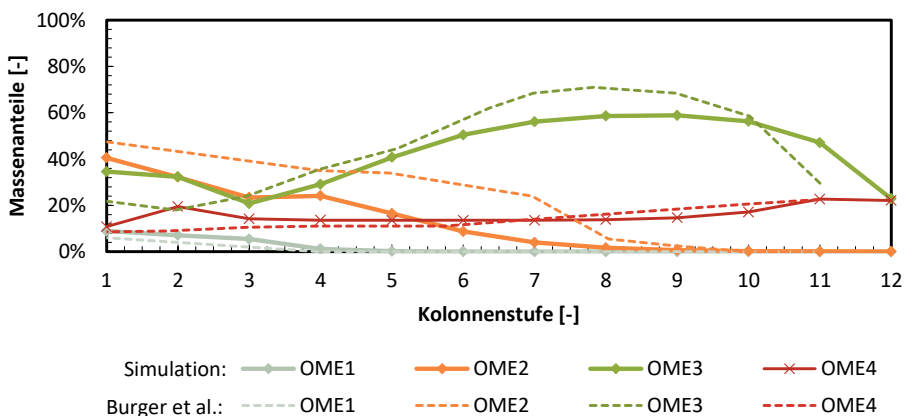


Abbildung 24: Validierung der Produkttrennung im Herstellungsverfahren von OME₃₋₅ nach Route B, Validierungsdaten sind Burger et al. [86] entnommen

Diese Leichtsieder werden über den Kopf der Kolonne K-1 dem Prozess erneut zugeführt. Die Schwertsieder beinhalten alle Fraktionen von OME₃ ($n < 11$) an aufsteigend. Abbildung 24 zeigt auf, dass neben den bestehenden Auslegungsunterschieden (zusätzliche Stufe), eine sehr gute Übereinstimmung der Simulationsergebnisse erzielt wurde. Einzig das Konzentrationsprofil von OME₂ weicht besonders im mittleren Bereich der Kolonne von der angegebenen Referenz ab. Diese Abweichung kann allerdings vernachlässigt werden, denn auf den Ein- und Ausgangsstufen der Kolonne liegen die Werte wieder sehr eng beieinander. Eine ähnlich gute Übereinstimmung kann auch für das Temperaturprofil der Kolonne K-1 bestimmt werden. Der Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Referenzdaten ist in der folgenden Abbildung 25 eingetragen.

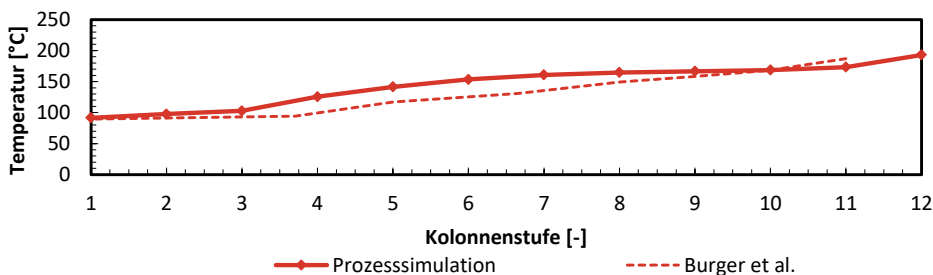


Abbildung 25: Validierung der Produkttrennung im Herstellungsverfahren von OME₃₋₅ nach Route B anhand des Temperaturprofils der Kolonne K-1, Validierungsdaten sind Burger et al. [86] entnommen

Der hohe Grad der Vorhersagegenauigkeit der Modellierung zeigt, dass der entwickelte Simulationsansatz für die Auslegung der verschiedenen Prozessrouten geeignet ist. Der Ausgangsstrom am Sumpf der Kolonne K-1 enthält noch große Anteile an langkettigen OME_n Molekülen ($n > 5$). Diese müssen ebenfalls für einen effizienten Prozessentwurf rezykliert werden. Die weitere Produktaufbereitung erfolgt durch Kolonne K-2. Kolonne K-2 wird wie auch schon Kolonne K-1 (Route) mit Unterdruck betrieben. Für die Versorgung der Kolonne

mit Unterdruck wurde ein Vakuumsystem ausgelegt, welches mit OME₃₋₅ als Arbeitsmittel betrieben wird. Eine Pumpe liefert den notwendigen Vordruck von 5 bar um anschließend einen Druck von 0,25 bar in der Kolonne zu realisieren. Der Energiebedarf des Vakuumsystems wurde in die Energiebilanz der Synthese integriert. Durch diesen Betrieb ist es möglich am Kopf der Kolonne K-2 eine Reinheit von 99 % (Masse) sicherzustellen. Der Sumpfstrom der Kolonne K-2 kann nicht für eine erweiterte Wärmeintegration abgekühlt werden, da sich sonst die langkettigen Bestandteile verfestigen könnten. Eine Zusammenfassung der Bilanzierung der OME₃₋₅-Synthese nach Route B enthält Tabelle 17.

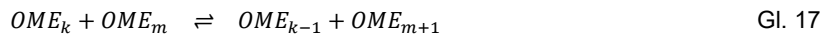
Tabelle 17: Prozessbewertungen des entwickelten OME₃₋₅-Syntheseverfahrens nach Route B

TRI	OME ₁	Elektrizität	HD-Dampf	MD-Dampf	ND-Dampf
kg _{TRI} /kg _{OME_n}	kg _{OME₁} /kg _{OME_n}	MJ/kg _{OME_n}	MJ/kg _{OME_n}	MJ/kg _{OME_n}	MJ/kg _{OME_n}
0,522	0,475	0,038	1,056	0	-0,087

2.1.6.4.2 Synthese von langkettigen Polyoxymethyldimethylether (OME₃₋₅) nach Route C

Die Produktionsrouten A und B geben inhaltliche Referenzen für den Fokus des Ziels des Projektes. Die Optimierungsmöglichkeit der Demonstratoranlage wurde durch eine mögliche Erweiterung zu einer OME₃₋₅-Synthese untersucht. Aus diesem Grund ist auch die Produktionsroute C das Zentrum dieser techno-ökonomischen Analyse.

Für die Verfahrensauslegungen wurden Experimente von Haltenort et al. [87] genutzt. Haltenort et al. [87] haben einen Batch-Reaktor genutzt, um OME₃₋₅ ausgehend von DME und Trioxan zu synthetisieren. Die Synthese kann nach Schmitz et al. [20] in die Bildungsreaktion (Gl. 16) von OME₃ und das Kettenwachstums bzw. den Kettenabbruch beschrieben werden (Gl. 17).



Der Ansatz dieses Systems besteht darin, dass DME und Trioxan genutzt werden um ein initiales Molekül der OME-Reihe zu bilden. Nach dieser Bildung entsteht eine Aufteilung in kurzkettige und langkettige Bestandteile, welche als Gleichgewichtsreaktion beschrieben werden kann. Die Gleichgewichtsreaktion wurde in der Prozessmodellierung durch einen CSTR abgebildet, welcher an die Ergebnisse von Haltenort et al. [87] angenähert wird und so ein Pseudo-Gleichgewicht ausgibt. Als Katalysator wird ein Zeolith (H-BEA) verwendet. Die implementierte Produktverteilung wurde den Versuchsergebnissen nach einer Verweilzeit von 48 h und einer Betriebstemperatur von 80 °C angenähert. Diese spezifische Produktverteilung enthält nur geringe Mengen an langkettigen OME_n-Molekülen (n>5) und ist daher am besten für die anvisierte Kraftstoffproduktion geeignet. Im Allgemeinen sollte die Bildung der langkettigen Bestandteile vermieden werden, da sonst bei Umgebungsbedingungen Ausflockungen und Feststoffausscheidungen auftreten können. Die Simulationsergebnisse

aus der Modellierung des Reaktors (ohne Prozess) und der Synthese sind im Vergleich mit den experimentellen Daten von Haltenort et al. [87] in Abbildung 26 aufgetragen.

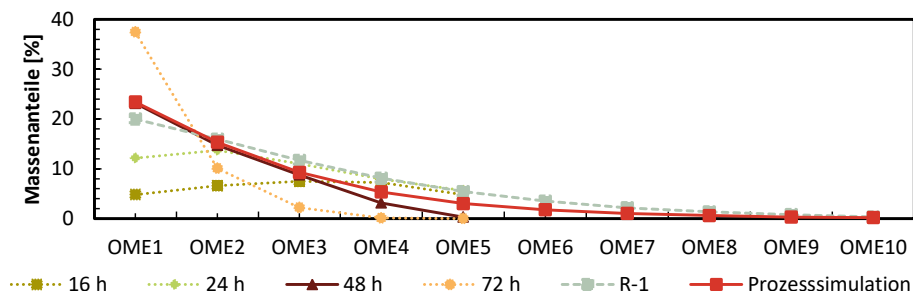


Abbildung 26: Vergleich der Produktverteilungen von Prozesssimulation und Experimenten von Haltenort et al. [87] für die Synthese von OME₃₋₅ nach Route C

Aus Abbildung 26 wird ersichtlich, dass nur wenige Bestandteile an langkettigen OME_n-Molekülen ($n > 5$) gebildet werden. Die Anteile steigen mit abnehmender Kettenlänge, sodass die Produktmischung aufbereitet werden muss. Das Fließbild des entwickelten Prozesses ist in Abbildung 27 zu sehen und ähnelt dem Fließbild der konventionellen Route B.

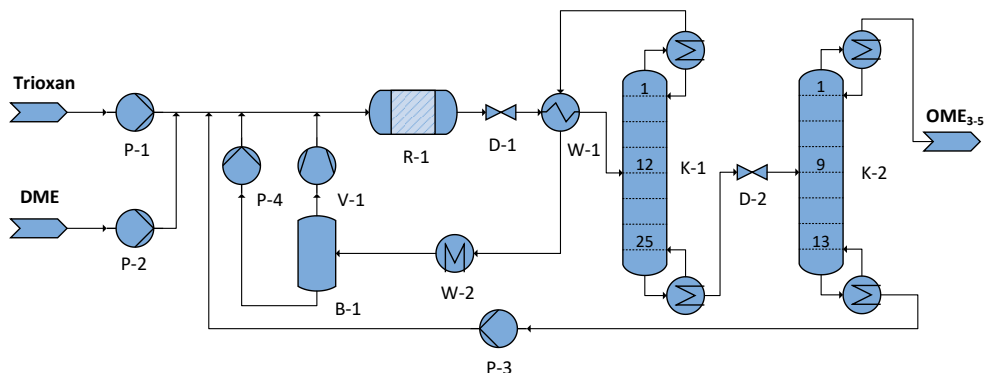


Abbildung 27: Verfahrensfließbild der OME₃₋₅-Synthese nach Route C, veröffentlicht in der Dissertation von Schemme [63]

Zu Beginn des Prozesses werden DME und Trioxan auf 17 bar verdichtet. Die Edukte werden anschließend mit diversen Rezyklierströmen vermischt, um dann in den Reaktor eingeleitet zu werden. Der Produktstrom wird durch eine zweistufige Destillation aufgearbeitet. Kolonne K-1 wird mit 3 bar betrieben und erreicht eine maximale Temperatur von 240 °C. Über den Kopfstrom von Kolonne K-1 werden die Anteile an OME₁ und OME₂ abgezogen. Der Sumpfstrom muss zunächst gedrosselt werden, bevor der Produktstrom in Kolonne K-2 eingeleitet werden kann. Die Kolonne K-2 wird sogar mit Unterdruck betrieben. Der Absolutdruck der Kolonne K-2 liegt bei 0,76 bar. In Analogie zu den restlichen OME₃₋₅-Herstellungsverfahren wird auch in diesem Fall ein Vakuumsystem in die Prozessbewertung integriert. Die Kraftstoffmischung aus OME₃₋₅ verlässt die Kolonne K-2 am Kopf, während über den Sumpf die langkettigen Bestandteile rezykliert werden. Da der hergestellte Produktstrom eine Mischung aus verschiedenen Bestandteilen darstellt, soll an dieser Stelle eine

übergeordnete Analyse der Produktqualität stattfinden. Für diese Analyse werden die Simulationsergebnisse der drei Produktionsrouten A, B und C mit den von Burger et al. [86] angegebenen Mischungsanteilen verglichen. Zusätzlich wird das Ergebnis eines Prüfberichts für eine kommerziell gehandelte Mischung aus OME₃₋₅ von ASG Analytics in die Betrachtung integriert [88]. Die Mischungsanteile der verschiedenen Simulationen und der angegebenen Referenz sind in Abbildung 28 aufgetragen.

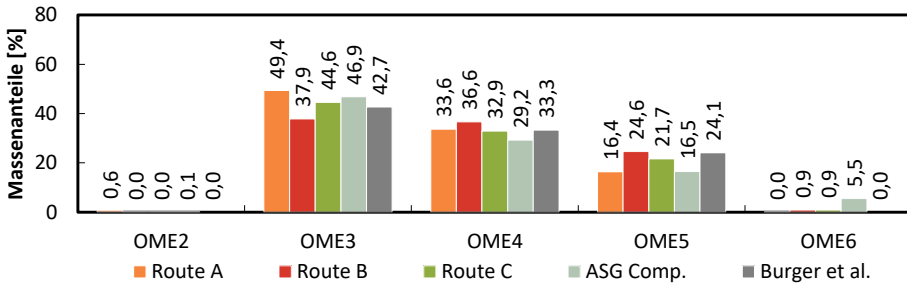


Abbildung 28: Vergleich der Massenanteile innerhalb der OME₃₋₅-Produktmischungen, Daten wurden einem internen Prüfbericht von ASG Analytics GmbH [88] und Burger et al. [86] entnommen

Die Abweichungen zwischen den verschiedenen Mischungen können als gering eingestuft werden. Die gezeigten Unterschiede entstammen auch aus unterschiedlichen Prozessentwürfen. Die in diesem Bericht entwickelten Prozesse sind mit dem Ziel die Ausbeute an OME₃₋₅ zu maximieren ausgelegt. Wie in Abbildung 28 zu erkennen ist, sind in der kommerziell gehandelten OME-Mischung auch signifikante Bestandteile an OME₆ enthalten, was Abweichungen für die restlichen Kettenlängen zur Folge hat. Das Verfahren der OME₃₋₅-Synthese nach Route C lässt sich durch die folgenden Bilanzen ausdrücken.

Tabelle 18: Prozessbewertungen des entwickelten OME₃₋₅-Syntheseverfahrens nach Route C

DME	TRI	Elektrizität	HD-Dampf	MD-Dampf	ND-Dampf
kg _{DME} /kg _{OME_n}	kg _{TRI} /kg _{OME_n}	MJ/kg _{OME_n}	MJ/kg _{OME_n}	MJ/kg _{OME_n}	MJ/kg _{OME_n}
0,295	0,705	0,101	1,239	0	-0,104

2.1.7 Zusammenfassung der technischen Analyse von PtF-Produktionswegen

Dieser kurze Abschnitt soll dazu dienen die Ergebnisse der einzelnen Verfahrensanalysen zusammenzufassen und in einen systemischen Zusammenhang zu setzen. Im ersten Schritt gilt es die einzelnen analysierten Verfahren zu einem Produktionssystem zusammenzuführen, d.h. die gezeigten Massen- und Energiebilanzen müssen im Produktionssystem skaliert werden. Auf diese Weise können die Gesamtenergiebedarfe der einzelnen Prozessschritte und der Betriebsmittel ermittelt werden. Der Energieeintrag ist auf den Energiegehalt des Produkts bezogen. Die Normgröße 1 Liter Dieselequivalent (l_{DE}) referenziert 35,358 MJ, welche in 1 L Diesel gebunden ist [89]. Die Ergebnisse dieser Analyse werden durch Tabelle 19 zusammengefasst.

Tabelle 19: Zusammenfassung der Energiebedarfe und PtF-Wirkungsgrade der untersuchten Produktionssysteme ($\eta_{EI}=0,7$; $e_{CO_2}=3 \text{ MJ/kg}_{CO_2}$)

OME₃₋₅								
Parameter	Einheit	Route A	Route B	Route C	OME ₁	MeOH	DME (2-stuf.)	DME (direkt)
Elektrolyse	MJ/L _{DE}	84,432	85,016	84,268	70,310	57,403	57,63	58,398
CO ₂	MJ/L _{DE}	10,757	10,832	10,736	8,958	7,314	7,343	7,417
Elektrizität	MJ/L _{DE}	3,456	3,484	3,574	2,819	2,391	2,316	4,901
HD-Dampf	MJ/L _{DE}	26,923	3,111	9,355	-6,978	0	0	0
MD-Dampf	MJ/L _{DE}	-5,163	12,977	20,537	-4,044	-3,055	-0,435	1,230
Zusatz	MJ/L _{DE}	0	0	0	0	0	0	2,152
η_{PtF}	-	28,16%	26,92%	25,75%	40,79%	52,69%	52,55%	47,49%

Die in Tabelle 19 eingetragenen Ergebnisse zeigen deutlich, dass die Speicherung von erneuerbarer Energie in OME-Kraftstoffmischungen nur geringe Wirkungsgrade von unter 30 % erreicht. Damit sind diese Herstellungsverfahren gegenüber den untersuchten Alternativen als ineffizient zu bezeichnen. Die Herstellungsverfahren für Methanol und DME sind im Gegensatz zu OME₃₋₅ deutlich effizienter und können mehr als die Hälfte der eingesetzten Energie in die Kraftstoffe überführen. Die Untersuchungen für die DME-Synthese zeigen ebenfalls deutlich, dass der konventionelle zweistufige Prozess, auch für die Synthese auf Basis von H₂ und CO₂ zu bevorzugen ist. All diese Ergebnisse sind im hohen Maße von der gewählten Eingangsparametrisierung abhängig. Eine Sensitivitätsanalyse für die beiden größten Einflussfaktoren zeigt Abbildung 29.

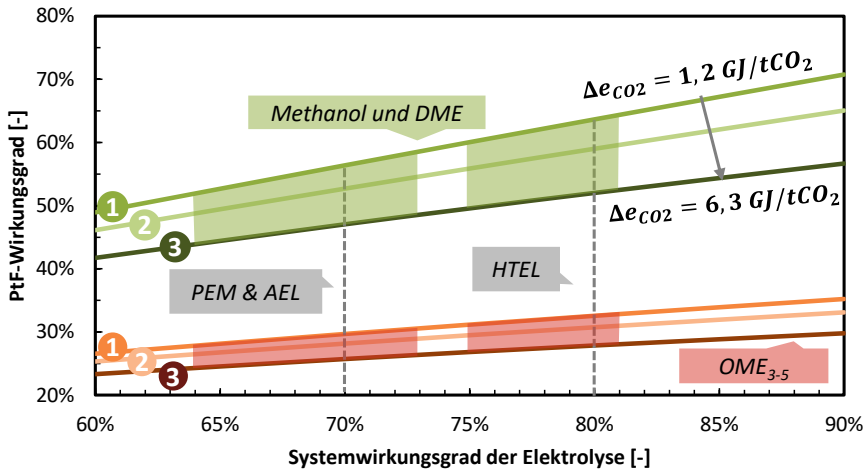


Abbildung 29: Sensitivitätsanalyse der Wirkungsgrade von PtF-Produktionssystemen in Abhängigkeit der Parametrisierung der Elektrolyse und der CO₂-Abtrennung

Abbildung 29 zeigt deutlich die durch die verschiedenen Verfahren aufgespannten Lösungsbereiche in Form der PtF-Wirkungsgrade. Methanol und DME besitzen den großen Vorteil, dass durch die effizientere Produktion Verbesserungen der äußeren Randbedingungen zu stärkeren Zuwächsen der PtF-Wirkungsgrade führen als für OME₃₋₅. Solche äußeren Verbesserungen können erzielt werden, wenn z. B. anstatt der üblichen PEM- oder alkalischen Elektrolyse ein Hochtemperaturverfahren eingesetzt wird. Symbolisch für diese Verfahren wurde eine Linie für HTEL in Abbildung 29 eingetragen. Dieser erhöhte Wirkungsgrad der HTEL setzt allerdings eine zusätzliche Wärmequelle bzw. Wärmeintegration voraus. Eine Anpassung des spezifischen Energiebedarfs der CO₂-Abtrennung zeigt deutlich, dass die Nutzung von CO₂-aus der Umgebungsluft (3 – nach Patent von Climeworks [90]) gegenüber von industriellen Punktquellen zu deutlich niedrigeren PtF-Wirkungsgraden führt.

2.2 Ökonomische Analyse von Power-to-Fuel Herstellungspfaden

Der Aufbau der ökonomischen Analyse ist an den Aufbau der technischen Analyse angelehnt, d.h. es werden zunächst die Grundlagen und Randbedingungen dargestellt bevor die verschiedenen Alternativen analysiert und miteinander verglichen werden können. Die Definition der Systemgrenzen und der Randbedingungen für die PtF-Systeme findet in Abschnitt 2.2.1 statt. Eine wichtige Randbedingung ist die Annahme der Bereitstellungskosten von H_2 , welche detailliert in Abschnitt 2.2.2 behandelt wird. Neben der Bereitstellung von H_2 ist auch die Analyse der Bereitstellungskosten von CO_2 ein wichtiger Bestandteil der techno-ökonomischen Analyse (siehe Abschnitt 2.2.3). Die Skalierung der PtF-Systeme hat einen entscheidenden Einfluss auf die Investitionskosten und damit auf die ökonomische Bewertung. Aus diesem Grund findet eine Normierung der Produktionskapazität vor dem Hintergrund der Economy of Scale in Abschnitt 2.2.4 statt. Die Spannweiten der Produktgestehungskosten der verschiedenen Kraftstoffalternativen werden durch Sensitivitätsstudien in Abschnitt 2.2.5 bestimmt. Eine Einordnung und ein Vergleich der Kosten erfolgt in Abschnitt 2.2.6.

2.2.1 Systementwurf einer integrierten Produktionsanlage

Der methodische Ansatz zur ökonomischen Bewertung der PtF-Kraftstoffalternativen wurde bereits in Kapitel 1.4.1 beschrieben. An dieser Stelle werden die für die folgende Analyse gesetzten Systemgrenzen detailliert beschrieben und die abgeleiteten Randbedingungen eingeführt. Abbildung 6 veranschaulicht die Systemgrenzen der techno-ökonomischen Analyse, welche die Komponentenkostenmethode nach R. Turton [24] nicht auf die Elektrolyse und CO_2 -Abtrennung anwendet, sondern diese als „Black-Boxen“ bzw. als Randbedingungen ansieht. Eine Validierung dieser gewählten Randbedingungen mit zugehörigen Sensitivitätsstudien folgt in den Abschnitten 2.2.2 und 2.2.3. In Anlehnung an Tabelle 3 werden nun in Tabelle 20 alle relevanten Parameter der ökonomischen Bewertung vorgestellt und eingeordnet.

Tabelle 20: Randbedingungen der ökonomischen Analyse von PtF-Produktionssystemen

Parameter	Einheit	Basis	-50 %	+ 50 %	Klassifizierung
H ₂	€/kg _{H2}	4,6	2,3	6,9	Bezieht sich auf eine Vorhersage über eine zukünftig weitläufige H ₂ -Infrastruktur in Deutschland nach Robinus et al. [91]. Kosten für Tankstellen wurden herausgenommen.
CO ₂	€/kg _{CO2}	0,07	0,035	0,105	Typische Kosten für SoA-CO ₂ -Abscheideanlagen in industriellen Prozessen nach Brynolf et al. [92].
HD-Dampf	€/MJ _{th}	0,0187	-	-	Schemme et al. [93] nutzen diese Parameter und verweisen auf ein Expertengespräch mit Prof. Rieckmann von der TH Köln.
MD-Dampf	€/MJ _{th}	0,0158	-	-	
ND-Dampf	€/MJ _{th}	0,0146	-	-	
Kühlwasser	€/t	0,1	-	-	Durchschnittliche Elektrizitätskosten für große, industrielle Verbraucher in Deutschland für das Jahr 2015 nach BDEW-Strompreisanalyse [94, S.28].
Elektrizität	€/kWh	0,0976	0,488	0,146	
Kapazität	MW _{th}	300	-	-	
Betriebsdauer	A	20	-	-	Typische Werte für den Betrieb von chemischen Anlagen.
Zinssatz	%	8	4	12	
Währungs-umrechnung	US-\$/€	1,21			Zwischen den Jahren 1999 bis 2018 jährlich gemittelter Wert für die Währungsumrechnung nach der europäischen Zentralbank (EZB) [95].
Volllast-stundenzahl	h/a	8000	-	-	Standardannahme für chemische Anlagen nach Towler und Sinnott [96, S.106,147,148,728].

Für die einflussreichsten Parameter sind in Tabelle 20 zusätzlich zu den genutzten Basiswerten auch die Variationen für die Sensitivitätsstudien eingetragen. Um einen symmetrischen Lösungsbereich zu bilden, werden die Parameter jeweils um $\pm 50\%$ variiert. Auf diese Weise zeigen die Sensitivitätsstudien auf direkte Art und Weise die Elastizität der Ergebnisse in Abhängigkeit der verschiedenen Parameter.

2.2.2 Bereitstellungskosten von erneuerbarem H_2

Die Basis für die Synthese von alternativen Kraftstoffen wird durch die erneuerbare und nachhaltige Bereitstellung von H_2 geschaffen. Die Bereitstellung von Wasserstoff durch die Elektrolyse ist ein effizientes Verfahren (Wirkungsgrade $> 70\%$), was aber aufgrund der hohen energetischen Speicherdichte von Wasserstoff und den zu synthetisierenden Kraftstoffen sehr viel elektrische Energie benötigt. Diese elektrische Energie muss für den Anspruch der Nachhaltigkeit aus erneuerbaren Quellen gewonnen werden. Hierfür bieten sich Windkraftanlagen (WKA) oder Photovoltaikanlagen (PV) an. Die Gestehungskosten von erneuerbarem Strom können mit der folgenden Gleichung (Gl. 18) berechnet werden.

$$\left[\frac{\text{€}}{\text{kWh}} \right] = \frac{\text{CAPEX} \cdot \bar{a} + \text{OPEX}}{\text{FLH}} \quad \text{Gl. 18}$$

Die spezifischen Investitionskosten (CAPEX) wurden durch den Annuitätenfaktor zur jährlichen Belastung umgerechnet. Die Betriebskosten (OPEX) sind im Vergleich zu den CAPEX deutlich geringer, da zum Betrieb der EE-Anlagen nur ein geringer Aufwand betrieben werden muss. Die Daten zur notwendigen Parametrisierung wurden der Arbeit von Wiser et al. [97] entnommen, die eine Meta-Studie zu den Kostentreibern für Windenergie erstellt haben. Diese Meta-Studie berücksichtigt verschiedene Interessensgruppen (engl. Stakeholder) und untersucht diverse Entwicklungen im Bereich der Windenergie. Die Referenzparametrisierung dieser techno-ökonomischen Analyse ist von der Meta-Studie nach Wiser et al. [97] adaptiert. Die Volllaststundenzahl/Volllaststundenzahl wurde je nach Szenario an exzellente über mittlere bis schlechte Windstandorte in Deutschland angepasst [98]. Alle Parameter und Szenarien werden in Tabelle 21 gelistet.

Tabelle 21: Parametersätze für die Analyse von Gestehungskosten von Elektrizität aus EE-Anlagen

Parameter	Einheit	Unterer Wert	Mittlerer Wert	Hoher Wert
Zinssatz	-	0,04	0,08	0,12
Volllaststundenzahl	h/a	100 – 7000 (variabel)		
Betriebszeit	A	10	20	30
CAPEX	€/kW	510	1019	1529
OPEX	€/kW	16,5	33,0	49,5

Die Analyse der Stromgestehungskosten in Abhängigkeit von den lokalen Standortfaktoren – hier repräsentiert durch die Volllaststundenzahl – zeigt einen charakteristischen asymptotischen Verlauf. Mit steigender Volllaststundenzahl sinken die spezifischen

Gestehungskosten zunächst sehr schnell ab. Dieser Trend verlangsamt sich deutlich ab ca. 2000 h/a. Durch die unterschiedliche Parametrisierung wird ein Lösungsbereich aufgespannt, welcher durch die Zuordnung der Volllaststundenzahlen spezifische Intervalle angibt. Dem Standort Emden (2154 h/a [98]) wird in dieser Analyse das Intervall von ca. 9 bis 6 ct.-€/kWh zugeordnet. Mit deutlich besseren Standortfaktoren wie sie z. B. auf Büsum (4303 h/a [98]) herrschen können Gestehungskosten von ca. 3,5 bis 4,5 ct.-€/kWh erreicht werden. Anhand dieser Untersuchung wird bereits deutlich, dass die lokalen Standortbedingungen einen entscheidenden Einfluss auf Wirtschaftlichkeit von PtF-Produktionsanlagen besitzen und diese Anlagen nur dort betrieben werden können, wo hohe Kapazitäten mit niedrigen Gestehungskosten miteinander verbunden werden können. Für die Analyse der Gestehungskosten von erneuerbarem H₂ in Deutschland wurden daher Gestehungskosten für Elektrizität aus erneuerbaren Quellen von 6 ct.-€/kWh angenommen. Dieser Wert wurde ausschließlich für die Bewertung der H₂-Bereitstellungskosten durch die direkte Kopplung von EE-Anlagen und Elektrolyseuren verwendet und steht im Gegensatz zu dem Strompreis für den Betrieb der Syntheseanlagen, welcher auf den industriellen Bezug in Deutschland ausgerichtet ist (9,76 ct.-€/kWh [94]). Die beschriebene Analyse ist zusammen mit einer Sensitivitätsstudie zu den Einflüssen auf die ökonomische Bewertung von Elektrizität aus erneuerbaren Quellen in Abbildung 30 eingetragen.

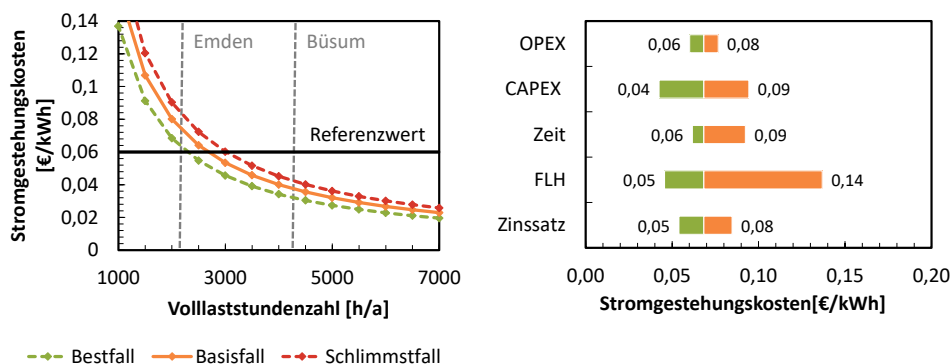


Abbildung 30: Kostenabschätzung für die Gestehung von Elektrizität aus erneuerbaren Quellen in Deutschland

Die Sensitivitätsanalyse (rechte Seite Abbildung 30) zeigt deutlich, dass die Volllaststundenzahl mit Abstand der einflussreichste Parameter in dieser Analyse ist. Die Variation der CAPEX-Kosten betont die Notwendigkeit von weiteren Kostenreduktionen für die Bereitstellung von besonders günstiger Elektrizität aus EE-Anlagen.

Zusätzlich zu den Kosten für erneuerbare Elektrizität sind die Investitionskosten für den Aufbau der Elektrolyseure ein entscheidender Faktor für die Bestimmung der Bereitstellungskosten von H₂. Weitere Einflussgrößen bzw. Randbedingungen für die Gestehungskosten von H₂ sind u. A. der untere Heizwert von H₂, der Systemwirkungsgrad der Elektrolyse und Wartungskosten. Die Kostenabschätzung für die Produktgestehungskosten von H₂ basiert auf der folgenden Formel (Gl. 19).

$$\left[\frac{\text{€}}{\text{kg}_{\text{H}_2}} \right] = \frac{LHV}{\eta_{\text{total}}} \left(\left(\frac{(1+i)^n \cdot i}{(1+i)^n - 1} + M/O \right) \cdot \frac{CAPEX}{FLH} + P_E \right) \quad \text{Gl. 19}$$

Die entsprechende Parametrisierung für die Anwendung von Gl. 19 für die anschließende Sensitivitätsstudie ist Tabelle 22 zu entnehmen.

Tabelle 22: Parametrisierung für die Analyse von Produktgestehungskosten von erneuerbarem H₂

Parameter	Einheit	Niedriger Wert	Mittlerer Wert	Hoher Wert
Elektrizität	€/kWh	0,03	0,06	0,09
η_{El}	-	0,6	0,7	0,8
Zinssatz	-	0,04	0,08	0,12
CAPEX (LHV)	€/kW	250	500	750
Volllaststundenzahl	h/a	1250	2500	3750
M/O	%CAPEX	0,02	0,04	0,06

Wie bereits zuvor erwähnt, wurde die von der Elektrolyse benötigte Elektrizität (P_E) von den zuvor bestimmten Gestehungskosten der mittleren bis sehr guten Standorte in Deutschland abgeleitet. Die Ergebnisse der Sensitivitätsstudie zu den Produktgestehungskosten von H₂ sind in Abbildung 31 dargestellt.

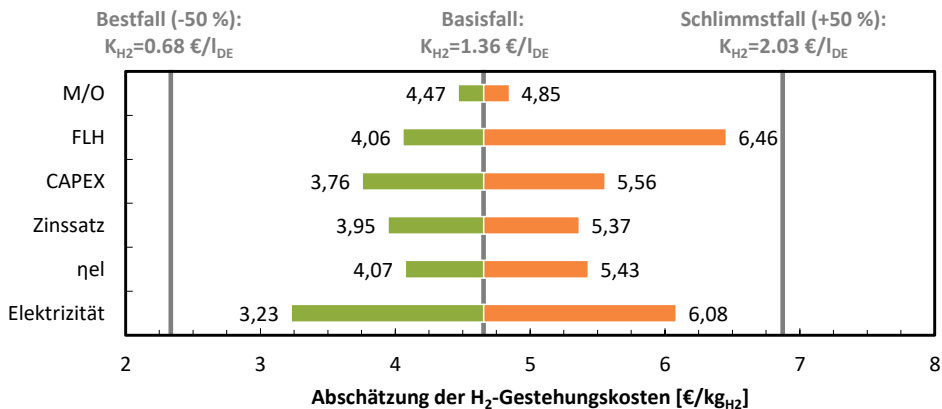


Abbildung 31: Sensitivitätsstudie der Produktgestehungskosten von H₂ auf Basis von erneuerbaren Energien

Aus Abbildung 31 geht hervor, dass die Kosten für Elektrizität, die angesetzten Volllaststunden und die Investitionskosten die größten Einflüsse auf die Produktgestehungskosten von H₂ darstellen. Die Variation der Kosten für Elektrizität führt durch den besonders günstigen Bezug

bei hervorragenden Standortbedingungen mit 3,23 €/kg_{H₂} zu dem niedrigsten Preis in dieser Studie. Wenn der Elektrolyseur nur mäßig bis schlecht ausgelastet wird, steigen die Kosten – ähnlich wie bei der Erzeugung von Elektrizität auf Basis von erneuerbaren Energien (siehe linke Seite Abbildung 30) – exponentiell an. Die schlechte Auslastung führt demzufolge mit 6,46 €/kg_{H₂} zu den höchsten Produktgestehungskosten dieser Studie. Der große Schwankungsbereich der Elektrizitätskosten wird also über die Bereitstellung von H₂ nahezu ungedämpft an die Kraftstoffproduktion weitergeleitet. Die angenommenen Investitionskosten spiegeln den Stand der Technik von alkalischen und PEM-Elektrolyseuren wider [59, 60, 99]. Die obere Grenze der CAPEX-Kosten ist mit den gegenwärtigen Kosten für SOEC-Systeme nach Zheng et al. [100] vereinbar. Saba et al. [101] haben in ihrer Studie die Investitionskosten der letzten 30 Jahre für PEM und alkalische Elektrolyseure analysiert und geben für die alkalische Elektrolyse 787-906 €/kW² und für die PEM-Elektrolyse 306-955 €/kW² an. Mit dieser kurzen Einordnung wird deutlich, dass die in dieser techno-ökonomischen Bewertung angenommenen Werte für die CAPEX-Kosten an die niedrigen Vorhersagen aktueller Elektrolyseure angegliedert sind und darauf aufbauend zukünftige Kostenreduktionen integrieren. Zusätzlich zu den in Abbildung 31 aufgezeigten Einflussfaktoren werden untere und obere Grenzen der Sensitivitäten mit Abschlägen ausgestattet und angegeben. Diese Grenzen bilden den Bezug zur Kraftstoffsynthese und normieren die Gestehungskosten auf den Energieinhalt von 1 L Diesel. Diese Kosten sind also dann als untere Grenzen der PtF-Kosten in den beiden Szenarien anzusehen.

2.2.3 Bereitstellungskosten von CO₂ aus industriellen Abgasen

Die Kosten für die Bereitstellung von CO₂ wurden in Analogie zu den ökonomischen Analysen der H₂-Bereitstellung untersucht. Wie auch die H₂-Bereitstellung wurde auch die Bereitstellung von CO₂ als „Black-Box“ in der ökonomischen Bewertung von PtF-Produktionswegen angesehen und über die Definition von Randbedingungen integriert. Die folgende Analyse hatte das Ziel, die in der techno-ökonomischen Bewertung genutzten Parameter zu validieren und zu bekräftigen. Eine Abschätzung der Bereitstellungskosten von CO₂ kann durch die folgende Gleichung (Gl. 20) erstellt werden.

$$\left[\frac{\text{€}}{\text{kg}_{\text{CO}_2}} \right] = \text{CAPEX} \cdot (\bar{a} + M/O) + c_{\text{MEA}} \cdot k_{\text{MEA}} + \frac{\text{SRD}_p}{\eta_{\text{PtH}}} \cdot k_{\text{el}} \quad \text{Gl. 20}$$

Die Bereitstellungskosten werden nach Gl. 20 aus den Investitionskosten, dem spezifischen Verbrauch an Waschmittel und den spezifischen Energiebedarf der Abscheideanlage bemessen. Die Investitionskosten wurden ebenfalls mit der Annuitätenmethode auf die jährlichen Zahlungen zurückgeführt. Die Wartungskosten wurden hier ebenfalls in Abhängigkeit der Investitionskosten bestimmt. Der mittlere Wert der CAPEX-Kosten (200 €/t_{CO₂}) wurde der Veröffentlichung von Ho et al. [102] entnommen, welche CO₂-Abtrennung mittels MEA in Australien untersucht haben. Der Aufwand für Wartungsarbeiten besaß die gleiche Parameterisierung wie der Wartungsaufwand für die Elektrolyse. Die Kosten für das Waschmittel setzten sich aus den spezifischen Kosten für den Erwerb des

² Diese beiden Werte sind im Gegensatz zu den genannten Referenzwerten nicht auf den unteren Heizwert (LHV) sondern auf den oberen Heizwert (engl. Higher Heating Value, HHV) bezogen.

Waschmittels (abgeschätzt: 10 €/kg_{MEA}) und dem spezifischen Verbrauch der Anlage zusammen (300 g_{MEA}/t_{CO2}³). Die Energie für die Desorption wurde in der Pilotanlage am Standort Niederaussem durch einen elektrischen Dampferzeuger bereitgestellt. Dieser Dampferzeuger wurde durch den Power-to-Heat Wirkungsgrad wiedergespiegelt. Der Betrieb des Dampferzeugers erforderte Elektrizität, welche ebenfalls bilanziert werden musste. Um einen einheitlichen Vergleich zu gewährleisten wurden hier – wie auch für die Elektrolyse – 0,06 €/kWh für Strom aus EE-Anlagen angenommen. Alle Parameter für die nachfolgende Sensitivitätsstudie sind in Tabelle 23 aufgeführt.

Tabelle 23: Parameterisierung für die Analyse von Produktgestehungskosten aus industriellen Rauchgasen abgetrennten CO₂

Parameter	Einheit	Niedriger Wert	Mittlerer Wert	Hoher Wert
CAPEX	€/t _{CO2}	100	200	300
Zinssatz	-	0,04	0,08	0,12
M/O	% _{CAPEX}	0,02	0,04	0,06
MEA-Verbrauch	g _{MEA} /t _{CO2}	150	300	450
Spezifischer Energiebedarf	kJ/kg _{CO2}	1,75	3,5	5,25

Die in dieser Weise ausgeführte Studie veranschaulicht zum einen die Bedeutungen der Einflussgrößen als auch das allgemeine Kostenniveau für die Abscheidung von CO₂ aus industriellen Rauchgasen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 32 visualisiert.

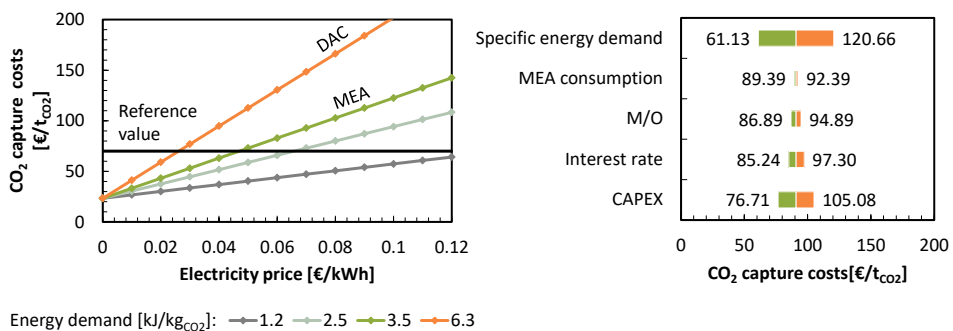


Abbildung 32: Sensitivitätsstudie zu den Kosten der CO₂-Abscheidung

Auf der linken Seite von Abbildung 32 sind die Kostenabschätzung bei unterschiedlichen Energieverbräuchen der CO₂-Abscheidung eingetragen. Symbolisch ist hier auch die Abscheidung aus der Umgebungsluft (engl. direct air capturing, DAC) eingetragen, welche aber abgesehen vom spezifischen Energiebedarf mit denselben Parametern wie die Abscheidung aus MEA ebenfalls gerechnet wurde. Der Referenzwert von 70 €/t_{CO2} besitzt

³ Angabe wurde während eines Projektmeetings mit dem Betreiber der Pilotanlage (RWE) abgesprochen.

mehrere Schnittpunkte mit den einzelnen Kennlinien. Diese Schnittpunkte machen deutlich, wie eine Kostensenkung durch bessere Verfahren mit geringeren Energieverbräuchen erreicht werden kann und wie im Umkehrschluss höhere Kosten für Elektrizität zugelassen werden können. Eine Elektrizitätsversorgung mit bis zu 0,07 €/kWh ermöglicht den kosteneffizienten Betrieb eines konventionellen MEA-Verfahrens (ca. 120 €/t_{CO2}).

Auf der rechten Seite von Abbildung 32 ist die zugehörige Sensitivitätsstudie abgebildet. Der spezifische Energiebedarf und die Investitionskosten dominieren die Analyse. Der Einfluss des MEA-Verbrauchs ist aufgrund der sehr geringen Spannweite unterrepräsentiert. Die niedrigsten Kosten für die CO₂-Abscheidung liegen hier bei ca. 61 €/t_{CO2}. Das Maximum der Untersuchung wird durch ca. 120 €/t_{CO2} abgebildet. Dieses Ergebnis lässt sich durch die Meta-Studie von Leeson et al. [103] bestätigen. Damit ist der Referenzwert für die techno-ökonomische Analyse abgesichert und kann verwendet werden.

2.2.4 Skalierung und Investitionskosten der PtF-Produktionssysteme

Die Skalierung der PtF-Produktionssysteme war von entscheidender Bedeutung für die ökonomische Bewertung der Kraftstoffalternativen, da die spezifischen Investitionskosten der Anlagen mit zunehmender Produktionskapazität sinken. Dieser Effekt der „Economy of Scale“ tritt dann auf, wenn einzelne Komponenten größer bzw. mit mehr Leistung oder Durchsatz ausgeführt werden können, wobei die Material- und Arbeitskosten nicht im gleichen Maße steigen. Die Kostenreduktion durch Maßstabsvergrößerung der Prozesse verringert ihre Wirkung, wenn die Kapazitätsgrenzen von Komponenten erreicht werden und die erforderlichen Leistungen nur noch durch Parallelisierung erreicht werden können. In Tabelle 20 werden 300 MW_{th}⁴ als Auslegungsgröße der Produktionssysteme definiert. Brynolf et al. [92] zeigen, dass die spezifischen Investitionskosten einer CO₂-basierte Methanolsyntheseanlage bei steigender Kapazität von 5 bis 100 MW_{th} deutlich sinken. Auch darüber hinaus sind noch weitere Kostenreduktionen möglich. Die Untersuchung endet bei 200 MW_{th}. Für den Betrieb der OME₃₋₅-Synthesen im Maßstab von 300 MW_{th} werden allerdings deutlich größere Leistungen der Methanolsynthese abverlangt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Methanolsynthese auf unterschiedliche Größen (50, 200, 300 und 441 MW_{th}) ausgelegt und bewertet. Diese Studie zeigt nochmals die Kostenreduktionen durch die Maßstabsvergrößerung und insbesondere die natürliche Grenze dieser Potenziale. Die Ergebnisse dieser Analyse sind zum Vergleich mit denen von Brynolf et al. [92] bestimmten Werten in Abbildung 33 eingetragen.

⁴ Die Syntheseleistung der Verfahren referenziert den Produktstrom der Synthese mit dem zugehörigen unteren Heizwert (LHV).

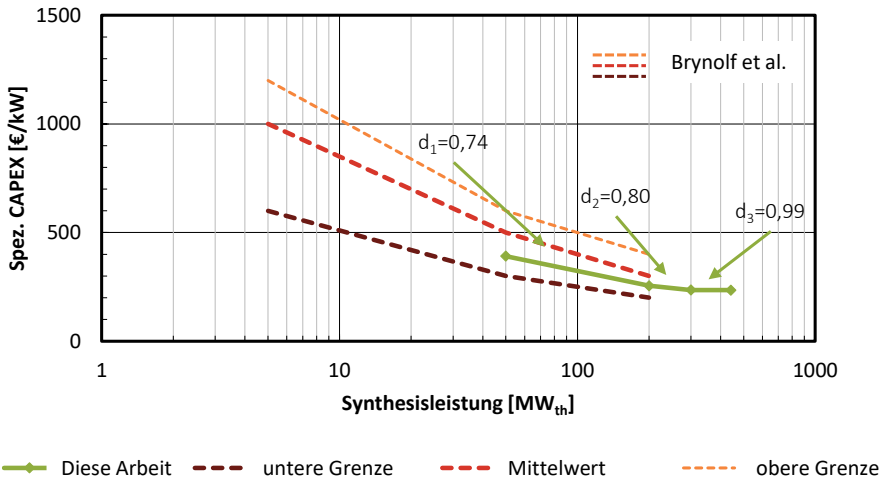


Abbildung 33: Vergleich zwischen spezifischen Investitionskosten in einer Methanolsyntheseanlage mit variabler Produktionskapazität, die Referenzwerte sind der Arbeit von Brynolf et al. [92] entnommen

Die bestimmten Werte für die spezifischen Investitionskosten der CO₂-basierten Methanolsynthese fügen sich in den mittleren bis unteren Bereich der von Brynolf et al. [92] angegebenen Referenzdaten für die CAPEX-Kosten ein. Ausgehend von dieser Betrachtung ist klar, dass die CAPEX-Kosten innerhalb der ökonomischen Analysen variiert werden müssen, da sowohl niedrigere als auch höhere Werte in der Literatur gefunden wurden. Auffallend ist weiterhin der Degressionskoeffizient von 0,99 für eine Skalierung von 300 MW_{th} auf 441 MW_{th}. Dieser Wert nahe 1 zeigt deutlich, dass die Kostenreduktionspotenziale durch Maßstabsvergrößerung nahezu vollständig erschlossen sind. Die allgemeine Methodik der Skalierung der Syntheseeinheiten wird durch Abbildung 34 verdeutlicht.

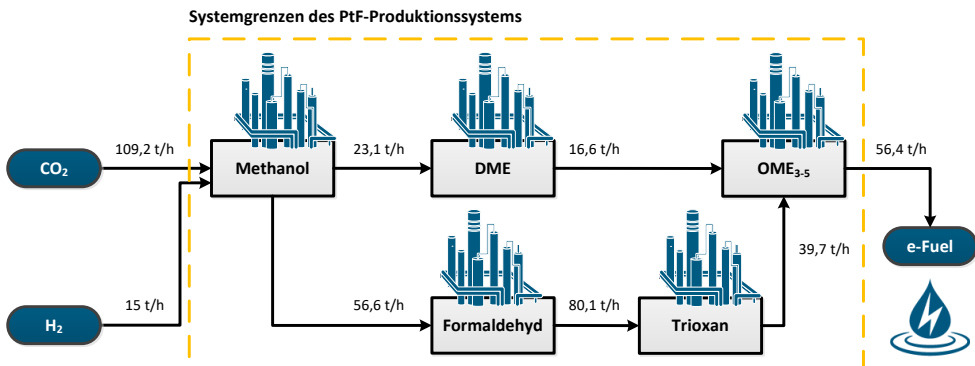


Abbildung 34: Skalierung der Syntheseeinheiten innerhalb des PtF-Produktionssystems anhand des Beispiels der OME₃₋₅-Synthese nach Route C

Der Massenstrom des finalen Produkts und der zugehörige untere Heizwert geben die allgemeine Syntheseleistung des PtF-Produktionssystems an. Für die gezeigte OME₃₋₅-Produktion nach Route C bedeutet dies, dass hier ein Massenstrom an OME₃₋₅ von 56,4 t/h benötigt wird um 300 MW_{th} Syntheseleistung bereitzustellen. Um diese Menge an OME₃₋₅ synthetisieren zu können, müssen dem finalen Syntheseschritt 16,6 t/h DME und 39,7 t/h Trioxan zugeführt werden. Für die DME Produktion werden 23,1 t/h Methanol benötigt. Für Trioxan werden 80,1 t/h an Formalin und dementsprechend 56,6 t/h Methanol eingesetzt. All diese Routen führen zu einem CO₂-Bedarf von 109,2 t/h und einem H₂-Bedarf von 15 t/h. Wichtig anzumerken bleibt, dass Abbildung 34 nicht alle Massenströme im System zeigt, sondern nur die für die Skalierung relevanten Stoffströme. Produktströme an Wasser oder Eduktströme an Luft werden nicht in Abbildung 34 gezeigt.

2.2.5 Produktgestehungskosten der PtF-Kraftstoffe

Die beschriebene Skalierungsmethodik wurde auf alle untersuchten PtF-Produktionssysteme angewendet. Diese skalierten Produktionssysteme ermöglichen den direkten Vergleich der verschiedenen Routen. Das entscheidende Kriterium für diesen Vergleich sind die Produktgestehungskosten. Um diese Produktgestehungskosten bestimmen zu können, müssen die Investitionskosten der verschiedenen PtF-Systeme bekannt sein. Die totalen Investitionskosten der PtF-Produktionssysteme sind in Abbildung 35 dargestellt.

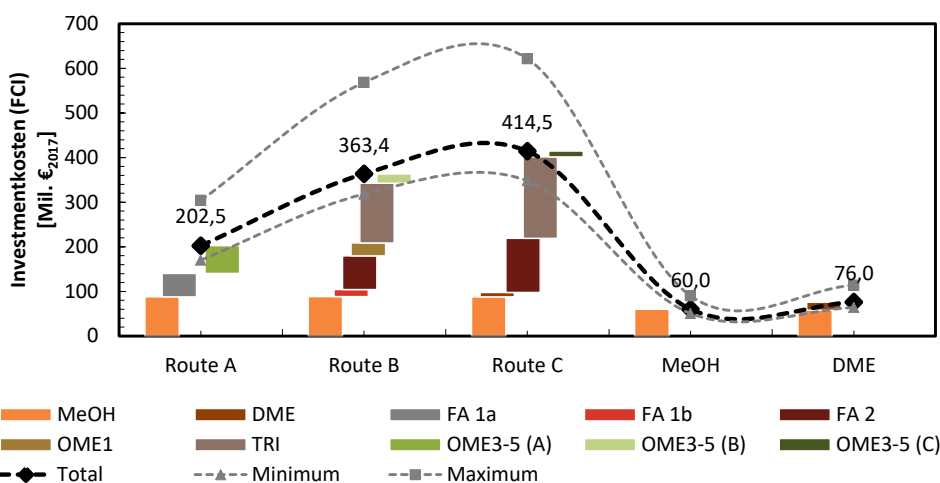


Abbildung 35: Investmentkosten (FCI) für die Produktion von alternativen Kraftstoffen im Maßstab von 300 MW_{th} Syntheseleistung, Minimum und Maximum ist nach Klasse 4 der Klassifizierung der AACE übertragen

Die Investitionskosten in Abbildung 35 sind nach den eingesetzten Verfahren strukturiert. Auf diese Weise kann der Einfluss der einzelnen Verfahren auf das Gesamtsystem deutlich gemacht werden und ein ausgeglichener Vergleich wird möglich. Die Kosten für die Methanolsynthese und das 2-stufige DME-Verfahren liegen bei 60 bis 76 Mil. €₂₀₁₇. Deutlich höhere Investitionskosten bestehen für die komplexeren Verfahren der OME₃₋₅-Synthesen. Für diese Verfahren werden Kosten von 202,5 bis 414,5 Mil. €₂₀₁₇ bestimmt, wobei für Route A deutlich geringere Kosten veranschlagt werden als für die Routen B und C. Ein wesentlicher

Kostenbestandteil dieser Routen liegt in dem aufwändigen Aufbau der Trioxansynthese. Die gestrichelten Linien in Abbildung 35 zeigen die Grenzen der Genauigkeit der angewendeten Methode. Eine mögliche Unschärfe zur kostengünstigeren Seite wird mit -30 % und eine Unschärfe zur kostensteigerenden Seite mit +50 % angegeben. Diese Unsicherheiten besitzen besonders für die OME₃₋₅-Synthese große Auswirkungen. Die Investitionskosten können gemeinsam mit den Prozessdaten genutzt werden um die Produktgestehungskosten der verschiedenen Verfahren zu bestimmen. Eine grafische Darstellung der einzelnen Kostenbestandteile ist in Abbildung 36 zu finden.

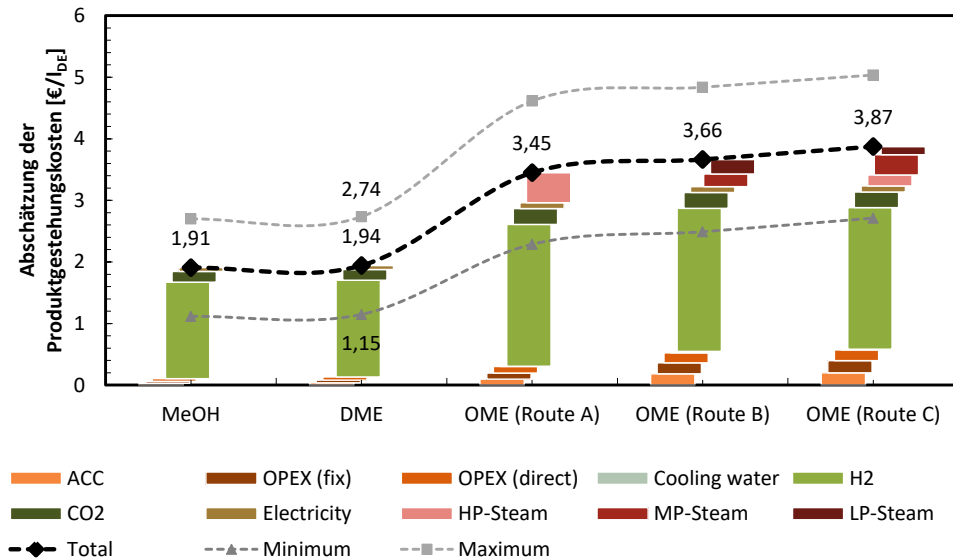


Abbildung 36: Vergleich der Produktgestehungskosten von alternativen Kraftstoffproduktionssystemen mit einer Syntheseleistung von 300 MW_{th}

Offensichtlich werden die Kosten von alternativen Kraftstoffen von den Kosten für die Bereitstellung von H₂ getrieben. In allen betrachteten Fällen machen die Bereitstellungskosten von H₂ mit ca. 80 % den größten Faktor innerhalb der gezeigten Analyse aus. Als zweiter großer Kostenbestandteil stehen die Bereitstellungskosten von CO₂ in allen Fällen zu Buche (< 9 %). Damit lässt sich an dieser Stelle festhalten, dass die Kosten für PtF-Verfahren maßgeblich über die laufenden Betriebskosten und Rohstoffe zu charakterisieren sind und Investitionskosten nur einen geringen Einfluss auf die Bewertung besitzen. Die Investitionskosten werden erst mit steigender Komplexität der Verfahren relevant. Im Fall der der OME₃₋₅-Synthesen liefern die jährlichen Kapitalkosten AAC einen nennenswerten Beitrag zum allgemein gehobenen Kostenniveau. Die ökonomische Bewertung der PtF-Routen mit dem vorgestellten Basisparametersatz bestimmt die Kosten für die Herstellung von Methanol und DME auf ca. 1,94 €/l_{DE}, während die Kosten für die OME₃₋₅-Produktion bei ca. 3,45 bis 3,87 €/l_{DE} liegen. Die Produktgestehungskosten für OME₃₋₅ liegen also fast doppelt so hoch wie die Kosten für Methanol und DME. Für eine Veredelung von DME zu OME₃₋₅ muss dementsprechend viel Geld investiert werden. Die angegebenen Kosten der Basisparametrisierung werden in Abbildung 36 durch die minimalen und maximalen Produktgestehungskosten aus den Parametervariationen der verschiedenen Verfahren

ergänzt. Diese Angaben geben einen Einblick auf das Antwortverhalten der Kostenfunktionen bezüglich einer Reduktion oder Steigerung der Kostenannahmen. Durch diese Betrachtung kann eine Abschätzung erfolgen, welche Kostenniveaus durch besonders gute Standortbedingungen bzw. Versorgung mit H₂ erreicht werden können. Einen detaillierteren Einblick in die Kostenbestandteile erlaubt Abbildung 37.

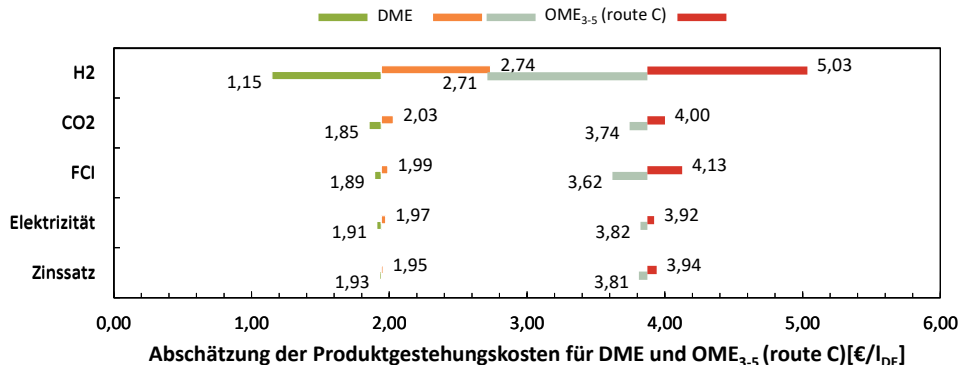


Abbildung 37: Sensitivitätsstudien zu den Kostenbestandteilen von DME und OME₃₋₅ nach Route C, Bestandteile wurden $\pm 50\%$ variiert (Basissatz: 4,6 €/kgH₂; 70 €/tCO₂; 0,0976 €/kWh; i = 8 %)

Abbildung 37 verdeutlicht einmal mehr die Bedeutung einer kostengünstigen H₂-Versorgung. Alle weiteren Variationen besitzen im Vergleich zu H₂ eine untergeordnete Bedeutung. Auffallend ist der gesteigerte Einfluss der FCI für die OME₃₋₅-Produktion im Vergleich zur DME-Synthese. Dieser Umstand kann mit den deutlich höheren Investitionskosten für die OME₃₋₅-Produktion begründet werden (vgl. Abbildung 35). Um die Kosten für die Produktion der Kraftstoffe einordnen zu können, arbeitet Abbildung 38 einen Vergleich der relevanten Prozesse heraus.

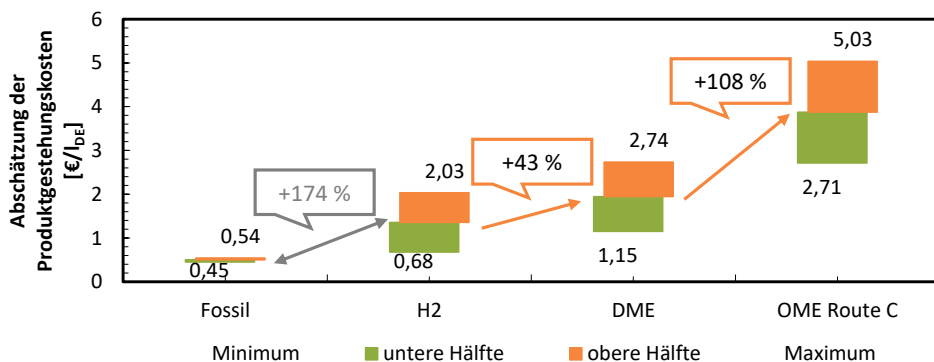


Abbildung 38: Vergleich der Produktionskosten für alternative und konventionelle Kraftstoffe, die Daten für die konventionellen Kraftstoffe wurden aus dem jährlichen Bericht des deutschen Mineralölwirtschaftsverbandes (MWV) [104] adaptiert.

Die Kosten für die konventionelle Kraftstoffproduktion wurde ausgehend von jährlich gemittelten Kraftstoffpreisen in Deutschland zwischen 2015 und 2019 und der aktuellen Preiszusammensetzung für 2020 von DSTATIS zurückgerechnet (September 2020, <https://de.statista.com/statistik/daten/studie/803/umfrage/zusammensetzung---verbraucherpreis-fuer-diesel/>). Somit ist diese Angabe als eine Abschätzung anzusehen, da reale Marktdaten nicht verfügbar sind. Die Angaben enthalten ebenfalls die Marge, welche die Hersteller für sich beanspruchen. Nichtsdestotrotz vermitteln die in Abbildung 38 dargestellten Ergebnisse ein klares Bild von der Wettbewerbsfähigkeit alternativer Kraftstoffe. Die Produktgestehungskosten von H_2 liegen bereits deutlich oberhalb der konventionellen Kraftstoffe wie Diesel und Benzin. Die Synthesen von DME und OME₃₋₅ verbuchen darauf aufbauend weitere Kostensteigerungen, sodass ein Vielfaches an Kosten entsteht. Die Veredlung von DME zu OME₃₋₅ ist dabei aber deutlich kostenintensiver als die Synthese von DME aus H_2 und CO_2 . Diese Bewertung bzw. der Vergleich mit konventionellen Kraftstoffen ist allerdings nicht fair, da die alternativen Kraftstoffe eine neutrale CO_2 -Bilanz vorweisen können.

2.2.6 Schlussfolgerungen der techno-ökonomischen Bewertung von PtF-Kraftstoffsynthesen

Im Rahmen des ALIGN-CCUS Projekts wurden vom Forschungszentrum Jülich diverse PtF-Produktionswege durch Prozesssimulationen der Verfahren ausgelegt und aufbauend auf den erstellten Prozessdaten ökonomisch bewertet. Die Verfahren wurden dabei durch das Power-to-Fuel Konzept mit nachhaltigen Edukten wie H_2 und CO_2 versorgt und bilden somit eine erneuerbare Versorgungskette für die Dekarbonisierung bzw. Defossilisation des Verkehrssektors. Alternative Kraftstoffe wie Methanol, Dimethylether oder Polyoxymethyldimethylether (OME₃₋₅) sind in die Untersuchung integriert. Gerade für die langkettigen Polyoxymethyldimethylether bestehen nach Burger [105] verschiedene Herstellungsverfahren, welche vollständig und mit den Synthesen aller Zwischenprodukte⁵ analysiert wurden. Die Prozesssimulation und Verfahrensanalyse dieser komplexen Produktionssysteme unterlag dabei zwei grundlegenden Herausforderungen:

1. Mischungen bestehend aus Methanol, Formaldehyd und Wasser besitzen ein hochgradig nicht ideales thermodynamischen Verhalten, welche die Anwendungen von speziellen Modellen für die Beschreibung von Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichten erfordert. Erst mit der Implementierung dieser Modelle ist es möglich die anvisierten Syntheseverfahren mit Prozessschritten wie der Destillation von Produkten mit hinreichender Genauigkeit auszulegen.
2. Viele Stoffdaten von Spezies in der OME₃₋₅-Synthese sind nicht in den gängigen Stoffdatenbanken von ASPEN Plus® enthalten und müssen abgeschätzt werden.

Die angewendete Methodik um diese beiden Herausforderungen zu überwinden wurde von Schemme et al. [77] publiziert. Für die Beschreibung der Phasengleichgewichte wurde das Modell von Maurer [76] für die Integration in ASPEN Plus® gefittet und mit dem UNIFAC-Modell verbunden. Für die Bestimmung von fehlenden Stoffdaten wurde das Property Component Estimation System (PCES) angewendet.

⁵ Zwischenprodukte für die OME₃₋₅-Synthesen sind: Formaldehyd, Trioxan und Methylal

Mit dieser Modellierung konnten alle Verfahren vollständig ausgelegt und analysiert werden. Die Ergebnisse der technischen Bewertung werden durch Abbildung 39 dargestellt.

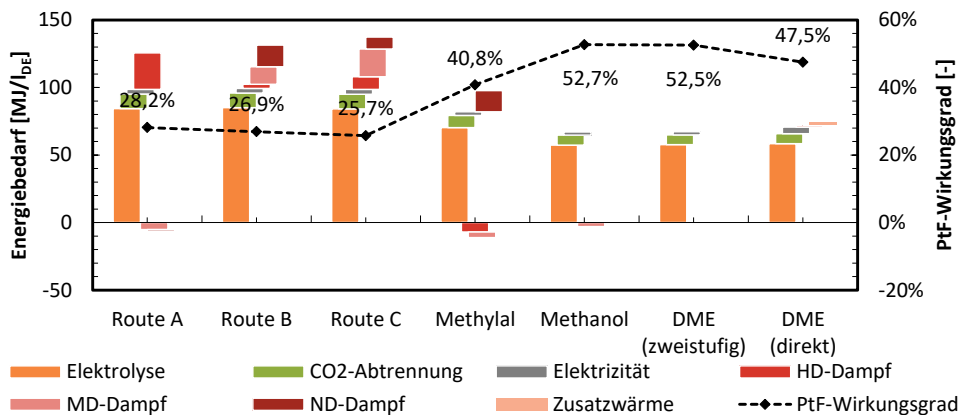


Abbildung 39: Energiebedarfe und PtF-Wirkungsgrade der analysierten Kraftstoffproduktionen ($\eta_{el}=0,7$; $e_{CO_2}=3 \text{ MJ/kg}_{CO_2}$)

Das Ergebnis der technischen Analyse der Verfahren wird vom PtF-Wirkungsgrad komprimiert zusammengefasst. Das zweistufige DME-Verfahren zeigt sich in diesem Vergleich als besonders effizient und benötigt kaum Energie um Methanol zu DME zu veredeln. Im Gegensatz dazu sinkt der PtF-Wirkungsgrad für das direkte Verfahren der DME-Synthese aufgrund eines erhöhten Energiebedarfs für die Kompressionskältemaschine und des zusätzlichen Wärmebedarfs für den Betrieb der ersten Kolonne. Die Verfahren für die Synthese von OME₃₋₅ besitzen aufgrund der komplexen Verfahrensführung hohe Energiebedarfe für die Aufreinigung von Zwischenprodukten und fallen daher stark im Vergleich der PtF-Wirkungsgrade ab.

Die Ergebnisse der Verfahrensanalyse wurde genutzt um mit der Komponentenkostenmethode nach R. Turton [24] die Produktgestehungskosten zu bestimmen. Die Investitionskosten in die verschiedenen Produktionssysteme wurden durch die einheitliche Produktionskapazität von 300 MW_{th} normiert. Diese Größe stellt zugleich eine Maßstabsvergrößerung der Demonstrator-technologie dar. Diese Maßstabsvergrößerung ermöglicht es die industriellen Potenziale der Technologien abzuschätzen und zu bewerten. Die Investitionskosten der Produktionssysteme liegen zwischen 60 und 414,5 Mil. € für 2017. Die fokussierte OME₃₋₅-Syntheseroute C war mit Abstand das teuerste Verfahren in diesem Vergleich. Die Syntheseroute C und auch Route B leiden in ihrer Bewertung unter der Integration der Trioxansynthese, welche neben hohen Investitionskosten auch hohe Energiebedarfe besitzt und somit in doppelter Weise auf die Bewertung der Verfahren Einfluss nimmt. Bongartz et al. [106] und Burre et al. [107] bestätigen in ihrer Arbeit die vorliegende Bewertung. Die Produktgestehungskosten jeder ausgewählten Kraftstoffalternative wurden im Rahmen dieses Projektes durch umfangreiche Sensitivitätsstudien analysiert. Die Produktgestehungskosten für DME nach der ausgewählten Basisparametrisierung liegen bei 1.94 €/l_{DE}. Das Veredeln von DME nach der Route C führt zu einem Kostenanstieg auf ca. 3.87 €/l_{DE}. Dieser große Preisunterschied lässt schlussfolgern, dass diese Art der Weiterverarbeitung keinen realistischen Business-Case darstellt und die Kosten für eine Erweiterung der Anlage als auch für eine systemische Relevanz von OME₃₋₅ zu hoch liegen.

- Die Produktgestehungskosten von OME₃₋₅ sind nach allen untersuchten Verfahren zu hoch um mit weiteren alternativen Kraftstoffen wie Methanol, DME, MtG oder Fischer-Tropsch-Produkten zu konkurrieren. Gleichzeitig sind die Verfahren als ineffizient zu charakterisieren, wodurch die Speicherung von erneuerbarem Strom durch alternative Verfahren wie Fischer-Tropsch-Prozesse oder Methanol-to-X-Verfahren zu bevorzugen ist.

2.3 Life Cycle Assessment der Demonstratortechnologie

Für die Analyse der Umwelteffekte, die durch den Einsatz der Demonstratortechnologie entstehen wurde eine LCA im Arbeitspaket 4.4.4 durchgeführt. Eine LCA ist gemäß den Normen ISO 14040 und ISO 14044 [108, 109] in vier Schritte unterteilt: Festlegung des Ziel- und Untersuchungsrahmens (Goal and Scope Definition), Sachbilanz (Life Cycle Inventory, LCI), Wirkungsabschätzung (Life Cycle Impact Assessment, LCIA) und Interpretation. In diesem Kapitel werden zunächst die Rahmenbedingungen (2.3.1), dann die untersuchten Systeme und Szenarien (2.3.2) beschrieben. Im Abschnitt 2.3.3 werden die Ergebnisse präsentiert, die in Abschnitt 2.3.4 zusammenfassend diskutiert werden.

2.3.1 Goal and Scope Definition

Bei der Festlegung des Ziel- und Untersuchungsrahmens werden das Untersuchungsobjekt, die Systemgrenzen und die funktionelle Einheit (Functional Unit, FU) der Analyse beschrieben. In Niederaußem wurden zwei mögliche Prozessrouten demonstriert. Für jede Route, CCU-Mobilität und CCU-Peak Power, wurden die Rahmendaten definiert.

2.3.1.1 Funktionelle Einheit

Für die beiden CCU-Optionen, die im ALIGN-CCUS Projekt durch den Demonstrator abgebildet werden, wurden jeweils eine attributive Cradle-to-Gate-LCA durchgeführt. Die funktionelle Einheit (FU) ist zum einen "1 kWh Spitzenstrom (Peak Power)" und zum anderen "1 km gefahrene Strecke".

2.3.1.2 Allokation der CO₂-Abscheideaufwendungen

Die Methode der LCA gibt verschiedene Möglichkeiten vor, wie die Aufwendungen für die CO₂ Abscheidung/Bereitstellung auf beide Systeme, CO₂ Quelle und CO₂ Senke, aufgeteilt werden können. Sie bestimmen maßgeblich die Ergebnisse. Die Bewertung der verschiedenen Auswirkungen der CO₂-Bereitstellung sowie die beste Art und Weise, die Ausgaben für den Abscheidungsprozess zu berücksichtigen, ist Gegenstand mehrerer kontroverser Studien [110]. Eine Herangehensweise ist die Allokation der entstehenden Wirkungen in einer vordefinierten Weise auf beide Produkte. Nach intensiver Diskussion mit den Projektpartnern wurde die Zuordnung wie folgt für die untersuchten Systeme im ALIGN-CCUS Projekt definiert: Alle Aufwendungen, die durch die Implementierung der CCU-Technologie entstehen, werden dem CCU-Produkt zugerechnet. Dazu gehören alle zusätzlichen Emissionen und Stoffströme sowie die vermiedenen CO₂-Emissionen und Stoffströme. Ein wichtiger Vorteil dieses Ansatzes ist ein einfacher Vergleich verschiedener Szenarien und Benchmarking-Routen. Das für die CCU-Route benötigte CO₂ wird in den Ergebnissen als negative Auswirkung dargestellt und daher als Gutschrift (gekennzeichnet als: allocation credit) formuliert. Die Gesamtsumme aller Emissionen zeigt die Nettoauswirkungen pro FU.

2.3.1.3 Datenquellen

Die vorliegende Untersuchung wurde mit der LCA-Software GaBi 6 der Firma Sphera Solutions GmbH in der Softwareversion 9.5.2.49 [111] durchgeführt. Im LCI werden Informationen über Stoff- und Energieströme sowie Emissionen in Luft, Wasser oder Boden entlang des Lebensweges erhoben. Die meisten LCI-Daten der CCU-Produktionstechnologien (sog. Vordergrunddaten) sind reale Prozessdaten aus dem Demonstrator. Verzögerungen und Rückschläge während des gesamten Projekts machten jedoch die Beschaffung von realen

Prozessdaten in Teilen schwierig oder sogar unmöglich. Daher wurden alternative Datenquellen, wie z. B. die Prozessmodellierung durch ASPEN Plus® oder alternative Testdaten einbezogen. Weitere Hintergrunddaten zum LCI stammen aus den ecoinvent-Versionen 3.4 und 3.6, wie sie in der GaBi-Software enthalten sind, sowie aus der GaBi-eigenen Fachdatenbank.

2.3.1.4 Wirkungskategorien

Während der Wirkungsabschätzung werden den gesammelten Daten zu Material, Energie und Emissionen potenzielle Auswirkungen auf verschiedene Umwelteffekte, sogenannte Wirkungskategorien zugewiesen. Dies ermöglicht einen Vergleich mit konventionellen Benchmark-Technologien. Die untersuchten Wirkungskategorien wurden nach der ReCiPe-Methodik für LCIA, Version 2016 v1.1 Midpoint (Hierarchist) [112] ermittelt. Die verschiedenen Prozessketten wurden anhand der folgenden sechs Wirkungskategorien verglichen:

- Treibhauspotenzial (Global Warming Potential, GWP) [kg CO₂-Äqv.],
- Feinstaubbildung (Fine Particulate Matter Formation, PM) [kg PM 2.5-Äqv.],
- Erschöpfung fossiler Ressourcen (Fossil Depletion Potential, FDP) [kg Öl-Äqv.],
- Sommersmogbildung, Ökosysteme (Photochemical Ozone Creation Potential, Ecosystems, POCP_e) [kg NO_x-Äqv.],
- Sommersmogbildung, Human Health (Photochemical Ozone Creation Potential, Ecosystems, POCP_h) [kg NO_x-Äqv.],
- Terrestrische Versauerung (Terrestrial Acidification Potential, AP) [kg SO₂-Äqv.],

Diese Kategorien wurden gewählt, weil sie die strom- und transportbedingten Wirkungskategorien widerspiegeln und somit die Motivation für CCU abbilden.

2.3.2 Systembeschreibung

In Abbildung 40 sind die beiden Prozessrouten, sowie die Systemgrenzen der LCA für die Anwendungen CCU-Mobilität und CCU-Peak Power dargestellt. Die blau hinterlegten Prozessstufen sind in Niederaußem errichtet und lieferten Prozessdaten. Die One-Step-DME-Anlage ist errichtet und Materialdaten entsprechen dem Prototyp, Prozessdaten wurden jedoch modelliert. Ebenso wurde die OME-Syntheseeinheit vollständig modelliert und nicht in Niederaußem installiert. Daten zur Energiebereitstellung entstammen den LCA Datenbanken. Zum einen wurde der deutsche Strommix (2016) genutzt unter Verwendung des GaBi-Datensatzes *DE: Electricity grid mix ts*. Der andere Datensatz berücksichtigte Windenergie (*DE: Electricity from wind power ts*).

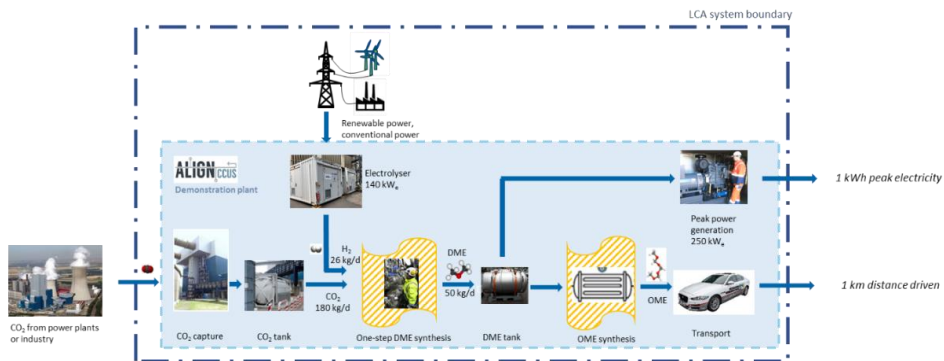


Abbildung 40: LCA-Systemgrenzen des CCU-Demonstrators in Niederaußem. hellblau: in Niederaußem installierte Komponenten des Demonstrators, gelb schraffiert: modellierte Komponenten

2.3.2.1 Benchmark Systeme

Für die Mobilitätsanwendung wurden mehrere Benchmark-Technologien ausgewählt, die sowohl bestehende Systeme als auch weitere Zukunftssysteme umfassen. Dazu gehören die konventionelle Diesel- und Benzinmobilität, aber auch die E-Mobilität als eine weitere Option zur Emissionsminderung im Verkehrssektor. Für alle Elemente des Fahrzeug- und Motorenbaus werden Daten aus den Datenbanken GaBi und ecoinvent verwendet, teilweise mit Anpassungen. Für die Dieselmobilität wurde ein Datensatz für einen PKW mit Messdaten des VKA [113] verknüpft. Der untersuchte Motor hat einen unterdurchschnittlichen Kraftstoffverbrauch. Um einen fairen Vergleich mit einem ähnlich effizienten Ottomotor zu ermöglichen, wurde ein zusätzliches Benchmarking-System mit einem reduzierten Verbrauch für Benzin hinzugefügt.

Da es keine eindeutige Definition von Peak Power gibt, war die Festlegung von Benchmark-Technologien schwierig. In Absprache mit den Projektpartnern wurde ein Dieselmotor sowie eine Gasturbine als Benchmark-Technologien definiert. Die Daten für die Dieselmotorleistung wurden vom VKA an der RWTH Aachen bereitgestellt [113].

2.3.2.2 Szenarien

Für beide Anwendungsoptionen wurde jeweils ein Szenario mit verschiedenen Fällen erstellt, die sich durch die Wahl des Kraftstoffs (DME, OME₃₋₅ und Benchmark-Technologien), die Energiequelle für die Stromerzeugung (Netzstrom oder Wind) und die Abgasbehandlungsoptionen (mit und ohne Abgasrückführung (AGR)) unterscheiden.

CCU Mobilität

Obwohl die Nutzung von DME in der Mobilitätsanwendung in ALIGN-CCUS zunächst nicht vorgesehen war, konnten zusätzliche Messdaten von FORD [114] aus dem Projekt XME-Diesel genutzt werden, um eine potentielle DME Nutzung abzubilden. Dieser Datensatz beinhaltet Verbrauch, CO₂-Emission und NO_x-Emission. Andere potenzielle Emissionen (Partikel, SO₂, ...) waren nicht enthalten. Folglich konnten nicht alle Wirkungskategorien abgebildet werden.

Für die OME₃₋₅-Optionen wurden zwei verschiedene Datensätze betrachtet. Ein Datensatz wurde von ALIGN-Partnern aus den durchgeführten Motortests generiert. Ein weiterer, ausschließlich modellierter Datensatz aus der Literatur (mit "Hank" gekennzeichnet) wurde dem vergleichend gegenüber gestellt. Die Autoren Hank et al. [115] schätzen den OME-Bedarf eines Pkw auf der Grundlage des EU-weiten Verkehrsmodells TREMOVE [116] der Europäischen Union ab. Beide Datensätze wurden sowohl mit Netz- als auch mit Windenergie für den Elektrolyseur analysiert. Für die Benchmark-Technologien wurden angepasste Diesel- und Benzindatensätze verwendet. Zusätzlich wurde die E-Mobilität als Benchmark-Technologie einbezogen, wobei sie einmal mit Netzstrom und zum anderen mit Windstrom betrieben wird. Insgesamt wurden 10 verschiedene Optionen für das Mobilitätsszenario untersucht.

- DME Grid (FORD)
- DME Wind (FORD)
- OME-Grid (Hank)
- OME Grid (ALIGN)
- OME Wind (Hank)
- OME Wind (ALIGN)
- Diesel
- Benzin
- E-Mobilität Grid
- E-Mobilität Wind

CCU Peak Power

Insgesamt wurden sechs verschiedene Fälle zur Spitzenstromerzeugung mit DME untersucht, die sich vor allem in der Strombereitstellung (für die DME-Synthese) und der Abgasbehandlung am Motor unterscheiden. Enthalten ist sowohl Strom für die DME-Synthese aus Netz- als auch aus Windstrom. Darüber hinaus zeigen die mit ALL WIND gekennzeichneten Fälle ein Konzept, das erneuerbaren Windstrom sowohl für die CO₂-Abscheidung als auch für den Elektrolyseur bzw. die DME-Synthese nutzt. Da der getestete Motor nicht mit einem aktuellen AGR-System ausgestattet war, wurden zusätzlich Fälle betrachtet, die eine Abschätzung der möglichen Verbesserungen und Verschlechterungen bei der Implementierung der neuesten AGR-Technologie beinhalten. Zusammen mit den beiden Benchmark-Technologien wurden insgesamt 8 verschiedene Fälle für die Spitzenlastanwendung untersucht.

- DME Grid

- DME Wind
- DME Grid, EGR
- DME Wind, EGR
- DME ALL WIND
- DME ALLE WIND, EGR
- Diesel
- Gasturbine

2.3.3 Ergebnisse

Die folgenden Ergebnisse sind in die beiden Szenarien 'CCU - Mobilität' und 'CCU - Peak Power' unterteilt. Jedes Unterkapitel zeigt die Ergebnisse für alle untersuchten Wirkungskategorien. Die GWP-Ergebnisse werden in zwei verschiedenen Abbildungen dargestellt. Eine zeigt den Beitrag der verschiedenen Elemente entlang der Prozesskette zur Gesamtbelastung. Dies hilft dabei, Hotspots entlang der CCU-Kette zu identifizieren. Diese Form der Darstellung beinhaltet die Gutschrift für den Einsatz von CO₂. Die zweite Abbildung aggregiert das Netto-GWP der gesamten CCU-Kette. Dies erleichtert den Vergleich der verschiedenen Szenario-Fälle. Da für die anderen Wirkungen keine Gutschriften erteilt werden, wird jeweils nur die Abbildung der Prozesskettenabschnitte gezeigt.

2.3.3.1 CCU-Mobilität

Für den Einsatz von DME und OME im Mobilitätsbereich wurden 10 verschiedene Fälle verglichen. Die Ergebnisse werden pro gefahrenen km des Fahrzeugs dargestellt.

Treibhauspotenzial (Global Warming Potential, GWP)

Die Liste der Emissionen, die sich auf die Kategorie Treibhauspotenzial (GWP) auswirken, ist lang, wobei die häufigsten Emissionen CO₂, Methan und Kohlenwasserstoffe sind. Für OME₃₋₅ und DME-Mobilität unter Verwendung von Netzstrom hat der Stromverbrauch der Kraftstoffsynthese den höchsten Beitrag hinsichtlich des GWP (Abbildung 41). Insbesondere die Wasserstoffherzeugung mittels Elektrolyse trägt dazu bei.

Bei der Verwendung von Windenergie ändern sich die Ergebnisse deutlich. Für die DME-Mobilität spielt der Syntheseenergiebedarf bei Verwendung von erneuerbarem Strom nur eine geringe Rolle in der Gesamtwirkung. Für die OME-Mobilität ist dieser immer noch signifikant. Dies ist auf einen erheblichen Bedarf an nicht-erneuerbarem Prozessdampf für die Syntheseschritte zurückzuführen, der bei allen Anwendungen erhalten bleibt. Der Einfluss des Strombedarfs nimmt jedoch deutlich ab. Der Unterschied bezüglich der Emissionen am Fahrzeug zwischen den Optionen OME₃₋₅ (Hank) und OME (ALIGN) resultiert aus den in Hank [115] angegebenen höheren Kraftstoffverbrauchswerten. Dies führt nicht nur zu höheren Emissionswerten am Fahrzeug, sondern auch von allen Vorketten der OME-Produktion.

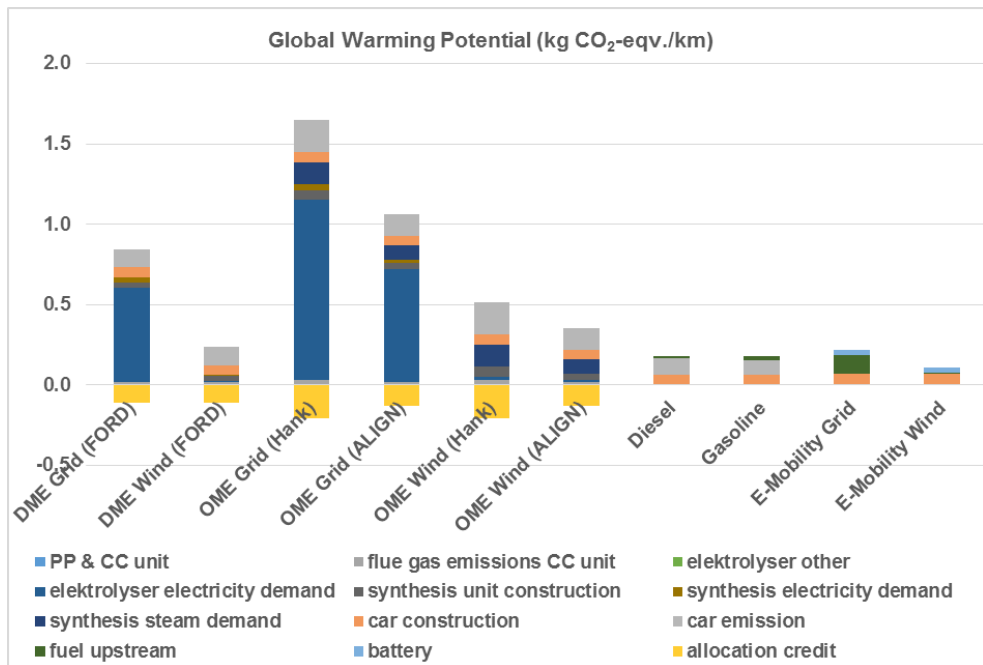


Abbildung 41: Treibhauspotential (GWP, kg CO₂-Äqv./km) für das Mobilitätsszenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie, PP = power plant, CC = carbon-capture.

Die Netto-GWP Werte sind in Abbildung 42 dargestellt. Für den DME-Fall mit Netzstrom werden 736 g CO₂-Äqv./km (DME Grid (FORD)) erreicht. Bei der OME₃₋₅-Mobilität liegt das GWP sogar noch höher: 1.445 g CO₂-Äqv./km (OME Grid (Hank)) und 936 g CO₂-Äqv./km (OME Grid (ALIGN)). DME-Mobilität mit erneuerbarem Windstrom für die Synthese kann im Vergleich zur Diesel- und Benzin-Mobilität (jeweils 180 g CO₂-Äqv./km) eine Reduzierung erreichen (129 g CO₂-Äqv./km DME Wind (FORD)). Alle anderen DME- und OME-Optionen verbuchen höhere Emissionswerte als die untersuchten Benchmark-Technologien. Das niedrigste GWP wird bei E-Mobilität mit regenerativem Windstrom erreicht (107 g CO₂-Äqv./km).

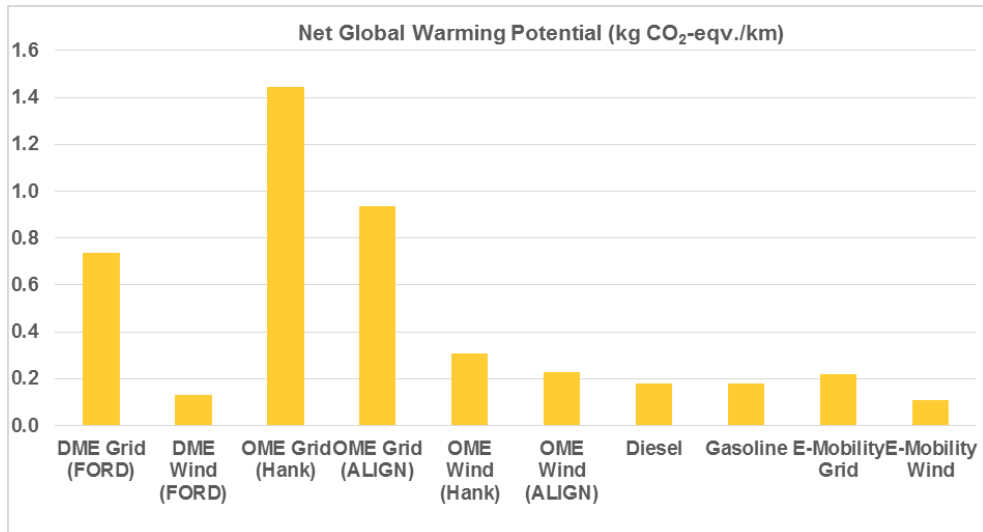


Abbildung 42: Netto-Treibhauspotential (Net GWP, kg CO₂-Äqv./km) für das Mobilitätsszenario.

Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie.

Feinstaubbildung (Fine Particulate Matter Formation, PM)

Für die Wirkungskategorie Feinstaubbildung (PM) sind neben Feinstaubpartikeln, Ammoniak, Nitrat, NO_x und SO_x die wichtigsten Emissionen. Beim Vergleich der OME₃₋₅-Optionen untereinander haben diejenigen, die Pkw-Emissions- und Kraftstoffverbrauchsdaten von Hank [115] verwenden, eine deutlich höhere Belastung (OME Grid (Hank): 0,79 g PM 2,5-Äqv./km; OME Wind (Hank): 0,47 g PM 2,5-Äqv./km; OME Grid (ALIGN): 0,50 g PM 2,5-Äqv./km; OME Wind (ALIGN): 0,30 g PM 2,5-Äqv./km) (Abbildung 43). Beide Datensätze enthalten keine Daten für Feinstaubpartikel. Der Unterschied ist hauptsächlich darauf zurückzuführen, dass Hank sowohl einen höheren Kraftstoffverbrauch als auch deutlich höhere NO_x-Emissionen des Motors angibt als vom VKA gemessen. Die Feinstaubkonzentration in der Umgebung wird durch die Emissionen von Primär- und Sekundärstaub erhöht. Der Mechanismus für die Entstehung von Sekundäremissionen beinhaltet SO₂ und NO_x Emissionen, die Sulfat- und Nitrat-Aerosole erzeugen. Daher führen die hohen NO_x-Emissionen zu erhöhten Belastungswerten für PM. Der höhere Kraftstoffverbrauch hat wiederum den Effekt der Erhöhung der Emissionen von Vorketten. Die Nutzung von Windstrom reduziert die vorgelagerten Emissionen deutlich. Der Fahrzeugbau spielt für allen Optionen eine bedeutende Rolle, obwohl er den relativen Unterschied zwischen den Fällen nicht verändert. In den E-Mobilitätsoptionen ist zu erkennen, dass der Bau der Batterie einen großen Einfluss auf die PM-Ergebnisse hat.

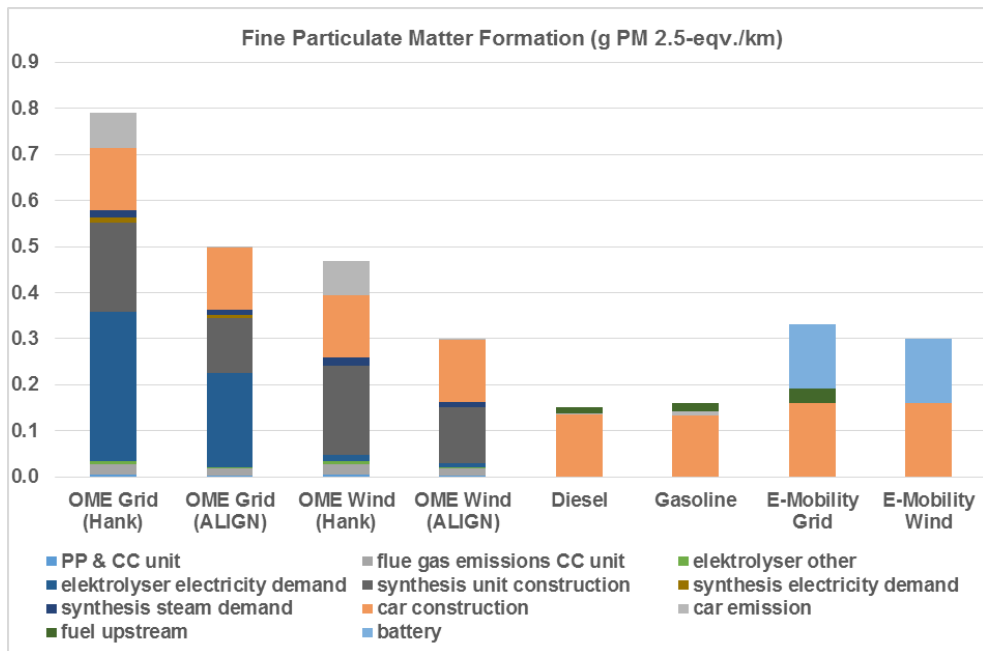


Abbildung 43: Feinstaubbildung (PM, g PM-Äqv./km) für das Mobilitätsszenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie, PP = power plant, CC = carbon capture.

Erschöpfung fossiler Ressourcen (Fossil Depletion Potential, FDP)

Die Wirkungskategorie Erschöpfung fossiler Ressourcen (FDP) fasst den Verbrauch an fossilen Ressourcen zusammen. FDP ist eng mit dem Energieverbrauch von nicht erneuerbaren Ressourcen wie Kohle, Gas und Öl verbunden. Daher haben die Fälle mit dem höchsten Energiebedarf auch die höchsten Auswirkungen in der Kategorie FDP (Abbildung 44). Die Auswirkungen der OME₃₋₅-Optionen (496 g Öl-Äqv./km OME-Grid (Hank); 317 g Öl-Äqv./km OME-Grid (ALIGN); 167 g Öl-Äqv./km OME-Wind (Hank); 111 g Öl-Äqv./km OME-Wind (ALIGN)) sind bis zu 9-mal höher als bei Diesel oder Benzin (jeweils 55 g Öl-Äqv./km). DME erzielt aufgrund der höheren Energieeffizienz seines Syntheseprozesses wiederum niedrigere FDP-Werte (245 g Öl-Äqv./km DME Grid (FORD); 69 g Öl-Äqv./km DME Wind (FORD)). Die Einführung von erneuerbarer Energie führt für alle Optionen zu deutlich niedrigeren FDP-Werten.

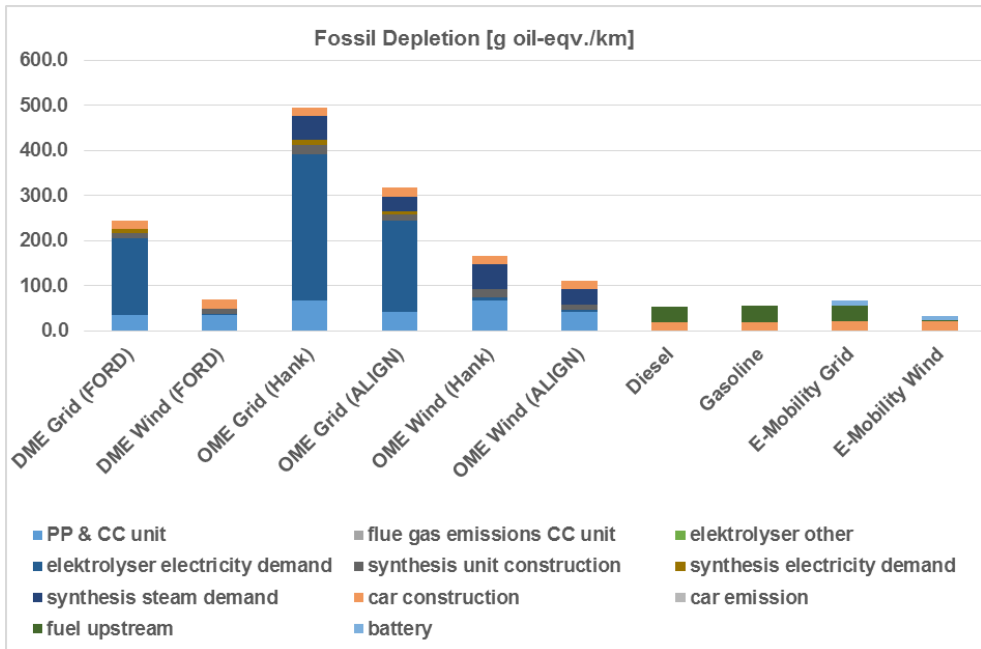


Abbildung 44: Erschöpfung fossiler Ressourcen (FDP, g Öl-Äqv./km) für das Mobilitätsszenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette.

Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie, PP =: power plant, CC = carbon capture.

Sommersmogbildung, Ökosysteme (Photochemical Ozone Creation Potential, Ecosystems, POCP_e)

Die Hauptemissionen für die Kategorie Sommersmogbildung (POCP_e) sind NO_x Emissionen. Die Ergebnisse in Abbildung 45 zeigen eine ähnliche Verteilung wie die GWP-Ergebnisse. Die NO_x-Emissionen sind eng mit der fossilen Energieerzeugung verknüpft, daher hat die energieintensive Mobilität mit OME₃₋₅ unter Verwendung von fossilem Dampf und Netzstrom einen sehr hohen Einfluss (2,49 g NO_x -Äqv./km OME-Grid (Hank) und 1,19 g NO_x -Äqv./km OME-Grid (ALIGN)). Bei der Betrachtung der Optionen unter Verwendung der Pkw-Emissionsdaten von Hank sind die direkten NO_x-Emissionen im Pkw-Abgas im Vergleich zu allen anderen Optionen sehr hoch. Sobald Windenergie in den Syntheseprozess eingebracht wird, kommt es zu einer deutlichen Reduzierung der POCP_e-Emissionen. Im Gegensatz zu den GWP-Ergebnissen fallen keine Optionen, auch nicht die effizienteren DME Varianten, unter das Niveau der Benchmark-Technologien.

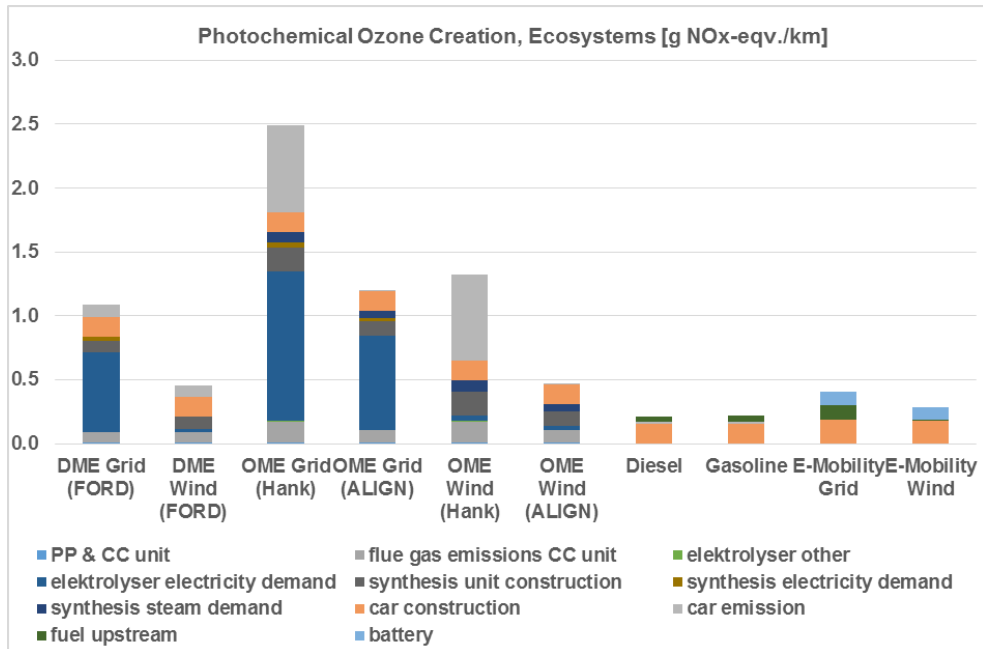


Abbildung 45: Sommersmogbildung, Ökosysteme (POCP_e, g NO_x-Äqv./km) für das Mobilitätsszenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette.

Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie, PP = power plant, CC = carbon capture.

Sommersmogbildung, Human Health (Photochemical Ozone Creation Potential, Ecosystems, POCP_h)

Hier wirken die gleichen Emissionen wie bei POCP_e. Die Ergebnisse der Kategorie POCP_h in

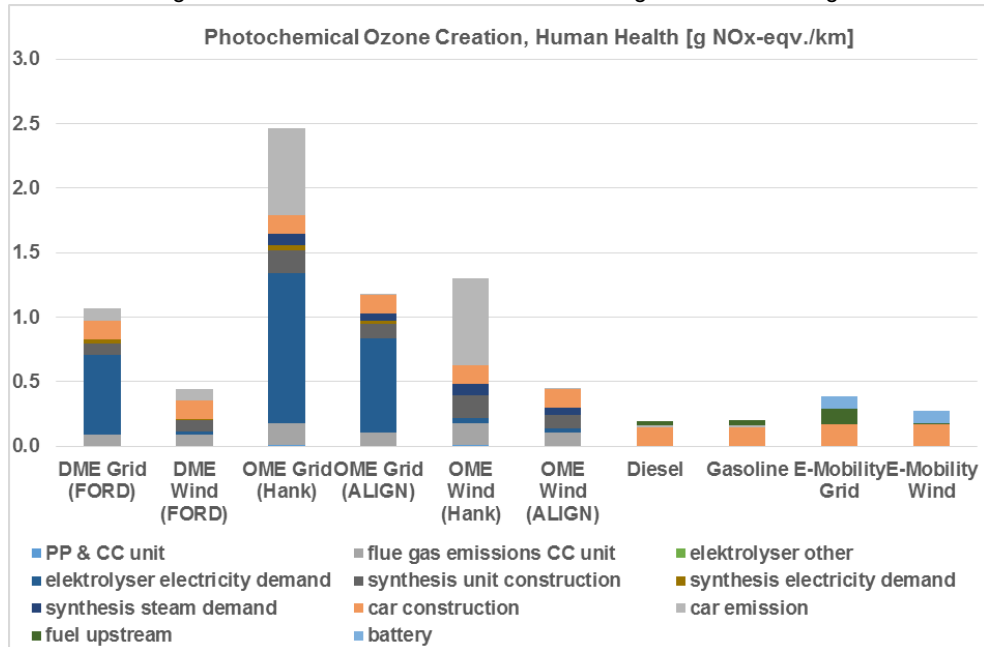


Abbildung 46 liegen sehr nah an denen von POCP_e. Daher können die gleichen Schlussfolgerungen gezogen werden: Da die NO_x-Emissionen eng mit der fossilen Energieerzeugung verknüpft sind, hat die energieintensive Mobilität mit OME unter Nutzung von Netzstrom eine sehr hohe Auswirkung (2,47 g NO_x-Äqv./km OME-Grid (Hank) und 1,30 g NO_x-Äqv./km OME-Grid (ALIGN)). Bei der Betrachtung der Optionen unter Verwendung der Pkw-Emissionsdaten von Hank sind die NO_x-Emissionen im Pkw-Abgas sehr hoch. Sobald Windenergie im Syntheseprozess eingesetzt wird, kommt es zu einer deutlichen Reduzierung

der POCP_h-Emissionen. Insgesamt sinken die Emissionen nicht unter das Niveau der Benchmark-Technologien.

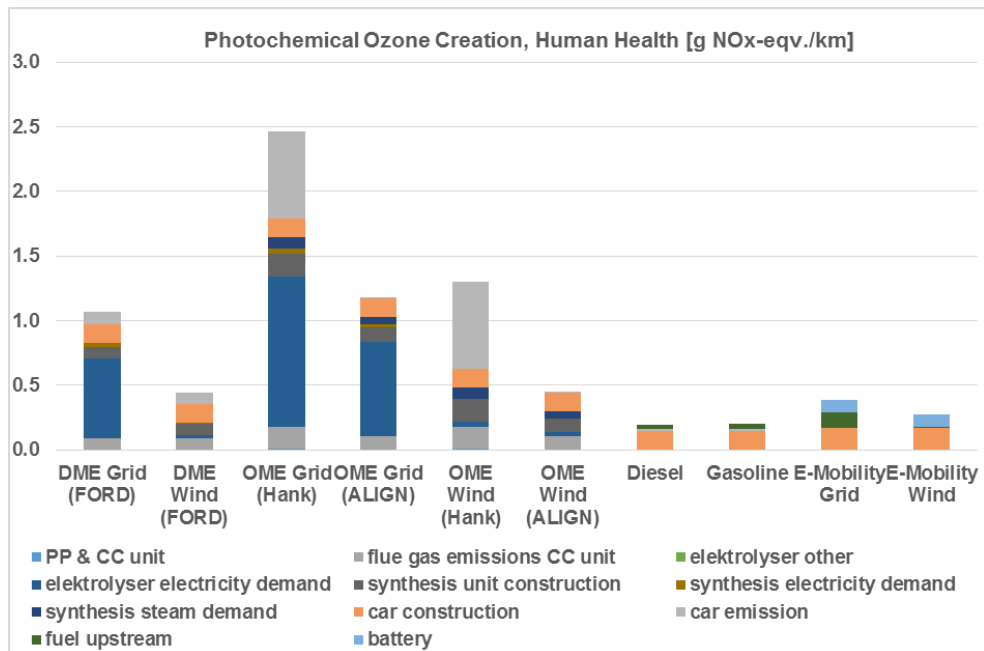


Abbildung 46: Sommersmogbildung, Human Health (POCP_h, g NO_x-Äqv./km) für das Mobilitätsszenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie, PP = power plant, CC = carbon capture.

Terrestrische Versauerung (Terrestrial Acidification Potential, AP)

Die terrestrische Versauerung (AP) wird hauptsächlich durch Ammoniak, Ammoniumverbindungen, Nitrat, NO_x, SO_x und Schwefelsäure verursacht. Betrachtet man die OME₃₋₅-Optionen in Abbildung 47, so lässt sich auch in dieser Kategorie ein Zusammenhang zwischen dem Verbrauch fossiler Energie und AP erkennen. Der hohe Strombedarf für beide OME₃₋₅-Grid-Fälle führt zu sehr hohen AP-Werten (2,02 g SO₂-Äqv./km OME-Grid (Hank) und 1,21 g SO₂-Äqv./km OME-Grid (ALIGN)). In den Fällen, die Daten von Hank et al. verwenden, ist die Belastung durch Rauchgasemissionen deutlich höher. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die SO_x-Emissionen geschätzt wurden, während keine Messdaten vom VKA vorlagen. Außerdem hat der höhere Brennstoffverbrauch von Hank et al. wiederum den Effekt höherer Emissionen der Vorketten. Zusätzlich ist für AP ein weiterer signifikanter Einfluss der für die E-Mobilität benötigten Batterie zu erkennen. Diese verursacht einen höheren AP-Wert für E-Mobilität im Vergleich zur heutigen konventionellen Technologie. OME Wind (ALIGN) zeigt ebenfalls niedrigere Werte als E-Mobilität, aber immer noch höher als die konventionellen Optionen.

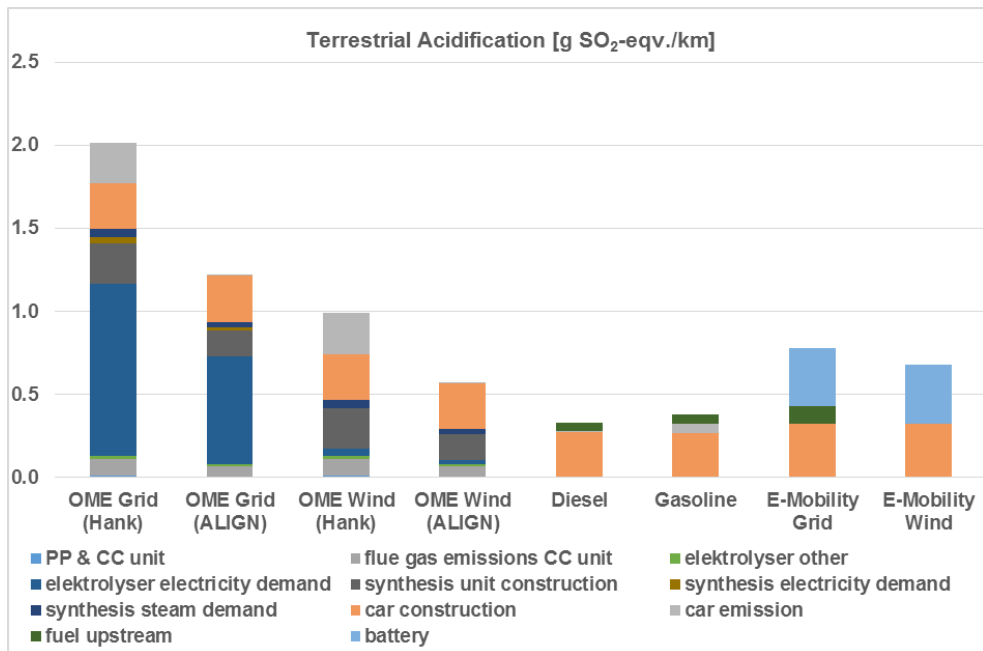


Abbildung 47: Terrestrische Versauerung, (AP, g SO₂-Äqv./km) für das Mobilitätsszenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese & E-Mobilität nur mit Windenergie PP = power plant, CC = carbon capture..

2.3.3.2 CCU-Peak-Power

Für das Peak Power Szenario wurden acht Optionen verglichen. Die folgenden Kapitel geben einen Überblick über die Ergebnisse für alle untersuchten Wirkungskategorien.

Treibhauspotenzial (Global Warming Potential, GWP)

Die GWP-Werte in Abbildung 48 zeigen den großen Einfluss der Stromquelle auf die DME-Synthese. Der zweithöchste Beitrag zum GWP resultiert aus dem Abgas des Peak Motors. GWP-Emissionen am Motor treten in allen DME-Optionen gleichermaßen auf. Die Einführung des AGR-Systems hat jedoch keinen Einfluss auf die GWP-Ergebnisse.

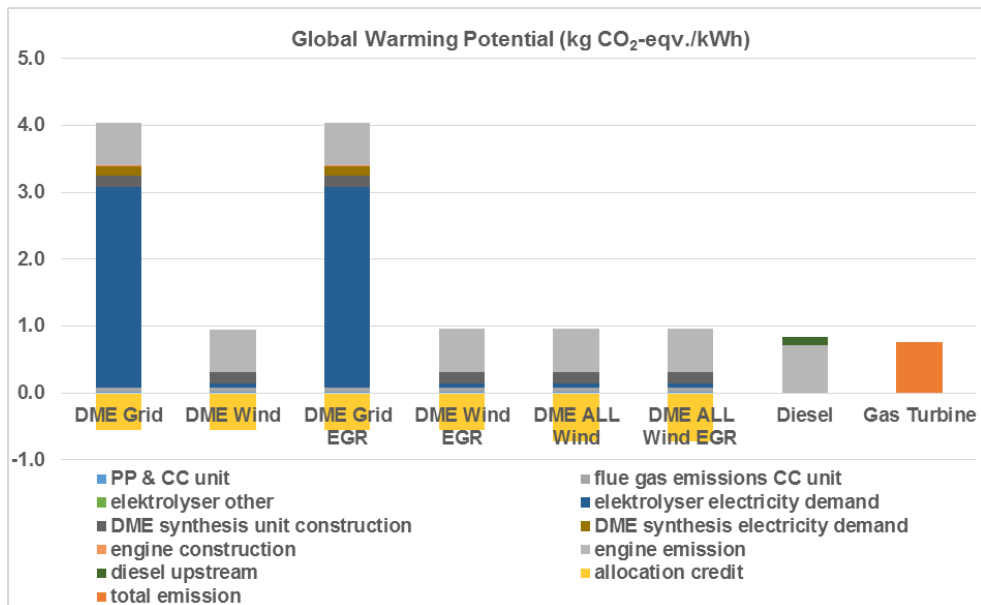


Abbildung 48: Treibhauspotential, (GWP, g CO₂-Äqv./kWh) für das Peak Power Szenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und CO₂ Abscheidung mit Windenergie; EGR = mit Abgasrückführung, PP = power plant, CC = carbon capture.

Bei Verwendung von Netzstrom liegen die Netto-GWP-Werte bei bis zu 4.03 kg CO₂-Äqv./kWh (DME Grid & DME Grid EGR) (Abbildung 49). Durch die Nutzung von Windstrom für die DME-Synthese kann dies deutlich auf 0,94 kg CO₂-Äqv./kWh (DME Wind, DME Wind EGR, DME ALL Wind & DME ALL Wind EGR) reduziert werden. Im Vergleich dazu erreichen die Benchmark-Technologien GWP-Werte von 0,83 kg CO₂-Äqv./kWh für den dieselbetriebenen Peak Motor und 0,76 kg CO₂-Äqv./kWh für eine Gasturbine. Alle DME Optionen mit Wind zeigen immer eine bessere Performance hinsichtlich GWP im Vergleich zu heutigen Technologien.

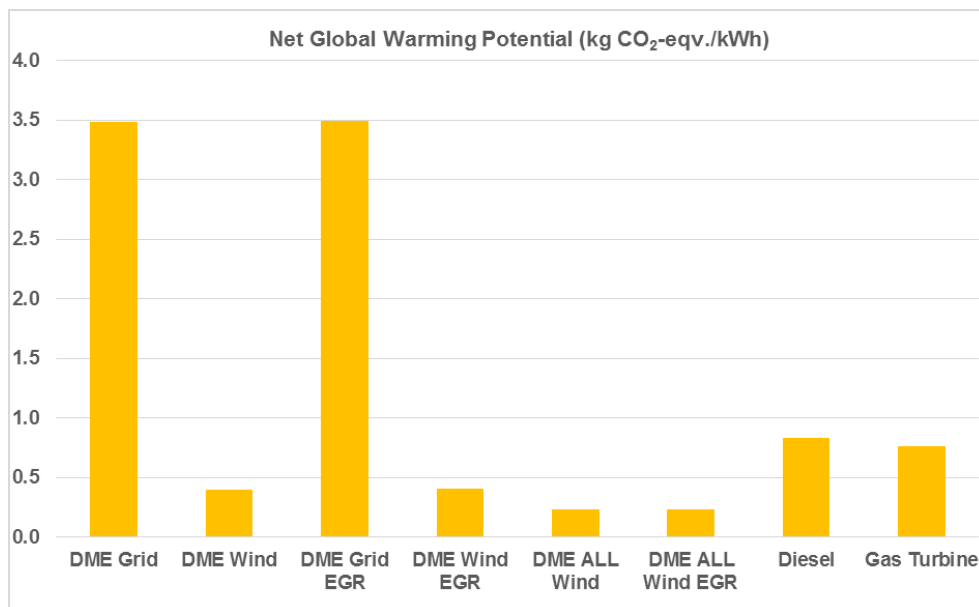


Abbildung 49: Netto-Treibhauspotential, (Net GWP, g CO₂-eqv./kWh) für das Peak Power Szenario.

Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und CO₂ Abscheidung mit Windenergie, EGR = mit Abgasrückführung.

Feinstaubbildung (Fine Particulate Matter Formation, PM)

Strom aus fossilen Quellen führt zu einer höheren PM-Belastung als erneuerbare Energie aus Wind (Abbildung 50). Außerdem hat der Bau der Syntheseanlage in allen Optionen, in denen DME eingesetzt wird, eine erhebliche Auswirkung. Dies ist auf die große Stahlmenge pro Einheit DME zurückzuführen, die im Demonstrationsmaßstab für die DME-Synthese eingesetzt wird. Direkte Emissionen am Peak Motor haben einen deutlichen Anteil am PM. Diese summieren sich auf 2,56 g PM-Äqv./kWh für den DME-Grid-Fall. Neben den eigentlichen Staub- und Partikelemissionen sind für die Kategorie PM auch NO_x- und SO_x-Emissionen relevant. Da die AGR zu einer signifikanten Reduzierung der NO_x-Emissionen führt, verringert sich PM im Vergleich zum Motorbetrieb ohne AGR erheblich (1,57 g PM-Äqv./kWh DME EGR; 0,70 g PM-Äqv./kWh DME Wind EGR & DME ALL Wind EGR). Eine Implementierung von AGR für den Dieselbetrieb wurde nicht in die Untersuchung einbezogen. Es ist wahrscheinlich, dass dies einen ähnlichen Effekt für die Diesel-Option haben würde.

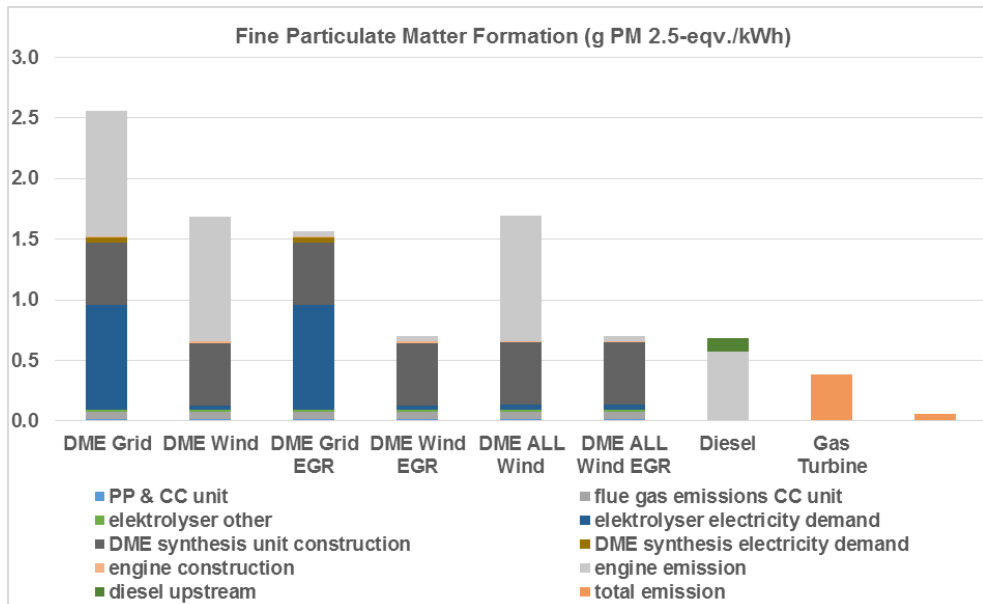


Abbildung 50: Feinstaubbildung (PM, g PM-Äqv./kWh) für das Peak Power Szenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und CO₂ Abscheidung mit Windenergie, EGR = mit Abgasrückführung, PP = power plant (PP), CC = carbon capture.

Erschöpfung fossiler Ressourcen (Fossil Depletion Potential, FDP)

Die Kategorie FDP ist stark mit der Nutzung fossiler Brennstoffe für die Stromerzeugung verbunden. Alle Optionen, die Windenergie nutzen, liegen im gleichen Bereich wie die Benchmark-Technologien (Abbildung 51). Das FDP von Diesel- und Gasturbinen-Peak Power summiert sich auf 247 g Öl-Äqv./kWh bzw. 324 g Öl-Äqv./kWh, während das FDP in den Fällen mit Windkraft zwischen 254 g Öl-Äqv./kWh (DME ALL Wind und DME ALL Wind EGR) und 252 g Öl-Äqv./kWh (DME Wind und DME Wind EGR) liegt. Die Nutzung von Netzstrom für die DME-Erzeugung führt zu sehr hohen FDP-Werten von 1.144 g Öl-Äqv./kWh.

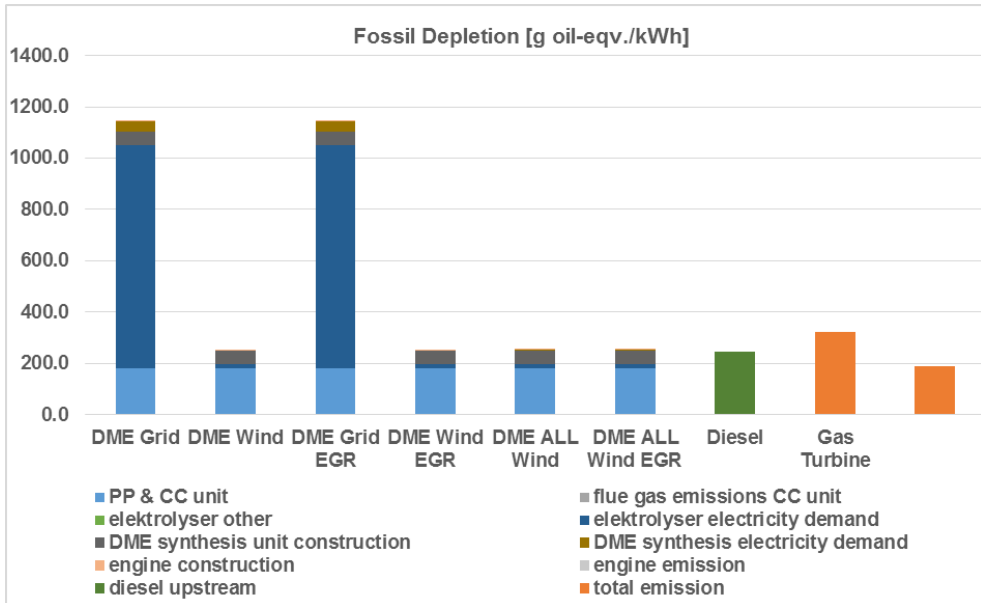


Abbildung 51: Erschöpfung fossiler Ressourcen (FDP, g Öl-Äqv./kWh) für das Peak Power Szenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und CO₂ Abscheidung mit Windenergie, EGR = mit Abgasrückführung, PP = power plant CC = carbon capture.

Sommersmogbildung, Ökosysteme (Photochemical Ozone Creation Potential, Ecosystems, POCP_e)

Die Kategorie Sommersmogbildung, Ökosysteme (POCP_e) wird in NO_x-Äquivalenten ausgedrückt, was bereits die Bedeutung der NO_x-Emissionen unterstreicht. Daher ist die Auswirkung der AGR-Implementierung auf die Ergebnisse offensichtlich, da ihr Ziel darin besteht, die NO_x-Emissionen deutlich zu reduzieren. Die NO_x-Emissionen am Peak Motor zusammen mit dem Netzstrom für die DME-Erzeugung haben den höchsten Einfluss auf das Ergebnis. Dies führt zu hohen POCP_e-Werten für die DME-Grid-Option (13,70 g NO_x-Äqv./kWh), zu leicht reduzierten Werten bei der Nutzung von Windstrom (DME Wind: 10,49 g NO_x-Äqv./kWh & DME ALL Wind), zu deutlich geringeren Werten für DME Grid mit EGR (4,64 g NO_x-Äqv./kWh) und zu sehr geringen POCP_e-Werten für DME mit Windkraft und EGR (Wind & ALL Wind: 1,47 g NO_x-Äqv./kWh). Beide Benchmark-Technologien haben höhere POCP_e-Werte (Diesel: 5,42 g NO_x-Äqv./kWh; Gasturbine: 2,48 g NO_x-Äqv./kWh) als DME Wind und EGR. Diesel zeigt sogar höhere POCP_e-Werte als DME Grid und EGR, wobei die AGR-Implementierung für die Diesel-Option hier nicht berücksichtigt wurde. (Abbildung 52).

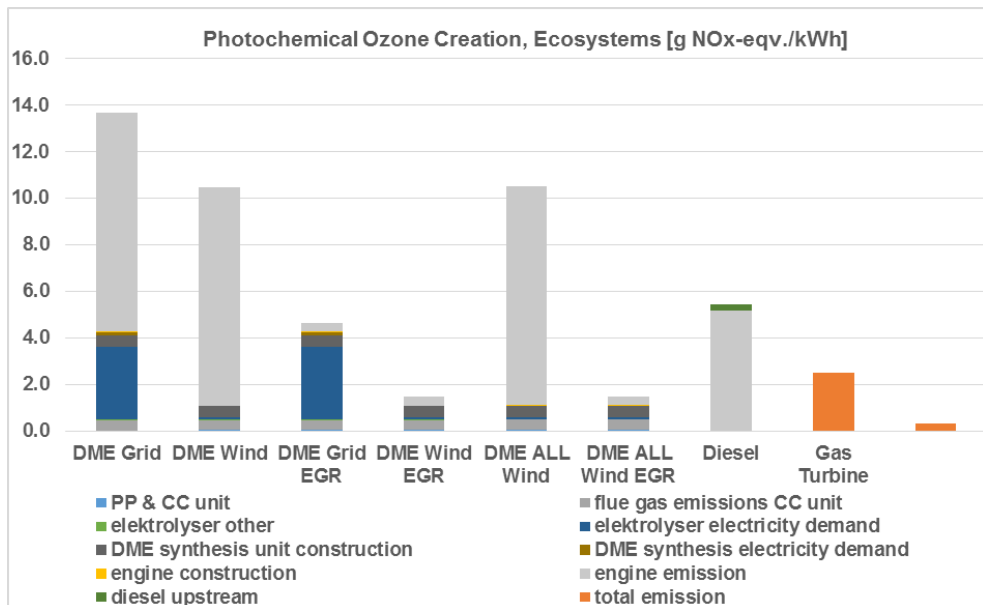


Abbildung 52: Sommersmogbildung, Ökosysteme (POCP_e, g NO_x-Äqv./kWh) für das Peak Power Szenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und CO₂ Abscheidung mit Windenergie, EGR = mit Abgasrückführung, PP = power plant, CC = carbon capture.

Sommersmogbildung, Human Health (Photochemical Ozone Creation Potential, Human Health, POCP_h)

Die POCP_h-Ergebnisse werden ebenfalls in NO_x-Äquivalenten gemessen und ähneln denen von POCP_e. Auch hier haben die NO_x-Emissionen am Peak Motor zusammen mit dem Netzstrom für die DME-Erzeugung den höchsten Einfluss auf das Ergebnis (Abbildung 53). Dies führt zu hohen POCP_h-Werten für die DME-Grid-Option (13,60 g NO_x-Äqv./kWh), zu leicht reduzierten Werten bei der Nutzung von Windstrom (DME Wind & DME ALL Wind: 10,47 g NO_x-Äqv./kWh), zu deutlich geringeren Werten für DME Grid mit EGR (4,60 g NO_x-Äqv./kWh) und zu sehr geringen POCP_h-Werten für DME mit Windkraft und EGR (Wind & ALL Wind: 1,45 g NO_x-Äqv./kWh). Beide Benchmark-Technologien haben höhere POCP_h-Werte (Diesel: 5,41 g NO_x-Äqv./kWh; Gasturbine: 2,45 g NO_x-Äqv./kWh), obwohl auch hier die fehlende AGR-Implementierung für die Diesel-Option berücksichtigt werden muss.

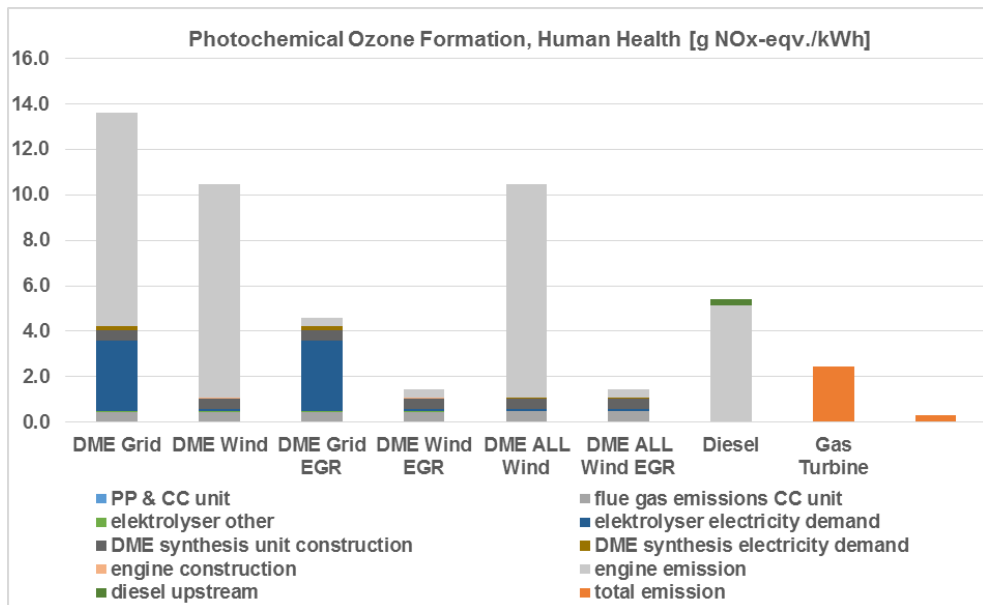


Abbildung 53: Sommersmogbildung, Human Health (POCP_h, g NO_x-Äqv./kWh) für das Peak Power Szenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und CO₂ Abscheidung mit Windenergie, EGR = mit Abgasrückführung, PP = power plant, CC = carbon capture.

Terrestrische Versauerung (Terrestrial Acidification Potential, AP)

Terrestrische Versauerung (AP) zeigt eine ähnliche Verteilung wie POCP_e und POCP_h. Auch hier haben sowohl Motoremissionen ohne AGR als auch fossiler Strom für die DME-Erzeugung den größten Einfluss. Obwohl die SO₂-Emissionen nicht als Motoremissionen gemessen wurden und somit nicht berücksichtigt werden können, haben die NO_x-Emissionen, die auch AP-wirksam sind, einen beträchtlichen Einfluss. Bei der Betrachtung von Abbildung 54 fällt auf, dass auch der Bau der DME-Syntheseanlage einen Einfluss auf AP hat. Dies ist auf die große Stahlmenge zurückzuführen, die pro erzeugter DME-Einheit aufgrund der Demonstrationsgröße der Anlage verwendet wird. Insgesamt sind die höchsten AP-Werte für den Fall DME Grid (7,31 g SO₂-Äqv./kWh) zu sehen, gefolgt von DME Wind & DME ALL Wind (4,52 g SO₂-Äqv./kWh). DME EGR (4,07 g SO₂-Äqv./kWh) ist immer noch relativ hoch, aber für DME Wind EGR & DME ALL Wind EGR (1,28 g SO₂-Äqv./kWh) ist AP etwas geringer als bei der Benchmark-Technologie Diesel (2,20 g SO₂-Äqv./kWh) und gleich der etwa Gasturbine (1,23 g SO₂-Äqv./kWh). Auch hier muss die fehlende AGR-Implementierung für die Dieseloption berücksichtigt werden.

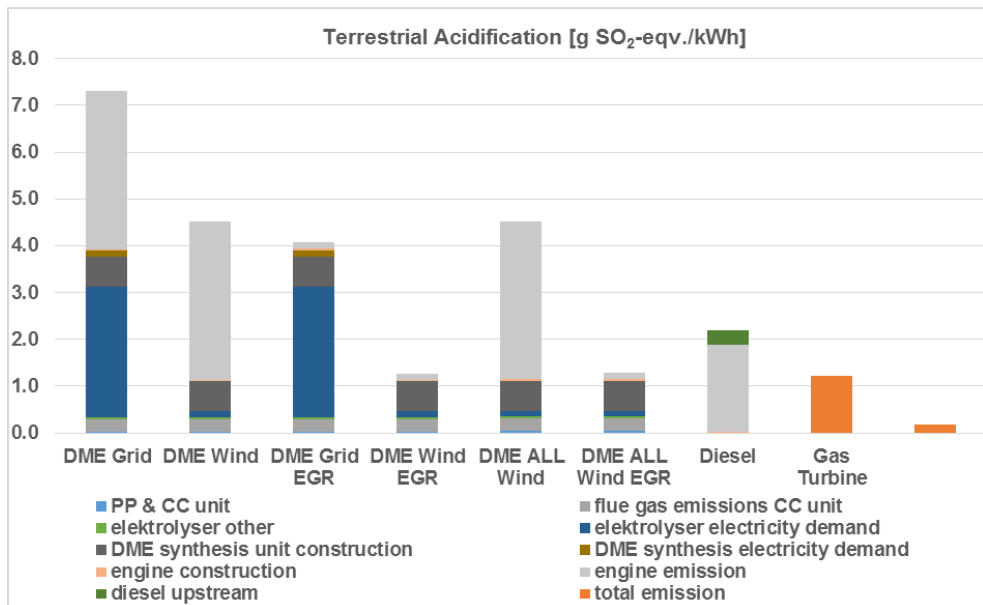


Abbildung 54: Terrestrische Versauerung (AP, g SO₂-Äqv./kWh) für das Peak Power Szenario, aufgeteilt in spezifische Beiträge entlang der Prozesskette. Abkürzungen: Grid = Strombereitstellung für Kraftstoffsynthese mit dem heutigen Netzstrommix in Deutschland (2016), Wind = Synthese mit Windenergie, ALL Wind = Synthese und CO₂ Abscheidung mit Windenergie, EGR = mit Abgasrückführung, PP = power plant, CC = carbon capture.

2.3.4 Schlussfolgerung der ökologischen Bewertung des Demonstrators

Aus den in der vorliegenden LCA gewonnenen Ergebnissen können mehrere Schlussfolgerungen gezogen werden. Erstens schneidet OME₃₋₅ als CCU-Kraftstoff aus Sicht des Lebenszyklus an dieser Stelle schlecht ab. Die sehr energieintensive Synthese von OME₃₋₅ führt zu sehr hohen Umweltauswirkungen, selbst wenn erneuerbarer Strom für die Wasserstoffherzeugung und andere Syntheseprozesse verwendet wird.

Die Ergebnisse bezüglich DME zeichnen ein anderes Bild. Die Implementierung von CCU mit DME in den heutigen Energiemix und die Verwendung von Netzstrom für die Syntheseprozesse führt zu sehr hohen Auswirkungen für die CCU-Produkte. Wenn nur erneuerbare Energien für die Syntheseprozesse verwendet werden (in dieser Untersuchung Windstrom), kann das CCU-Produkt Wirkungen erreichen, die niedriger sind als die der Benchmark-Technologien. Der Nachteil ist der sehr große Stromeinsatz. Es werden 5,5 kWh erneuerbarer Strom benötigt, um 1 kWh Spitzenstrom zu erzeugen. Ebenso verbraucht das Fahren von 1 km mit DME 1-1,08 kWh erneuerbaren Strom, was 5-6 mal so viel ist wie für die E-Mobilität. In einem Szenario, in dem Strom ausschließlich aus erneuerbaren Energien gewonnen wird und gleichzeitig ein konstanter Bedarf an z. B. Kraftstoffen für den Verkehr besteht, muss zwangsläufig eine zuverlässige und effiziente Speicherlösung etabliert werden. CCU-Kraftstoffe wie DME können aufgrund der Sektorkopplungsvorteile für Energie und Verkehr eine Gesamtlösung darstellen.

Der Nachweis der Funktionsfähigkeit mit dem Demonstrator ist ein erster Schritt, um reale Prozessdaten für die weitere Diskussion zu nutzen. Die Identifizierung von Hot Spots und Verbesserungspotenzialen innerhalb der CCU-Route, aber auch die Diskussion von Verbesserungspotenzialen unterstützt die Entwicklung von CCU-Technologien.

2.4 Industriecluster NRW

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse des Arbeitspaketes 5.3 vorgestellt. Zunächst wird die Datenrecherche hinsichtlich der industriellen CO₂-Quellen (Abschnitt 2.4.1) und H₂-Quellen (Abschnitt 2.4.1) präsentiert. Es folgen zwei Abschätzungen für den DME-Bedarf, welche sich in ihrer Methodik unterscheiden (Abschnitt 2.4.2). Anschließend werden mögliche CCU-Systeme vorgestellt (Abschnitt 2.4.3), sowie die Methodik und Systembeschreibung der analysierten Systeme (Abschnitt 2.4.4 und 2.4.5). Die entwickelten Systeme wurden mit techno-ökonomischen Parametern beschrieben und mit Randbedingungen versehen, welche in Abschnitt 2.4.6 vorgestellt werden. Die Ergebnisse für verschiedenen CCU-Systeme sind in Abschnitt 2.4.7 und 2.4.8 zu finden. In Abschnitt 2.4.9 werden sie mit den techno-ökonomischen Analysen aus dem Arbeitspaket 4 verglichen. Hier findet sich auch eine detaillierte Auflistung der unterschiedlichen Analyseansätze und damit verbundenen Annahmen zwischen den Arbeitspaketen. Zuletzt werden die Ergebnisse in Abschnitt 2.4.10 diskutiert.

2.4.1 Industrielle CO₂-Quellen

Zuerst sind Daten zu industriellen CO₂-Quellen recherchiert und zusammengestellt worden. In dem Deliverable 5.3.1 wurde eine Datenbank mit detaillierten Informationen zu den gesammelten CO₂-Quellen in Nordrhein-Westfalen entwickelt. Die CO₂-Quellen sind in acht Industriezweige unterteilt worden:

- Aluminiumherstellung
- Zement- und Kalkproduktion
- Eisen- und Stahlerzeugung
- Papier- und Holzgewerbe
- Raffinerien
- Abfallbehandlung und -verbrennung
- Glasherstellung
- Chemische Industrie

Zusätzlich sind auch die CO₂-Quellen aus der Stromerzeugung enthalten.

Die Klassifizierung basiert auf dem NACE-Code, der den Standard für die Klassifizierung von Industrien nach ihrer wirtschaftlichen Haupttätigkeit darstellt. Datengrundlage ist die Datenbank E-PRTR (European Pollutant Release and Transfer Register) der Europäischen Umweltagentur, in der alle berichtspflichtigen Industrieanlagen innerhalb der Europäischen Union erfasst sind [117]. Dementsprechend listet sie alle Industrieanlagen mit CO₂-Emissionen von 100 kt oder mehr pro Jahr auf. Um die vielfältigen Daten so zu filtern, dass nur Anlagen in Nordrhein-Westfalen gelistet werden, wurde jeder in Deutschland gefundene Eintrag mit der entsprechenden Postleitzahl verglichen. Liegt die Postleitzahl innerhalb Nordrhein-Westfalens, wird der Eintrag übernommen. Hierfür wurde ein spezielles Python-Skript geschrieben und angewendet. Insgesamt wurden für Nordrhein-Westfalen im Jahr 2016 118 Quellen gefunden, die räumliche Verteilung der industriellen Kohlendioxidquellen ist in Abbildung 55 dargestellt.

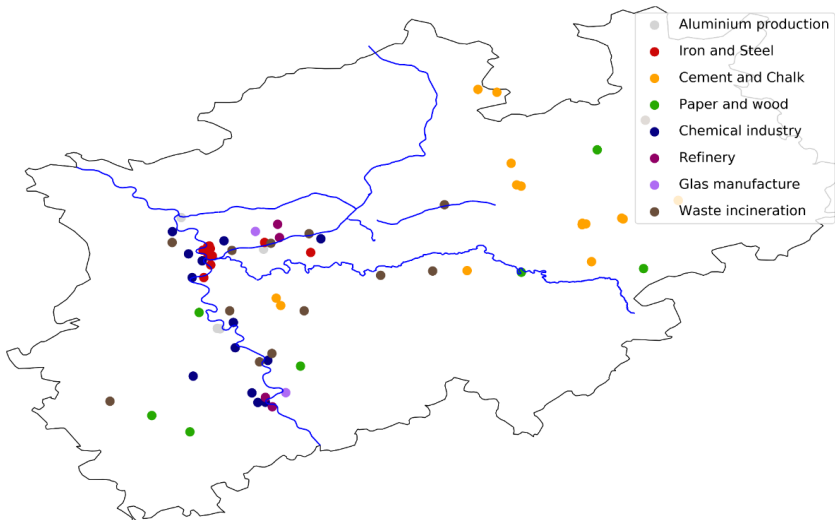


Abbildung 55: Räumliche Verteilung der Kohlenstoffdioxid-Quellen in Nordrhein-Westfalen. Die Farben geben jeweils den Industriezweig nach NACE-Klassifizierung an, eigene Darstellung basierend auf Bericht der Europäischen Umweltagentur [117].

Für eine detaillierte Analyse wurden auch Daten über mögliche weitere emittierte Stoffe gesammelt (potenzielle Verunreinigungen). Nachfolgend werden zwei Analysebeispiele gezeigt. Sie dienen im Projekt als Diskussionsgrundlage und sind ein wesentlicher Parameter für die Bewertung und Auswahl möglicher CO₂-Quellen. Ein Beispiel zur Auswertung der potenziellen Verunreinigungen ist in Abbildung 56 gegeben. Dies betrifft konkret ein Stahlwerk, alle dokumentierten Verunreinigungen sind auf den CO₂-Ausstoß normiert. Diese Analyse wurde für jede einzelne CO₂-Quelle in Nordrhein-Westfalen angefertigt.

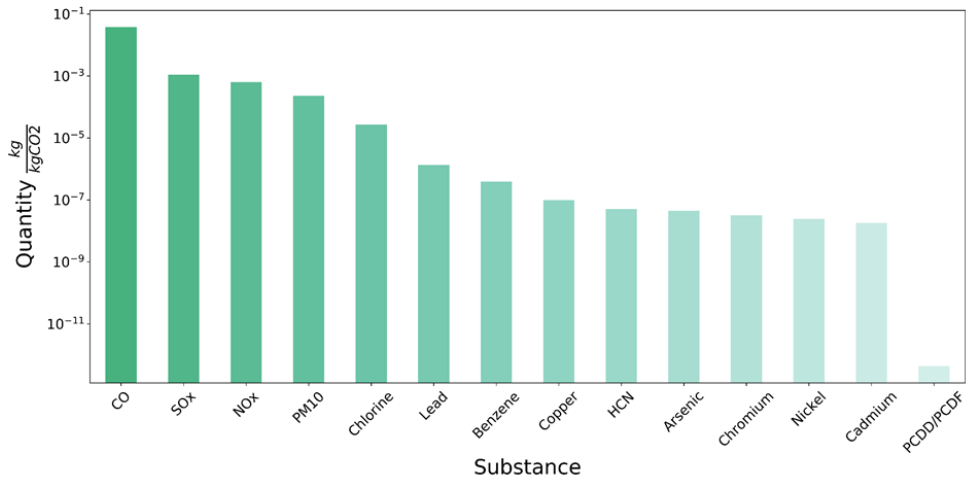


Abbildung 56: Analysebeispiel potenzieller Verunreinigungen am Beispiel eines Stahlwerkes

Eine weitere Analysemöglichkeit der potenziellen Verunreinigungen besteht darin, verschiedene CO₂-Emittenten aus der gleichen Industrie hinsichtlich einer einzelnen Verunreinigung zu vergleichen. Dies ist in Abbildung 57 für Müllverbrennungsanlagen in Nordrhein-Westfalen dargestellt. Auf der linken Seite sind die absoluten Stickoxid-Emissionen aufgelistet, dabei gibt jeder Balken eine Quelle an. Auf der rechten Seite werden die auf den CO₂-Ausstoß normierten Stickoxid-Emissionen gezeigt.

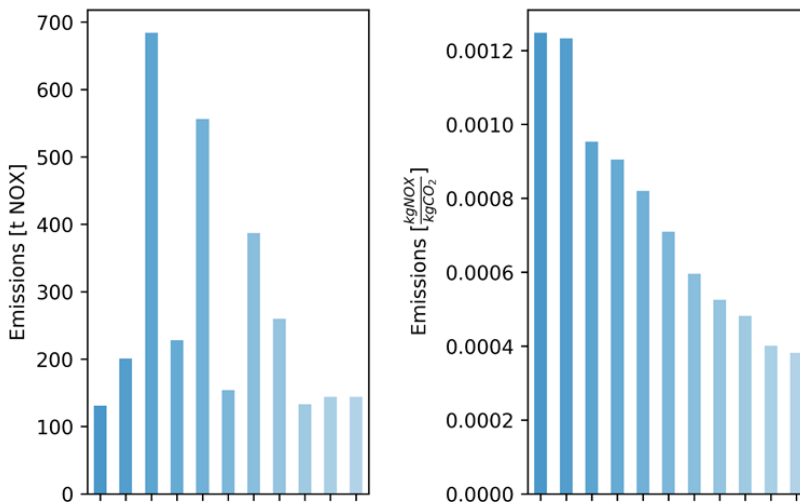


Abbildung 57: Vergleich des absoluten Stickoxid-Ausstoßes (links) und des auf den CO₂-Ausstoß normierten Stickoxid-Ausstoßes (rechts) der dokumentierten Müllverbrennungsanlagen (pro Anlage ein Balken, x-Achse) in Nordrhein-Westfalen

Das Thema Verunreinigungen ist für die Auswahl einer konkreten Quelle sehr wichtig, jedoch können keine generellen Anforderungen an potenzielle CO₂-Quellen formuliert werden. Dies ist im Einzelfall von vielen Parametern abhängig, wie zum Beispiel den verwendeten Katalysatormaterialien und Produktanforderungen.

In einem weiteren Schritt wurden nicht vermeidbare, prozessbedingte CO₂-Emissionen aus der E-PRTR Datenbank abgeschätzt. Tabelle 24 gibt eine Übersicht und Beschreibung der Spalten, die für die Auswertung herangezogen wurden.

Tabelle 24: Übersicht über die Spalten der E-PRTR Datenbank inklusive einer kurzen Beschreibung

Spalte	Beschreibung
FacilityReportID	Dies ist die eindeutige Identifikationsnummer, mit welcher der Originaleintrag in der Datenbank gefunden werden kann.
FacilityName	Anlagenname.
StreetName	Straße.
BuildingNumber	Hausnummer.
City	Stadt.

PostalCode	Postleitzahl.
Lat	Latitude.
Long	Longitude.
NACEMainEconomicActivityCode	Der kurze NACE-Code. Die Identifikation für jeden Code ist separat aufgeführt.
PollutantCode	Kurzbezeichnung der Substanz. In dieser Datenbank werden nur CO ₂ -Quellen aufgeführt, somit ist die Kurzbezeichnung in jedem Fall CO ₂ .
MethodBasisName	Gibt die Methodik zur Ermittlung der Daten an (gemessen oder berechnet).
TotalQuantity [kt]	Jahressumme in Kilotonnen.
Emissionfactor	Gibt eine grobe Abschätzung des prozessbedingten Anteils an.
Process-related Quantity [kt]	Gibt eine grobe Abschätzung der prozessbedingten CO ₂ Emissionen an. Dieser Wert kann als Anhaltspunkt des Mengenpotentials in einem vollständig dekarbonisiertem Energiesystem genutzt werden.
ReportingYear	Das Jahr, in welchem die Emissionen ausgestoßen wurden.
Industry	Gibt die Industriezugehörigkeit nach NACE-Klassifizierung an.

Prozessbedingt ist der Anteil des insgesamt emittierten Kohlenstoffdioxids, der nicht aus der Verbrennung fossiler Brennstoffe stammt, sondern prozessbedingt unvermeidbar ist. Somit kann diese CO₂-Menge nicht durch eine Erhöhung des Anteils erneuerbarer Energien im Energiesystem verringert werden. Die verwendeten Emissionsfaktoren zur Berechnung des prozessbedingten Anteils basieren auf einer Literaturrecherche zu emittierten prozessbedingten CO₂-Emissionen der betrachteten Industrien und sind als Näherungswerte zu verstehen. Die genauen Werte variieren von Standort zu Standort und hängen von vielen weiteren Parametern ab. Insbesondere in der chemischen Industrie kann es zu höheren Abweichungen kommen, da in dieser Industrieklasse eine große Anzahl von sehr unterschiedlichen Prozessen zusammengefasst ist. Dennoch können die berechneten Faktoren als Abschätzung für das Mengenpotenzial dienen. Die verwendeten Emissionsfaktoren sind in Tabelle 25 zusammengefasst.

Tabelle 25: Abgeschätzte Emissionsfaktoren für die verschiedenen Industriezweige

Industriezweig	Emissionsfaktor
Eisen- und Stahlerzeugung	0,40
Zement- und Kalkproduktion	0,60
Chemische Industrie	0,27
Abfallbehandlung und -verbrennung	1,00
Aluminiumherstellung	1,00
Glasherstellung	0,58
Papier- und Holzgewerbe	0,00
Stromerzeugung	0,00

Da die Originaldaten alle Emissionen ab 2007 dokumentieren, ist es möglich, eine Entwicklung des emittierten Kohlendioxids nach Industriezweig zu zeigen. Diese ist in Abbildung 58 dargestellt.

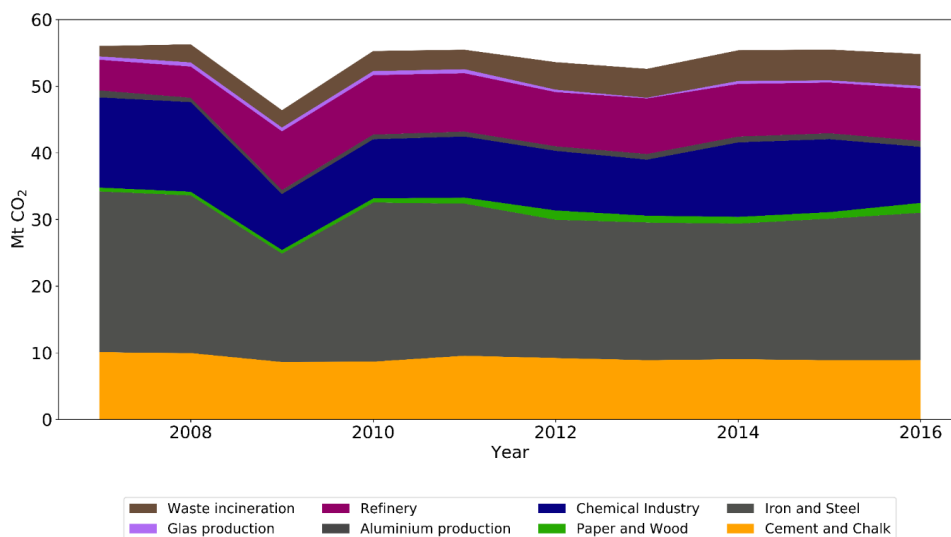


Abbildung 58: Entwicklung der absoluten Kohlenstoffdioxidemissionen in Nordrhein-Westfalen nach Industriezweig

Neben einer gewissen Kontinuität (mit Ausnahme des Einbruchs, vor allem in der Eisen- und Stahlerzeugung, aufgrund der Weltwirtschaftskrise im Jahr 2009) zeigt Abbildung 58 auch die Anteile der verschiedenen Industriezweige.

Da die Daten immer als Jahressummen angegeben werden, ist es nicht möglich, Rückschlüsse auf das Jahreslastprofil zu ziehen. Wenn dies für die Entwicklung von Fallstudien relevant sein soll, müssen konkrete Lastprofile der verschiedenen Branchen, oder im Speziellen der verschiedenen Standorte, ermittelt werden. Die Lastprofile können je nach Standort und Branche stark variieren, so dass eine mögliche CO₂-Zwischenspeicherung erforderlich sein könnte. Die Dimensionierung eines möglichen Zwischenspeichers hängt von dem Lastprofil des betrachteten Emittenten und der Betriebsweise der Syntheseanlage ab.

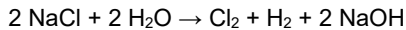
2.4.1 Industrielle H₂-Quellen

Die Recherche nach vorhandenen Wasserstoffquellen in Nordrhein-Westfalen hat gezeigt, dass sich die Datenlage als schwierig und möglicherweise unvollständig erweist. Im Zuge der Recherchen war eine umfangreiche Korrespondenz mit Experten und Wissenschaftlern notwendig, die sich mit ähnlichen Fragestellungen beschäftigt haben oder an verwandten Forschungsprojekten beteiligt waren. Sogenannter Überschusswasserstoff (damit ist Wasserstoff gemeint, der als Nebenprodukt anfällt, aber nicht genutzt wird und somit ungenutztes Potenzial darstellt) ist kaum vorhanden. In der Chlor-Alkali-Industrie wird Wasserstoff teilweise noch in die Atmosphäre freigesetzt, allerdings in kleineren Mengen. Diese Mengen können sich auf 31 kt - 80 kt pro Jahr summieren [118, 119]. Tabelle 26 gibt eine Übersicht über die Produktionsstandorte der industriellen Chlor-Produktion in Nordrhein-Westfalen sowie der korrespondierenden Wasserstoffmenge nach Eurochlor [120].

Tabelle 26: Produktionsstandort für industrielle Chlor-Produktion in Nordrhein-Westfalen sowie die korrespondierende Wasserstoffmenge (nach Eurochlor [120]).

Standort	Firma	Chlor Produktionsmenge [kt/a]	Korrespondierende Wasserstoffmenge [kt/a]
Dormagen	Covestro	480	13,52
Frankfurt	Akzo Nobel	283	7,97
Ibbenbüren	Akzo Nobel	125	3,52
Köln Hürth	Vinnolit	250	7,04
Leverkusen	Covestro	390	10,99
Lülsdorf	Evonik	137	3,86
Marl	Vestolit GmbH	260	7,32
Rheinberg	INOVYN	220	6,20
Uerdingen	Covestro	260	7,32

Die korrespondierende Wasserstoffmenge wurde mit der folgenden Reaktionsgleichung berechnet:



Nach dieser Gleichung und unter Berücksichtigung der entsprechenden molaren Massen entstehen für jedes Gramm Chlor ca. 0,028 g Wasserstoff. Daraus ergibt sich für das Jahr 2016 eine Menge von 67,75 kt Wasserstoff im Cluster Nordrhein-Westfalen. Die berechnete Menge entspricht der in der Literatur gefundenen Bandbreite und kann daher als realistisch eingestuft werden. Allerdings bleiben einige Dinge unklar, z. B. wie viel des produzierten Wasserstoffs tatsächlich in die Atmosphäre abgegeben wird und welcher Anteil möglicherweise vor Ort verwertet wird. Außerdem ist die obige Auflistung nicht unbedingt vollständig und die Reinheit des abgegebenen Wasserstoffs ist nicht bekannt, so dass keine Aussage über den möglichen verfahrenstechnischen Aufwand und Energieeinsatz für die notwendige Reinigung des Wasserstoffs getroffen werden kann. Dennoch können mit diesen Größen erste Abschätzungen über das mögliche CO₂-Nutzungspotenzial getroffen werden.

Zusätzlich zu den hier vorgestellten Daten kann der Wasserstoff auch aus der Elektrolyse produziert werden. Dieser ist erneuerbar, wenn der für den Elektrolyseur verwendete Strom aus erneuerbaren Quellen, wie Wind und Photovoltaik, stammt. Zu diesem Zweck wurde die räumliche Verteilung der installierten Kapazitäten aus Wind und Photovoltaik erfasst, wie in Abbildung 59 und Abbildung 60 dargestellt. Die notwendigen Daten stammen von der „Open Power System Data“ Plattform [121].

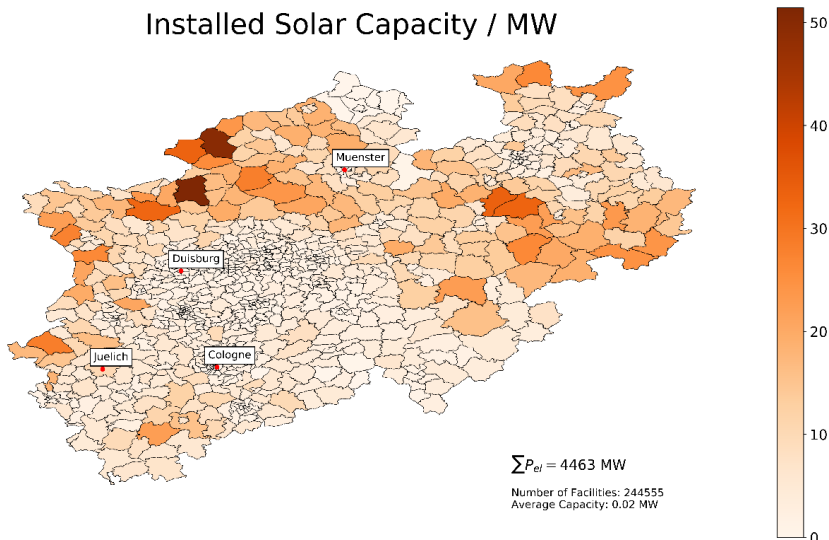


Abbildung 59: Räumliche Aufteilung der installierter Photovoltaik-Kapazität in Nordrhein-Westfalen

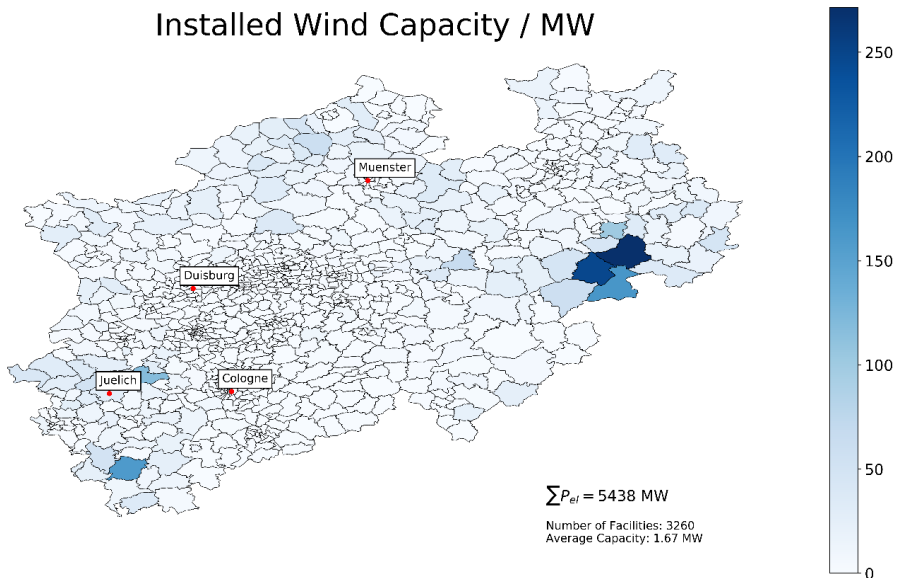


Abbildung 60: Räumliche Aufteilung der installierten Wind-Kapazität in Nordrhein-Westfalen

2.4.2 Zukünftiger Bedarf an DME

DME für Spitzenlasterzeugung

Spitzenlasterzeugung ist eine kurzfristige hohe Stromeinspeisung aufgrund einer kurzfristig hohen Nachfrage nach Strom. Es gibt jedoch keine klare Definition des Lastniveaus, das als Spitzenlast angesehen wird. Daher ist es sinnvoll, Stromlastzeitreihen zu analysieren, um Spitzenlastmengen in Abhängigkeit von verschiedenen Grenzwerten zu bestimmen. Abbildung 61 zeigt die Stromlastkurve für vier Wochen aus dem Jahr 2015 für Deutschland. Definiert man nun einen Grenzwert, ab welchem die Last als Spitzenlast gilt, können für jeden Tag bestimmte Anteile an der Stromerzeugung als Spitzenlast berechnet werden. Dies ist in Abbildung 62 für einen 95%igen Grenzwert angegeben. Summiert man diese Teilmengen der Spitzenlasterzeugung auf, erhält man für das 95%-Niveau eine Strommenge als Jahressumme, welche als Spitzenlast nach der obigen Definition gelten kann.

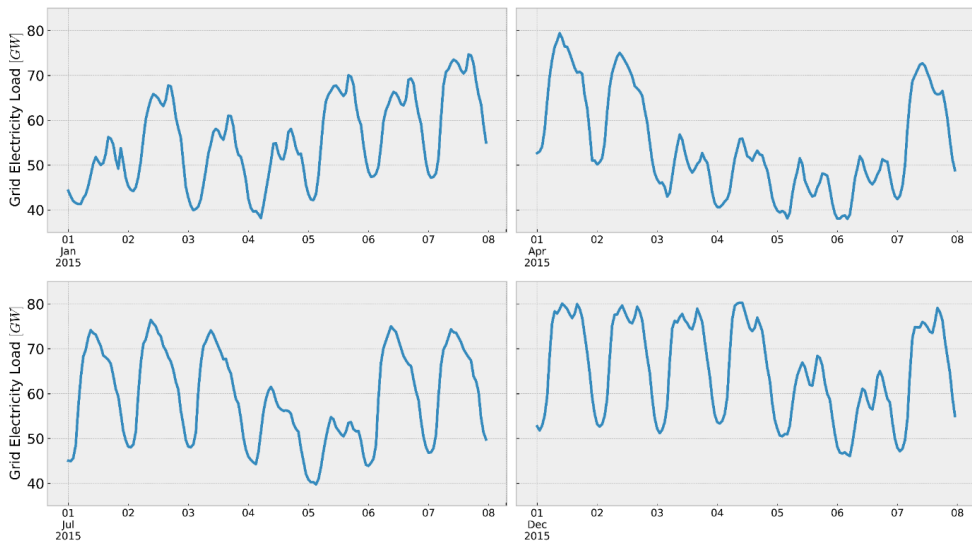


Abbildung 61: Stromlast-Zeitreihe für vier Wochen in Deutschland aus dem Jahr 2015

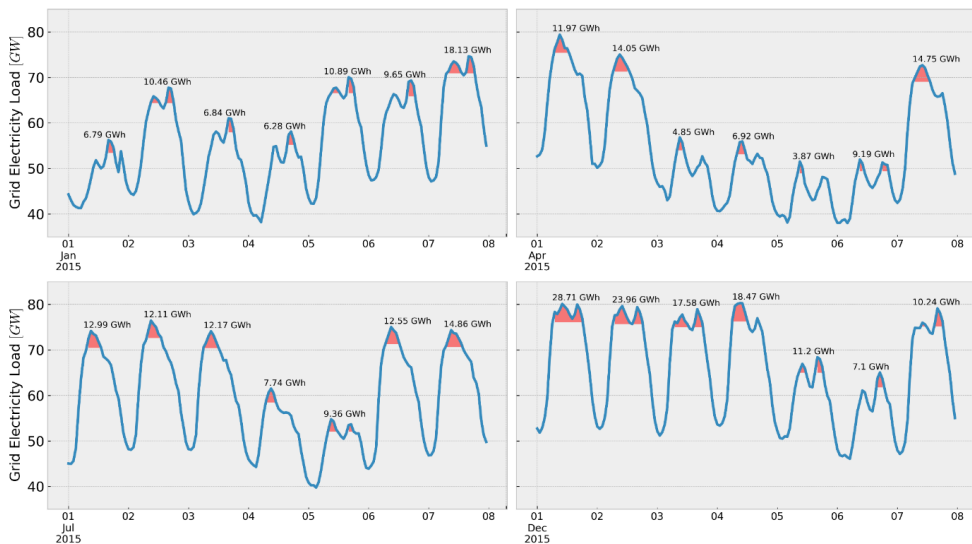


Abbildung 62: Stromlast-Zeitreihe für vier Wochen in Deutschland aus dem Jahr 2015 (farbliche Markierung potenzieller Spitzenlast auf einem 95%-Niveau)

Da die Analyse für Nordrhein-Westfalen durchgeführt wurde, die zugrundeliegenden Lastzeitreihen aber auf Länderbasis angegeben werden, muss zunächst der ungefähre Anteil der Stromnachfrage aus Nordrhein-Westfalen an der gesamten deutschen Stromnachfrage ermittelt werden. Im Jahr 2015 lag dieser bei ca. 23 % (eigene Berechnung auf Basis von EEA und Eurostat [122, 123]). Für die folgenden Berechnungen wurde eine Zeitreihenanalyse der

deutschen Stromlast für das Jahr 2015 durchgeführt (8760 Stunden als Zeitschritte). Stromlast-Zeitreihen haben bestimmte Eigenschaften. So gibt es in Deutschland typischerweise zwei Spitzen pro Tag, die meist zwischen den Mittags- und Abendstunden auftreten. Außerdem ist die Last an Wochenenden typischerweise niedriger als an Wochentagen. Auch saisonale Schwankungen sind zu beobachten, ebenso wie Abhängigkeiten von Feiertagen. Daher ist es sinnvoll, jeden Tag einzeln zu analysieren, um die gesamte Jahresspitzenlastmenge zu quantifizieren. Eine tagesspezifische Analyse führt zu der Definition, dass jeder 24-Stunden-Tag mindestens eine Periode (in stündlicher Auflösung) hat, in der eine Spitzenlast auftritt. Die Menge der täglichen Spitzenlast wird für die folgende Analyse in Abhängigkeit vom Anteil der tagesbezogenen maximalen Spitzenlast (von 90 % bis 99,95 %) berechnet. Jede Tagesspitzenlast-Energiemenge wird aufsummiert und ergibt die Gesamtspitzenlast-Energiemenge in Abhängigkeit vom Tagesmaximallast-Schwellenwert, wie in Abbildung 63 dargestellt.

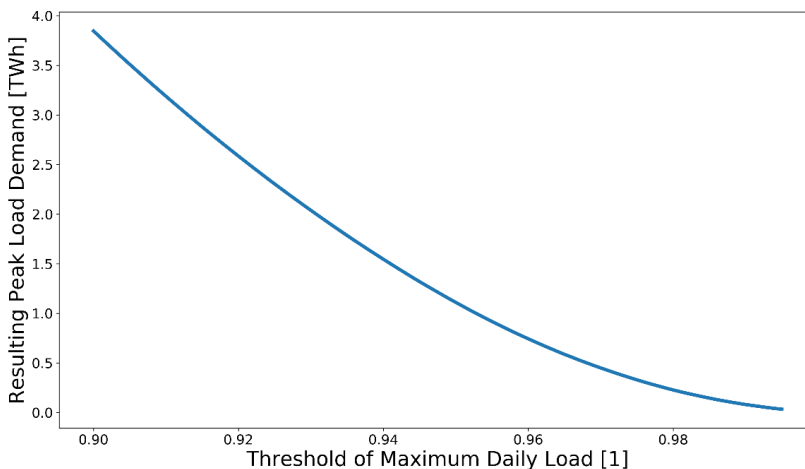
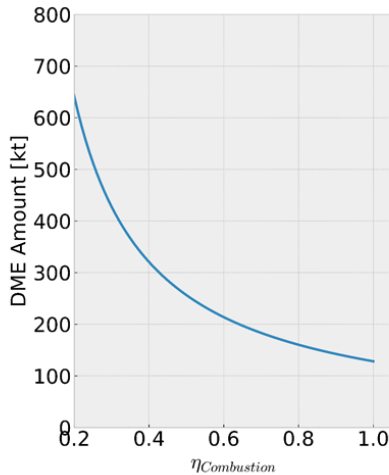


Abbildung 63: Bedarf an Spitzenlasterzeugung in Nordrhein-Westfalen in Abhängigkeit des Tagesspitzenlast-Schwellenwertes

Hieraus kann der Bedarf an DME ermittelt werden, welcher genau für die Spitzenlasterzeugung eingesetzt werden kann. Dieser ist wiederum abhängig vom Wirkungsgrad des Verbrennungsprozesses. Aus der DME-Menge kann dann eine CO₂-Menge abgeschätzt werden, welche für die DME-Synthese notwendig ist. Die folgende Abbildung 64 gibt dies beispielhaft für die Strommenge von 1 TWh an.

DME amount as a function of combustion efficiency
For the generation of 1 TWh electricity



CO₂ demand necessary for DME-Synthesis

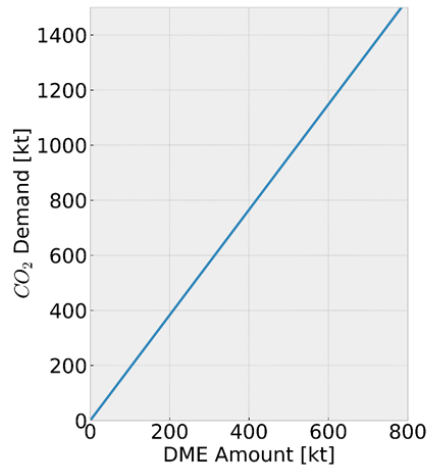


Abbildung 64: DME-Menge als Funktion des Verbrennungsprozesses für die Erzeugung 1 TWh Strom (links) sowie der Zusammenhang zwischen DME-Menge und notwendigen CO₂-Mengen für die DME-Synthese (rechts)

Ein weiterer Ansatz zur Ermittlung zukünftiger DME-Bedarfe ist ein Top-Down-Ansatz, wie von dem Projektpartner Imperial College London durchgeführt (vgl. Abschnitt 1.5.20). Dieser wird hier kurz erläutert. Die Analyse basiert auf der Grundlage eines Berichts der ewi Energy Research & Scenarios GmbH [124]. In dem Bericht wird der PtF-Bedarf bis 2050 abgeschätzt, was es erlaubt, den DME-Bedarf abzuschätzen, indem ein Marktanteil von DME innerhalb der PtF-Kategorie angenommen wird. Die ursprüngliche Schätzung des PtF-Bedarfs ist in Abbildung 65 dargestellt, Abbildung 66 zeigt die DME-Menge inklusive der CO₂-Menge. Die Gleichung, die zur Schätzung des DME-Bedarfs verwendet wurde, ist nachfolgend aufgeführt.

$$\text{DME Bedarf} = \text{Gesamter Power} - \text{to} - \text{Fuel} - \text{Bedarf} \times \% \text{Marktanteil DME} \\ \times \% \text{Inländische Produktion}$$

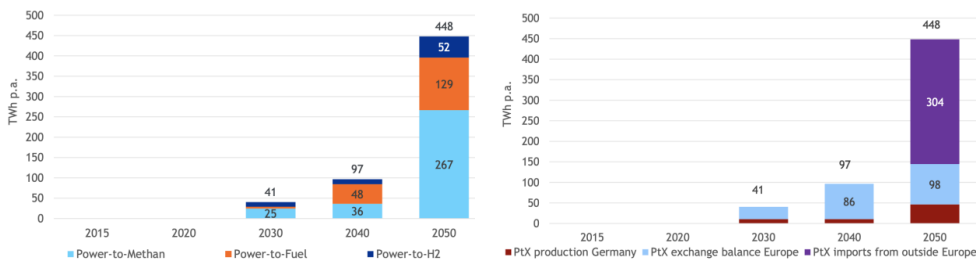


Abbildung 65: Verwendung von synthetischen Kraftstoffen nach Kraftstoffart und geografischer Herkunft der synthetischen Kraftstoffe, basierend auf dem Bericht der ewi Energy Research & Scenarios GmbH [124]

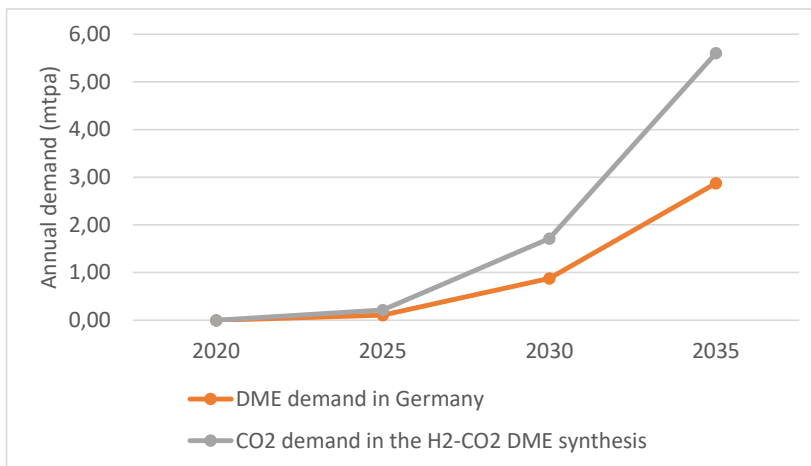


Abbildung 66: Projizierter DME-Bedarf und korrespondierender CO₂-Bedarf

2.4.3 Mögliche CCU-Systeme

Um verschiedene CCU-Pfade in Nordrhein-Westfalen (NRW) zu bewerten, wurden im Laufe des Projekts zwei generische Systemkonzepte entwickelt: ein großskaliges und ein kleinskaliges System. Beide Konzepte haben unterschiedliche Schlüsseleigenschaften. Die Konzepte bestehen aus unterschiedlichen Technologien und Annahmen. Beide Konzepte haben DME als Produkt, welches unter Verwendung von Wasser, CO₂ und Strom als Eingangsstoffe produziert wird. In der Syntheseeinheit entsteht ein Methanol-Wasser-Gemisch, das in einer nachfolgenden Kolonne destilliert werden muss. Die Auslegung solcher Trennprozesse wird in Abschnitt 2.1.3 erläutert.

Die Methodik erlaubt eine Bewertung der unterschiedlichen Vor- und Nachteile zwischen den Konzepten. Aufgrund der hohen Kapazitätsauslastung und der Skaleneffekte wird erwartet, dass das große System in Bezug auf die Wirtschaftlichkeit überlegen ist. Auf der anderen Seite kann erwartet werden, dass das kleine System eine bessere CO₂-Bilanz aufweist.

Die entwickelten Prozessketten wurden in ein Energiesystem-Optimierungsmodell mit linearer Programmierung auf Basis des Open-Source-Frameworks Calliope [125] übersetzt. Die

Zielfunktion des Optimierungsprozesses ist die Minimierung der gesamten annualisierten Systemkosten. Der Optimierungsprozess führt zu den kostenoptimalen Kapazitäten und Betrieb aller Systemkomponenten. Aufgrund der höheren Komplexität und der Abhängigkeiten von Speicherdimensionierung und -betrieb ist dies insbesondere für das kleine System relevant.

Die zeitliche Auflösung des Optimierungsmodells beträgt ein Jahr (das Basisjahr ist 2016) auf Stundenbasis. Die hohe zeitliche Auflösung ist für das kleine System besonders wichtig, um die hohe Variabilität der erneuerbaren Energien auf Basis von Wind und Sonne zu erfassen. Das Modell ist so aufgebaut, dass eine räumlich differenzierte Analyse möglich ist. Das Optimierungsmodell berechnet das kostenoptimale Systemdesign (Kapazitätsmix, Speichergrößen, Energieflüsse) für einen gegebenen DME-Bedarf. Die Systemkomponenten werden durch eine Reihe von Eingabeparametern beschrieben.

Das Open-Source-Rahmenwerk Calliope wurde in vielen begutachteten Publikationen verwendet (siehe Publikationsliste auf der offiziellen Calliope Webseite [126]). Die vollständige mathematische Beschreibung kann online eingesehen werden [127]. Die mathematische Beschreibung enthält alle Gleichungen, die zur Beschreibung des Energiesystems verwendet werden. Calliope verwendet die Eingabeparameter, um ein lineares Gleichungssystem zu formulieren, welches mit einem Lösungsalgorithmus hinsichtlich eines oder mehrerer Parameter optimiert werden kann.

2.4.4 Systembeschreibung des großskaligen Systems

Der Standort der generischen Großanlage (dargestellt in Abbildung 68) wird in der Nähe einer industriellen CO₂-Punktquelle angenommen. Sie ist so ausgelegt, dass sie das ganze Jahr bei Grundlast mit einer hohen Auslastung von über 96 % (konkret 8.448 Stunden) betrieben wird und 500 kt DME pro Jahr produziert. Der Elektrolyseur bezieht Strom aus dem Stromnetz zu festen Bereitstellungskosten. Das für den Prozess notwendige CO₂ wird vor Ort aus der industriellen Punktquelle mittels Aminwäsche abgetrennt und gereinigt. Als Nebenprodukt produziert der Elektrolyseur Sauerstoff. In Zukunft könnte Sauerstoff in größeren Mengen für Oxyfuel-Prozesse benötigt werden, daher wird eine mögliche Sauerstoffvergütung in Abschnitt 2.4.7.7 analysiert. Alle techno-ökonomischen Parameter sind in Tabelle 28 aufgeführt.

Netzstrom wird typischerweise durch eine Mischung von Technologien bereitgestellt, einschließlich erneuerbarer und fossiler Energiequellen. Aus der Mischung von Technologien kann ein durchschnittlicher Kohlendioxid (CO₂)-Fußabdruck (typischerweise in Gramm CO₂ pro kWh Strom) ermittelt werden. Abbildung 67 gibt einen Überblick über den CO₂-Fußabdruck des Stromnetzes für NRW und Deutschland von 2012 bis 2015. Die deutlich höheren Werte für NRW sind mit den Kohlekraftwerken, die in NRW in Betrieb sind, zu erklären. Es ist zu erwarten, dass dieser Wert sinken wird, wenn in Zukunft mehr erneuerbare Energien den Kohlestrom ersetzen. Der Kohlendioxid-Fußabdruck des Stroms ist wesentlich, um die Klimaverträglichkeit des Produktes zu bewerten. Für die Basisberechnungen wird ein durchschnittlicher Kohlendioxid-Fußabdruck von 600 g/kWh angenommen. Die Ergebnisse der Emissionsbilanz in Abhängigkeit vom CO₂-Fußabdruck in einem breiteren Bereich werden in Abschnitt 2.4.7.6 dargestellt.

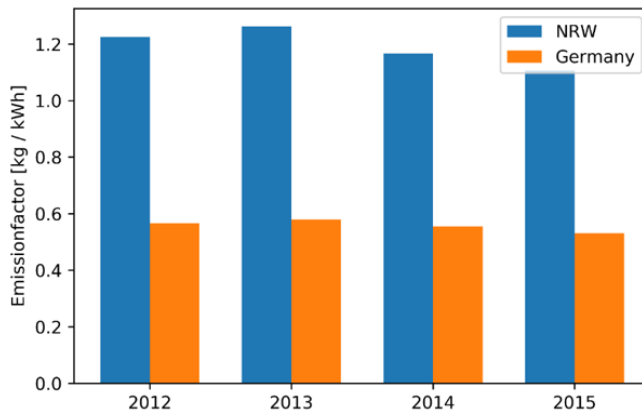


Abbildung 67: Durchschnittlicher Emissionsfaktor des Netzstromes für Deutschland und Nordrhein-Westfalen von 2012 - 2015

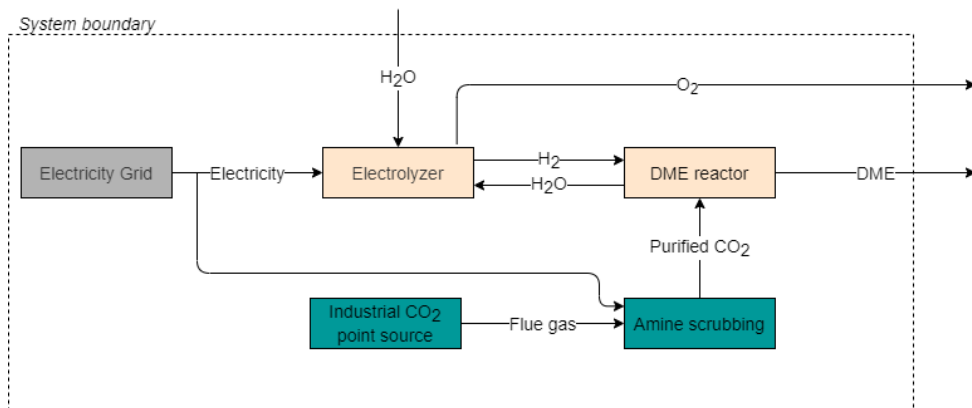


Abbildung 68: Schematische Prozesskette des betrachteten großskaligen generischen Systems

2.4.5 Systembeschreibung des kleinskaligen Systems

Das kleinskalige System (wie in Abbildung 69 dargestellt) verfügt über eine eigene erneuerbare Stromversorgung, die eine Kombination aus Photovoltaik und Windenergie ist. Es besteht keine Verbindung zum Stromnetz, d. h. es kann kein Strom aus dem Netz bezogen oder temporäre Überschüsse in das Netz eingespeißt werden. Die Anlage ist deutlich kleiner (um den Faktor 10.000) als die Großanlage. Somit produziert die Anlage 50 t DME pro Jahr. Aufgrund der eigenen regenerativen Stromversorgung basiert der Betrieb der Anlage auf dem Erzeugungsprofil von PV und Wind. Dieses ist abhängig von den lokal verfügbaren Ressourcen, wie Sonneneinstrahlung und Windgeschwindigkeiten. Für die Modellierung wurden Kapazitätsfaktoren verwendet, um die lokalen Ressourcen für Wind und PV darzustellen. Sie beschreiben, wie viel der (Spitzen-)Leistung in jeder Stunde des Jahres genutzt werden kann (vgl. Abbildung 70 und Abbildung 71). Der erzeugte Strom aus PV und

Wind kann in einer Batterie zwischengespeichert werden. Die Batterie kann den Elektrolyseur mit Strom versorgen, wenn die Einspeisung aus Wind und PV zu gering ist. Der Elektrolyseur produziert Wasserstoff, der als Eingangsstoff für den DME-Reaktor dient. Der Wasserstoff kann in einem Wasserstoffspeicher zwischengespeichert werden. Dazu muss er jedoch in einem Wasserstoffkompressor verdichtet werden, wofür Strom benötigt wird. Für die CO₂-Versorgung wird eine externe Quelle angenommen, die zu einem Festpreis CO₂ in der für den Prozess gewünschten Qualität liefert (vgl. Tabelle 28).

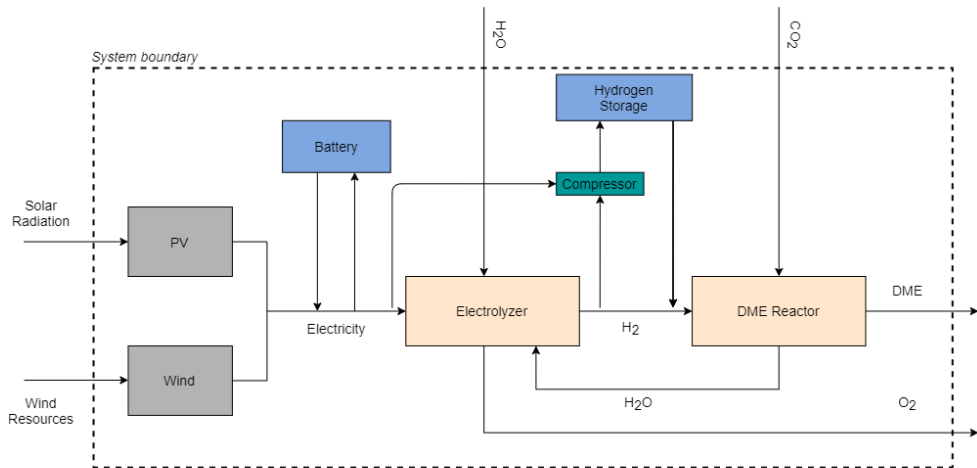


Abbildung 69: Schematische Prozesskette des betrachteten kleinskaligen generischen Systems

'Renewables.ninja' ist eine Plattform, welche Kapazitätsfaktoren für viele Regionen in Europa von 1980-2016 anbietet [128-130]. Die Kapazitätsfaktoren für die erneuerbare Erzeugung sind für fünf verschiedene Regionen innerhalb von NRW verfügbar. Abbildung 70 zeigt den durchschnittlichen (d. h. den Mittelwert der 8784 Datenpunkte) Kapazitätsfaktor für Wind und PV für alle fünf Regionen für das Jahr 2016. Generell wurde das Optimierungsmodell so aufgebaut, dass eine räumlich differenzierte Analyse möglich ist. In diesem Bericht beziehen sich jedoch alle Ergebnisse für das kleinskalige System auf die Region DEA2 (sofern nicht anders angegeben), da hier das höchste erneuerbare Potenzial vorhanden ist.

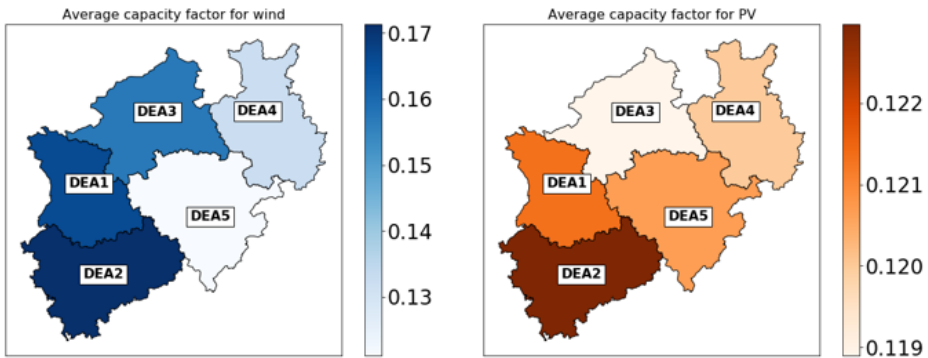


Abbildung 70: Regionales Einspeisepotential für Wind (links) und PV (rechts) dargestellt als durchschnittliche Kapazitätsfaktoren

Die Kapazitätsfaktoren für DEA2 für 2016 sind in Abbildung 71 dargestellt. Der sich wiederholende Charakter der Photovoltaik ist deutlich zu beobachten: Die Sonneneinstrahlung erfolgt nur tagsüber und ist in den Sommermonaten stärker als in den Wintermonaten. Bei Wind ist der repetitive Charakter weniger ausgeprägt, allerdings ist die Windenergie in den Wintermonaten stärker. Die Daten legen nahe, dass sich die beiden Technologien aufgrund ihrer saisonalen Unterschiede gut ergänzen könnten.

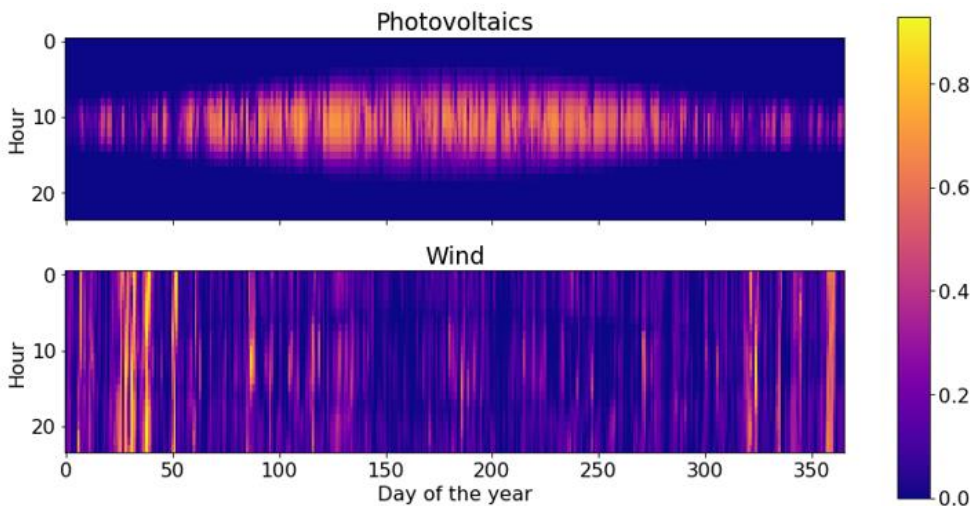


Abbildung 71: Detailliertes Einspeiseprofil für Photovoltaik (oben) und Windenergie (unten), DEA2, 2016

2.4.6 Techno-ökonomische Parameter und weitere Annahmen zur Modellbildung

Das Optimierungsmodell erfordert eine Beschreibung der Systemkomponenten durch techno-ökonomische Parameter, z. B. die Installationskosten und den Wirkungsgrad. Zusätzlich müssen einige Nebenbedingungen als Randbedingungen gesetzt werden. Zum Beispiel ist der DME-Reaktor nicht so flexibel wie der Elektrolyseur. Flexibilität beschreibt in diesem

Zusammenhang die Fähigkeit einer Systemkomponente, einer vorgegebenen Last schnell und in einem definierten Lastbereich zu folgen. Dies wird mit dem Parameter Mindestnutzung abgebildet, der die untere Grenze für die Auslastung einer Systemkomponente beschreibt.

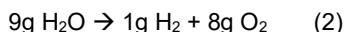
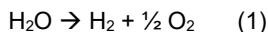
Tabelle 27 gibt einen Überblick über die Brenn- und Heizwerte für Wasserstoff und DME. Diese Werte wurden für die Modellkonfiguration verwendet. Die Brennwerte wurden zur Bestimmung der Massenströme für alle chemischen Reaktionen verwendet.

Tabelle 27: Übersicht über die verwendeten Heiz- und Brennwerte von Wasserstoff und DME

	H _o [MJ/kg]	H _o [kWh/kg]	H _u [MJ/kg]	H _u [kWh/kg]
H ₂	141.7	39.4	120	33.3
DME	31.7	8.81	28.9	8.03

Folgende vereinfachte Reaktionsgleichungen dienen als Grundlage für die Berechnung der notwendigen Massenbilanzen für die Modellierung.

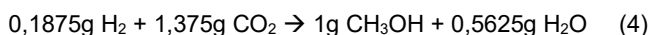
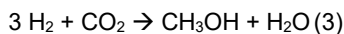
Elektrolyseur:



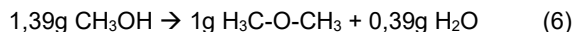
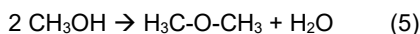
Daraus ergibt sich eine theoretische Koppelproduktion von 8 kg Sauerstoff pro 1 kg Wasserstoff.

DME-Reaktor (es wird angenommen, dass beide Schritte gleichzeitig als einstufige Reaktion ablaufen):

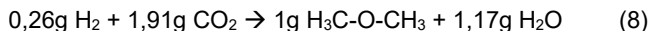
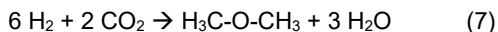
Erster Schritt



Zweiter Schritt



Beide Schritte können wie folgt zusammengefasst werden



Daraus ergibt sich ein Kohlendioxidbedarf von 1,913 kg CO₂ pro 1 kg DME. Zusätzlich werden bei der Reaktion 1,1739 kg H₂O gebildet. Es wird davon ausgegangen, dass das gebildete Wasser im Elektrolyseur verwendet werden kann. Die dargestellten Zahlen sind Idealwerte, die realen Stoffströme können abweichen.

Tabelle 28 gibt einen Überblick über die verwendeten techno-ökonomischen Parameter und Annahmen für die Modellierung. Die Bereitstellungskosten für CO₂ (nur für das kleine System)

sind unter den O&M-Kosten aufgeführt. Dasselbe gilt für die Versorgungskosten für Wasser (beide Systeme). Der Einfachheit halber ist der Wärmebedarf für die Aminwäsche im Strombedarf enthalten, wobei hierbei Umwandlungsverluste und zusätzliche Kosten vernachlässigt werden.

Die Investitionskosten und deren Unterteilung in „Stack“ und „Balance of Plant“ (BoP) für die Elektrolyse beruhen auf Gesprächen mit den Projektpartnern. Sie stellen aktuelle Zahlen für heute oder mittelfristig verfügbare Elektrolyseure dar. Zukünftige Technologien können potenziell geringere Investitionskosten haben. Optimistischere Kostenschätzungen werden in Arbeitspaket 4 berücksichtigt.

Der angenommene Strompreis von 0,0975 €/kWh für die Großanlage entspricht dem eines Industriekunden in Deutschland. Für energieintensive Technologien liegen die Strompreise oft bei 0,05 - 0,06 €/kWh. In bevorzugten Regionen (außerhalb Deutschlands) mit hohen Anteilen an erneuerbaren Energien werden sogar 0,015 - 0,02 €/kWh prognostiziert. Der Strompreis ist abhängig von der Herkunft des DME-Produzenten in der Wertschöpfungskette. Ein Stromproduzent, der zusätzlich DME produziert, ist anders zu bewerten als ein mittelständisches Industrieunternehmen, das ein solches Produkt in sein Portfolio aufnehmen möchte. Aus diesem Grund wird der Einfluss des Strompreises separat analysiert und diskutiert.

Tabelle 28: Übersicht über die verwendeten techno-ökonomischen Parameter für die Modellierung der beiden generischen CCU-Systeme

	Investition [€/kW] ¹		Investition [€/kWh] ¹		O&M		Lebensdauer [a]	Effizienz	Lastwechsel	Mindestlast
	Klein	Groß	Klein	Groß	Klein	Groß				
Aminwäsche ²		275 €/ (kg _{CO2} /h)				0,00239 €/kg _{CO2}	20	0,323 kWh/kg _{CO2}		
Batterie ³	140		109				15	95,4%		
CO ₂ Versorgung					70 €/t _{CO2}					
DME Reaktor ⁴	2350 ^{4*}	297,9			5%			89,4% ^{4**}	1,5 %/h	80%
Netzstrom ⁵						0,0976 €/kWh				
Elektrolyseur Stack ⁶	1000	400			5%		9	60%	100 %/h	0%
Elektrolyseur System (BoP) ⁶	1000	1600			5%		20			
Wasserstoff Kompressor ⁷	4293 €/ (kg _{H2} /h)				2%		5	3,3 kWh/kg _{H2}		
Wasserstoffspeicher ⁸			922 €/kg _{H2}		2%		25			
Photovoltaik ⁸	1074				1,5%		25	Lokale Ressourcen ⁹		
Wasserversorgung						0,01 €/kg _{H2O}				
Wind ⁸	1312,5				2%		25	Lokale Ressourcen ⁹		

1: Einheit in €/kW, falls nicht anders angegeben

2: Schätzung, basierend auf [131]

3: Batterie O&M: 0,00194 €/kWh and 6,4 €/kW, Selbstentladung: 0,008 %/h basierend auf Pfenninger [132]

4: Abgeleitet von Schemme et al. [93] und Ergebnis der internen Diskussion zwischen Arbeitspaket 4 und 5

4*: Eigene Annahme als Schätzung um die signifikant unterschiedliche Anlagengröße zu bewerten

4** : Auf den Brennwert (H_o) gezogen

5: Ergebnis der internen Diskussionen zwischen Arbeitspaket 4 und 5. Der Strombezugspreis ist ein entscheidender Parameter und ist Gegenstand einer detaillierten Sensitivitätsstudie (vgl. Abschnitt 2.4.7.5). Der gewählte Wert für den Basisfall ist für industrielle Großverbraucher in der nahen Zukunft.

6: Die unterschiedliche Gewichtung von Stack und System ist ein Ergebnis von Diskussionen zwischen Arbeitspaket 4 und 5. Die Basisannahmen sind Investitionskosten von 2000 €/kW_{el}. Aufgrund der geringeren Lebensdauer und Kostenzuordnung des Stacks im Großsystem werden Skaleneffekte berücksichtigt.

7: Basiert auf Makridis, Parks [133, 134]

8: Basiert auf Kharel et al., Morgenthaler et al. [135-137]

9: Stündlich aufgelöste Kapazitätsfaktoren aus 2016, NUTS-Region DEA2 [129], vgl. Abbildung 71

Im Folgenden werden die Ergebnisse für die beiden generischen Anlagenkonzepte dargestellt. Der Fokus liegt dabei auf der wirtschaftlichen Leistungsfähigkeit und der CO₂-Bilanz für beide Konzepte. Um den Einfluss der Systemparameter auf die resultierenden Kosten zu vergleichen, werden Elastizitätsberechnungen durchgeführt. Die Parameter mit dem höchsten Einfluss für beide Systeme werden dann in einer tiefergehenden Sensitivitätsstudie analysiert.

2.4.7 Ergebnisse zur großskaligen Anlage mit Netzanschluss

Die großskalige Anlage (wie in Abbildung 68 dargestellt) ist an das Stromnetz angeschlossen und läuft ganzjährig im Dauerbetrieb. Die Auslastung der Anlage liegt bei über 96 %. Es wird angenommen, dass die Anlage 14 Tage geplante Wartung und Instandhaltung benötigt, aber den Rest des Jahres bei Grundlast betrieben wird. Im folgenden Abschnitt werden die Ergebnisse für das großskalige System dargestellt.

2.4.7.1 Kapazitäten, Stoff- und Energiebilanz

Aufgrund der konstanten Stromversorgung und des kontinuierlichen Systembetriebs sind die Kapazitäten für jede Systemkomponente trivial. Die Ein- und Ausgänge für jede Systemkomponente sind in Abbildung 72 dargestellt. Das System bezieht etwa 1 Gigawatt pro Stunde (GW/h) Strom aus dem Netz. Zum Vergleich: Die durchschnittliche deutsche Netzlast im Jahr 2016 betrug 58,7 GWh/h (eigene Berechnungen auf Grundlage der Open Power System Data [138]). Der Strom wird für den Betrieb des Elektrolyseurs und für die Stromversorgung des CO₂-Abscheideprozesses verwendet. Die Wasserversorgung für den Elektrolyseur wird aus einer externen Quelle und dem überschüssigen Wasser aus dem DME-Reaktor gedeckt. Als Nebenprodukt erzeugt der Elektrolyseur Sauerstoff. Ein möglicher Umsatz für Sauerstoff und die Auswirkungen auf die Ergebnisse werden in Abschnitt 2.4.7.7 diskutiert.

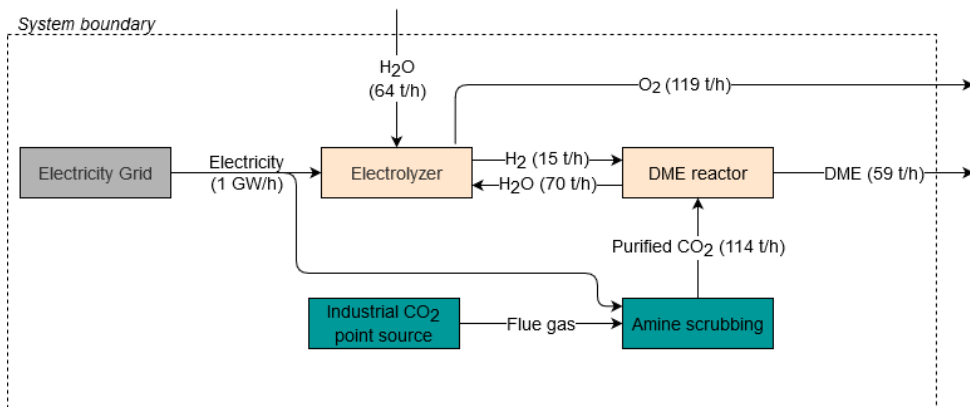


Abbildung 72: Stoff- und Energiebilanz für alle Systemkomponenten für das großskalige System (Werte sind gerundet) (t/h, Tonnen pro Stunde)

2.4.7.2 Kostenaufteilung

Die Kosten für die Elektrizitätsversorgung dominieren die Gesamtsystemkosten. Der Gesamtanteil liegt bei über 76 % (vgl. Abbildung 72), gefolgt vom Elektrolyseur (Anlage, Stack)

und dem DME-Reaktor. Die Kosten für die CO₂-Bereitstellung und die Wasserversorgung sind im Vergleich dazu vernachlässigbar klein.

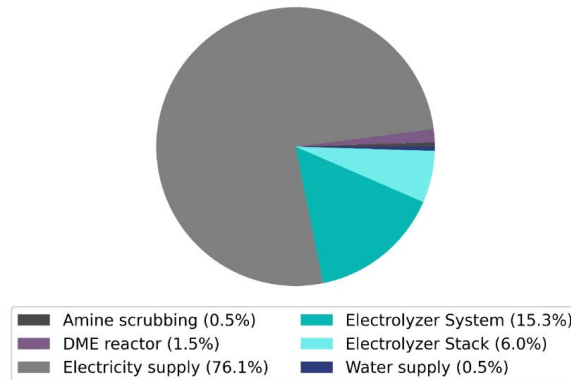


Abbildung 73: Kostenaufteilung für alle Systemkomponenten des großskaligen Systems

Die gesamten annualisierten Systemkosten für alle Komponenten sind in Tabelle 29 zusammengefasst. Aus diesen Daten können die DME-Gestehungskosten (LC) berechnet werden, die sich aus der Summe aller Kosten (CAPEX und OPEX) geteilt durch die Gesamtmenge des produzierten DME ergeben. Die Gestehungskosten für DME für das Großsystem betragen 2,18 €/kg.

Aufgrund des dominierenden Anteils der Stromversorgungskosten (und der recht hohen Strompreisannahme) kann davon ausgegangen werden, dass die DME-Gestehungskosten sehr empfindlich auf die Strompreisannahme reagiert. Elastizitätsberechnungen und die Auswirkungen der Strompreisannahme auf die Gesamtsystemkosten finden sich in den Abschnitten 2.4.7.4 und 2.4.7.5.

Tabelle 29: Annualisierte Gesamtkosten pro Systemkomponente des großskaligen Systems

	Wert	Einheit
Aminwäsche	5,48	Million €
DME Reaktor	16,71	Million €
Stromversorgung	831,30	Million €
Elektrolyseur System	167,37	Million €
Elektrolyseur Stack	65,76	Million €
Wasserbereitstellung	5,38	Million €
Summe	1.092	Million €
Produzierte Menge an DME	500	kt
Gestehungskosten	2,18	€/kg

Tabelle 30 fasst alle Kosten zusammen, die mit dem CO₂-Abscheidungsprozess verbunden sind. Die CO₂-Bereitstellungskosten werden zu 37,25 €/t berechnet. Im Gegensatz dazu sind

die Kosten für die CO₂-Bereitstellung des kleinskaligen Systems etwa doppelt so hoch (vgl. Tabelle 31). Die Kostenspanne für die CO₂-Bereitstellung aus der Literatur liegt meist höher und reicht von 70 €/t [93] bis 100 €/t [136] und sogar über 200 €/t [139].

Tabelle 30: Spezifische CO₂-Bereitstellungskosten (Modellierungsergebnis) für das großskalige System

	Wert	Einheit
Aminwäsche	5,48	Million €
Strombedarf	308,95	GWh
Strompreis	0,0976	€/kWh
Stromkosten	30,15	Million €
Abgeschiedenes CO₂	0,96	Mt
Kosten für die CO₂-Abtrennung	37,25	€/t

2.4.7.3 CO₂-Emissionsbilanz

Das Großsystem bezieht Strom aus dem Netz. Netzstrom ist mit einem CO₂-Fußabdruck verbunden (hier 600 g CO₂/kWh). Gleichzeitig benötigt der Prozess Kohlenstoffdioxid als Rohstoff. In Abbildung 74 ist die CO₂-Bilanz dargestellt. Die Ergebnisse zeigen, dass die großtechnische Anlagenkonfiguration zusätzliches CO₂ von über 4 Mt verursacht, um 0,5 Mt DME zu produzieren.

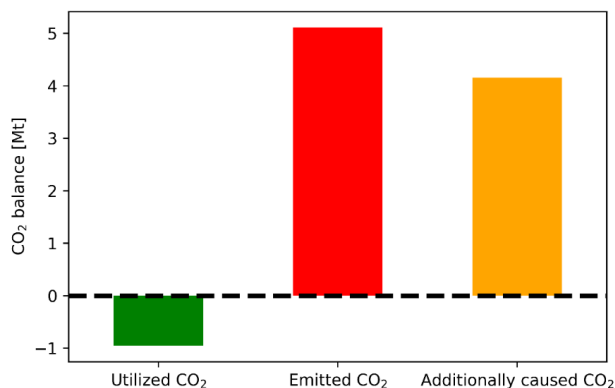


Abbildung 74: CO₂-Emissionsbilanz des großskaligen Systems

Die Emissionsbilanz zeigt, dass die großtechnische Anlagenkonfiguration mit dem heutigen Strommix nicht zur Treibhausgasminderung beitragen kann. Vielmehr tritt der gegenteilige Effekt ein: Er verursacht zusätzliches CO₂. Die Grundlage dieser Betrachtung ist der CO₂-Fußabdruck des Netzstroms. Die Emissionsbilanz in Abhängigkeit vom CO₂-Fußabdruck des Netzstroms wird in Abschnitt 2.4.7.3 analysiert. Aus ökologischer Sicht und aus der Perspektive des Klimaschutzes ist der derzeitige großskalige Systemaufbau daher sehr kritisch zu sehen.

2.4.7.4 Elastizität

Die Einflüsse der techno-ökonomischen Parameter auf die resultierenden DME-Gestehungskosten können mit Hilfe der Elastizität dimensionslos verglichen werden. Die absolute Elastizität ($|\varepsilon|$) für jeden Parameter (p) bezüglich der DME-Gestehungskosten (LC) wird numerisch mit folgender Gleichung berechnet:

$$\varepsilon(p) = \left| \frac{p}{LC} * \frac{\partial LC}{\partial p} \right|. \quad (9)$$

Im Allgemeinen gilt: Je höher die Elastizität, desto größer ist der Einfluss des Parameters auf die DME-Gestehungskosten. Somit kann eine Rangfolge der Parameter erstellt werden. Die Elastizität wird verwendet, um die wichtigsten Parameter zu identifizieren, die Gegenstand von technologischen Verbesserungen sein könnten. Abbildung 75 zeigt die Elastizität für die ausgewählten Parameter.

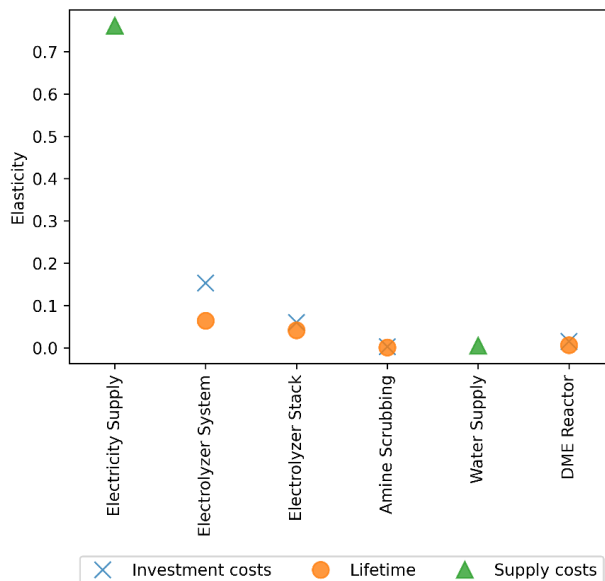


Abbildung 75: Ergebnisse der Elastizitätsberechnungen für das großskalige System

Die höchste Elastizität wird für die Stromversorgungskosten (0,76) gefunden, gefolgt von den Investitionskosten des Elektrolyseursystems (0,15) und der Lebensdauer (0,06). Die Elastizitäten der anderen Parameter sind eher gering. Dies zeigt wiederum, wie wichtig der Strompreis für das System ist. Der größte Hebel zur Reduzierung der DME-Gestehungskosten ist die Senkung des Strompreises. Eine Analyse des Kostensenkungspotenzials als Funktion des Strompreises findet sich in Abschnitt 2.4.7.5.

2.4.7.5 Einfluss des Stromversorgungspreises

Der Strompreis hat den größten Einfluss auf die Gesamtkosten der DME-Produktion im Großsystem (vgl. Abbildung 68). Die Entwicklung des Strompreises ist unsicher und hängt von vielen Faktoren ab, wie zum Beispiel den regulatorischen Rahmenbedingungen, einem möglichen Netzausbau, möglichen Subventionen usw. Somit sind die Preisannahmen unsicher. Um mit den Unsicherheiten umzugehen, ist eine Variation des Strombezugspreises sinnvoll (von 0 €/kWh bis 0,15 €/kWh). Die resultierenden DME-Gestehungskosten sind linear abnehmend mit sinkenden Kosten für Strom (Abbildung 76, linke Achse, blaue Linie). Der Gesamtanteil der Strombezugskosten steigt exponentiell an, bis ein Bezugspreis von etwa 0,05 €/kWh erreicht ist (Abbildung 76, rechte Achse, gelbe Linie). Auch hier zeigt sich, wie dieser Systemparameter die anderen Parameter dominiert.

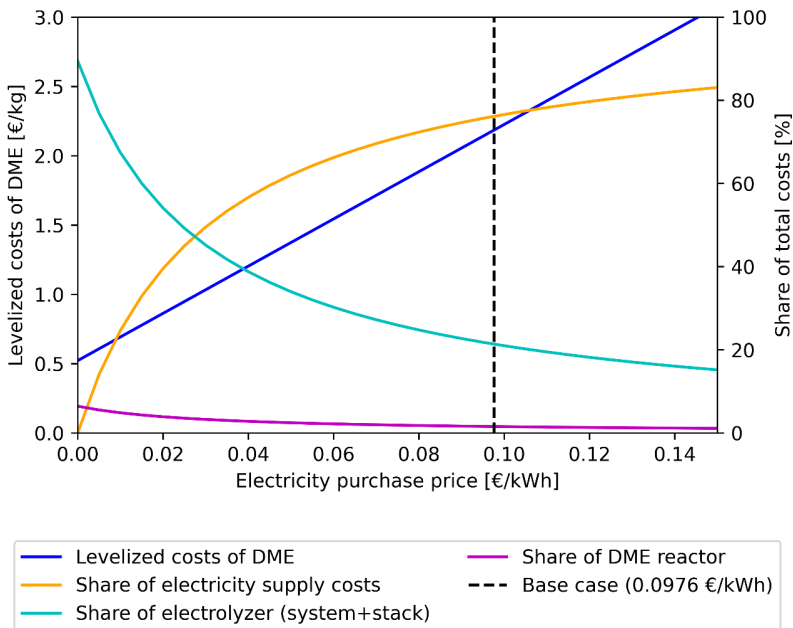


Abbildung 76: DME-Gestehungskosten als Funktion des Strompreises

2.4.7.6 Einfluss des CO₂-Fußabdrucks des Netzstroms

Die Herkunft des genutzten Stroms bestimmt die CO₂-Emissionen, die mit der Produktion von DME aus der Großanlage verbunden sind. Für den Basisfall wird ein durchschnittlicher CO₂-Fußabdruck von 600 g/kWh angenommen. Es wird erwartet, dass dieser Wert in der Zukunft sinkt. Gründe dafür sind z. B. der Ausbau erneuerbarer Stromquellen und der Ausstieg aus der Kohleverstromung. Es ist jedoch sehr unsicher, mit welcher Geschwindigkeit der Wert sinken wird.

Um dieser Unsicherheit zu begegnen, wurde eine Variation des angenommenen CO₂-Fußabdrucks durchgeführt (vgl. Abbildung 77). Die Produktion verursacht und nutzt gleichzeitig Kohlenstoffdioxid. Daher ist es sinnvoll, die Netto-CO₂-Bilanz zu untersuchen, die als Differenz zwischen verursachtem und genutztem CO₂ definiert werden kann. Diese

Bewertung kann eine detaillierte LCA (vgl. Abschnitt 2.3) nicht ersetzen. Sie kann aber erste Annäherungen an die ökologische Sinnhaftigkeit des Produktes liefern.

Die Analyse zeigt, dass die Emissionsbilanz bei einem CO₂-Fußabdruck von 112 g/kWh gleich Null ist. Das bedeutet, dass bei diesem Fußabdruck das Produkt DME die gleiche Menge an CO₂ nutzt, die zur Erzeugung der für die DME-Produktion notwendigen Strommenge freigesetzt wurde. Höhere Fußabdrücke führen zu einer Emissionsbilanz, bei der die Produktion mehr CO₂ verursacht als sie nutzt (rot markierter Bereich), während niedrigere Fußabdrücke zu einer Emissionsbilanz führen, bei der die Produktion mehr CO₂ nutzt als sie produziert (grün markierter Bereich).

Die aktuellen Ausbauziele für erneuerbare Stromquellen und die gewählte Strategie bzgl. des Ausstiegs aus der Kohleverstromung der Bundesregierung lassen es nicht zu, dass der angestrebte niedrige CO₂-Fußabdruck von Netzstrom in absehbarer Zeit erreicht werden kann. Aus rein ökologischer Sicht sollte daher auf die Produktion von synthetischen Kraftstoffen mit kontinuierlicher Netzstromversorgung verzichtet werden, solange der bereitgestellte Netzstrom eine derart hohe ökologische Belastung aufweist.

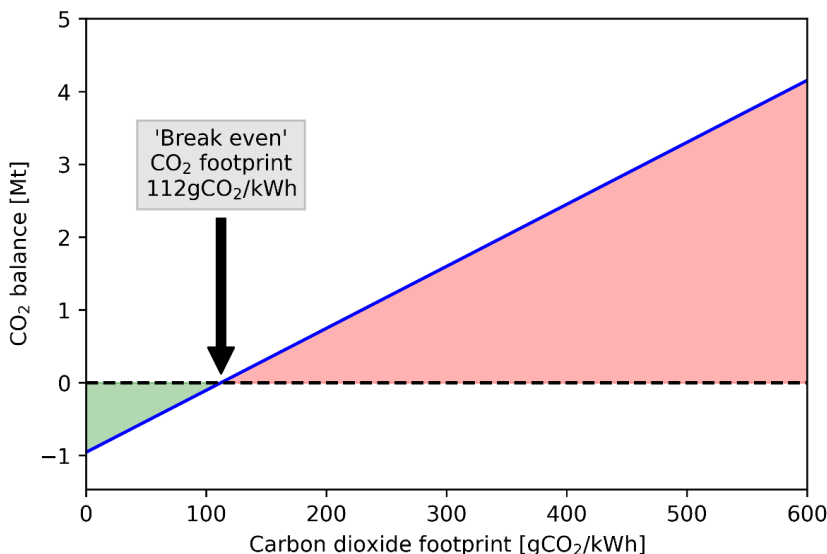


Abbildung 77: CO₂-Emissionsbilanz als Funktion des CO₂-Fußabdrucks des Netzstroms

2.4.7.7 Sauerstoffvergütung

Sauerstoff ist ein Nebenprodukt (bzw. Koppelprodukt) der DME-Produktion und könnte für andere Zwecke verwendet werden. Sauerstoff könnte in Zukunft in großen Mengen benötigt werden, zum Beispiel für Oxyfuel-Prozesse, die für die Dekarbonisierung von Industriesektoren unerlässlich sein könnten. Er kann auch für die Abwasseraufbereitung genutzt werden. Heute wird Sauerstoff meist als Nebenprodukt von Luftzerlegungsanlagen produziert, wobei Stickstoff und Edelgase entstehen.

Potenziell könnte Sauerstoff aufgefangen und verkauft werden, was zu einer Senkung der Kosten für die DME-Produktion führen würde. Der wirtschaftliche Wert von Sauerstoff ist ungewiss. Daher wurden die DME-Gestehungskosten in Abhängigkeit von einem möglichen Sauerstofferlös berechnet (Abbildung 78). Selbst bei kleinen Sauerstofferlösen können die Kosten reduziert werden. Die Nutzung von Synergieeffekten zwischen den industriellen Prozessen könnte potenziell sehr vorteilhaft für die wirtschaftliche Leistung des großtechnischen Systems sein. Dies ist insbesondere aufgrund des Grundlastcharakters der Großanlage von Bedeutung.

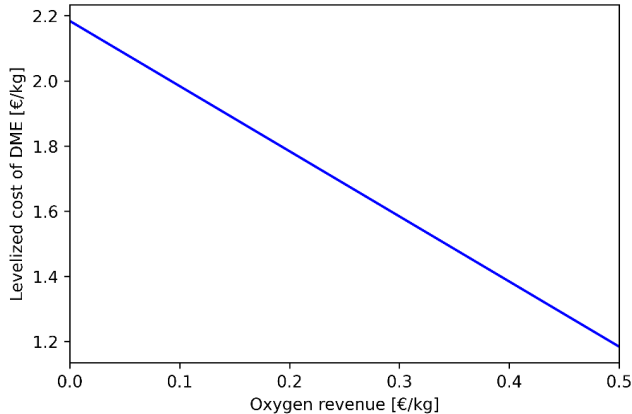


Abbildung 78: DME-Gestehungskosten als Funktion einer möglichen Vergütung des produzierten Sauerstoffs

2.4.8 Ergebnisse zum kleinskaligen Inselsystem

Die kleinskalige Anlage befindet sich in der Nähe einer eigenen regenerativen Stromversorgung und geht von einer externen CO₂-Versorgung aus, die das CO₂ in der für einen bestimmten Prozess erforderlichen Qualität zu einem festen Preis liefert.

2.4.8.1 Kostenoptimaler Kapazitätsmix und Speichergrößen

Die kostenoptimalen Kapazitäten und Speichergrößen, die für die Produktion von 50 Tonnen DME pro Jahr erforderlich sind, sind abhängig vom Optimierungsprozess. Abbildung 79 zeigt die Kapazität für jede Komponente sowie die Speichergrößen. Die erforderliche Windleistung ist mit etwa 400 kW_{el,peak} etwas größer als die PV-Leistung. Der Elektrolyseur hat eine elektrische Nennleistung von 127 kW_{el}, der DME-Reaktor eine Leistung von 6 kg DME/h. Die Batterie ist in der Lage 513 kWh Strom zu speichern, bei einer maximalen Eingangs- und Ausgangsleistung von 87 kW. Der Wasserstoffspeicher kann bis zu 163 kg Wasserstoff speichern.

Der Prozess ist recht komplex und beinhaltet viele gegenseitige Abhängigkeiten. Die Optimierung führt zu einer kostenoptimalen Balance von Spitzenleistungen für Wind und PV und entsprechenden Speichergrößen. In Zeiten hoher Erzeugung in Kombination mit einer geladenen Batterie und einem voll ausgelasteten Elektrolyseur kann der Strom nicht vom System verbraucht werden und muss abgeregelt werden. Eine Abregelung ist in hohem Maße unerwünscht. Der abgeregelter Strom stünde potenziell für andere Prozesse bereit. Weitere

Details zu den Abregelungsmengen, dem Zeitpunkt und den Lasthöhen finden sich in Abschnitt 2.4.8.4.

Die Batterie ermöglicht einen höheren Nutzungsgrad des Elektrolyseurs. Er wird hauptsächlich dazu verwendet PV-Spitzen während des Tages zu verbrauchen und Strom für den späteren Verbrauch zu verschieben. Der DME-Reaktor kann nicht flexibel betrieben werden. Sein dynamischer Lastbereich liegt zwischen 80 – 100 %, d.h. seine Last darf nicht unter 80 % seiner maximalen Last fallen. Der Wasserstoffspeicher stellt die Wasserstoffversorgung in Zeiten geringer Stromerzeugung sicher.

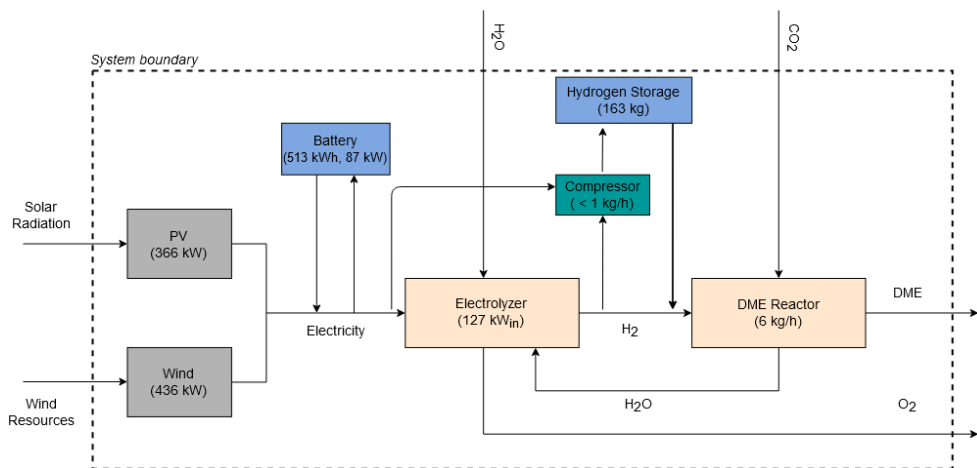


Abbildung 79: Kostenoptimalen Kapazitäten und Speichergrößen (Modellierungsergebnis) des kleinskaligen Systems

2.4.8.2 Kostenaufteilung des kleinskaligen Systems

Die Kostenaufteilung für alle Systemkomponenten für das kleinskalige System ist in Abbildung 80 dargestellt. Die Elektrizitätsversorgung hat einen hohen Anteil von über 50 %. Ein Viertel der Gesamtkosten entfällt auf den Elektrolyseur und die anschließende chemische Umwandlung. Die Speicher tragen zu weniger als 15 % zu den Gesamtsystemkosten bei. Die CO₂-Versorgung schlägt mit weniger als 5 % zu Buche. Der Wasserstoffkompressor sowie die Wasserversorgung sind vernachlässigbar.

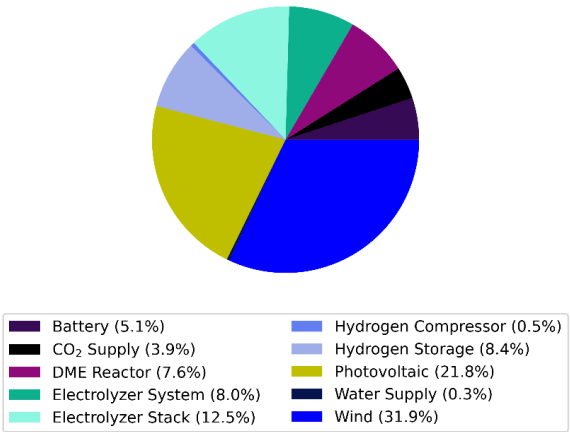


Abbildung 80: Kostenaufteilung für alle Systemkomponenten des kleinskaligen Systems

Die Aufschlüsselung der annualisierten Gesamtsystemkosten ist in Tabelle 31 zusammengefasst. Dividiert man die Summe durch die Gesamtmenge des produzierten DME, erhält man die DME-Gestehungskosten. Diese sind mit 3,43 €/kg deutlich höher als bei der großskaligen Anlage.

Tabelle 31: Annualisierte Gesamtkosten für alle Systemkomponenten des kleinskaligen Systems

	Wert	Einheit
Batterie	8.702	€
CO ₂ -Versorgung	6.696	€
DME Reaktor	13.112	€
Elektrolyseur System	13.667	€
Elektrolyseur Stack	21.480	€
Wasserstoffkompressor	811	€
Wasserstoffspeicher	14.393	€
Photovoltaik System	37,483	€
Wasserversorgung	561	€
Wind	54.797	€
Summe	171.702	€
Produzierte DME-Menge	50	t
Gestehungskosten	3,43	€/kg

2.4.8.3 Auslastung, Speicherbetrieb und Füllstände

Der Elektrolyseur hat keine dynamische Lastbegrenzung und kann flexibel betrieben werden. Abbildung 81 zeigt den Nutzungsgrad des Elektrolyseurs und des DME-Reaktors. Während der PV-Spitzen läuft der Elektrolyseur auf voller Leistung und verbraucht den Strom. Er folgt

hochflexibel dem Erzeugungsprofil von PV- und Windenergie. In Zeiten geringer oder keiner Stromerzeugung senkt er sein Lastniveau und schaltet sich bei Bedarf sogar komplett ab. Im Gegensatz zum Elektrolyseur läuft der DME-Reaktor fast das ganze Jahr über auf Volllast. Aufgrund seiner maximal zulässigen Laständerung pro Stunde und der Mindestlastbeschränkung kann er nicht dem Profil des Elektrolyseurs folgen. Es gibt kurze Perioden, in denen der DME-Reaktor seine Last leicht senkt.

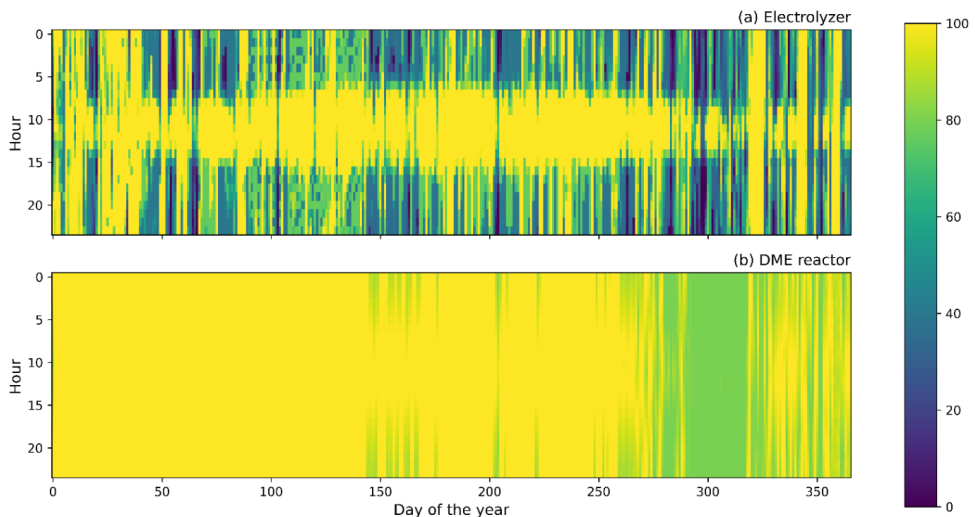


Abbildung 81: Lastverhalten pro Stunde von (a) dem Elektrolyseur und (b) dem DME-Reaktor über den Zeitraum von einem Jahr

Die Batterie und der Wasserstoffspeicher haben unterschiedliche Systemaufgaben. Der Batteriespeicher ist dafür zuständig, Strom zwischen kurzen Zeiträumen zu verschieben, z. B. um PV-Spitzen während des Tages zu speichern und den Strom am Abend und in der Nacht bereitzustellen. Selbst eine eher kleine Batterie (513 kWh können den Elektrolyseur bei voller Ladung nur vier Stunden lang versorgen) ist in der Lage, einen Großteil der auftretenden Schwankungen auszugleichen. Der Wasserstoffspeicher hingegen wird vor allem für jahreszeitliche Verschiebungen genutzt. Abbildung 82 zeigt den Füllstand für beide Speichertypen. Deutlich zu erkennen ist die gute Kombination von Batterie und PV-Leistung sowie die untertägige Verschiebung des Stroms.

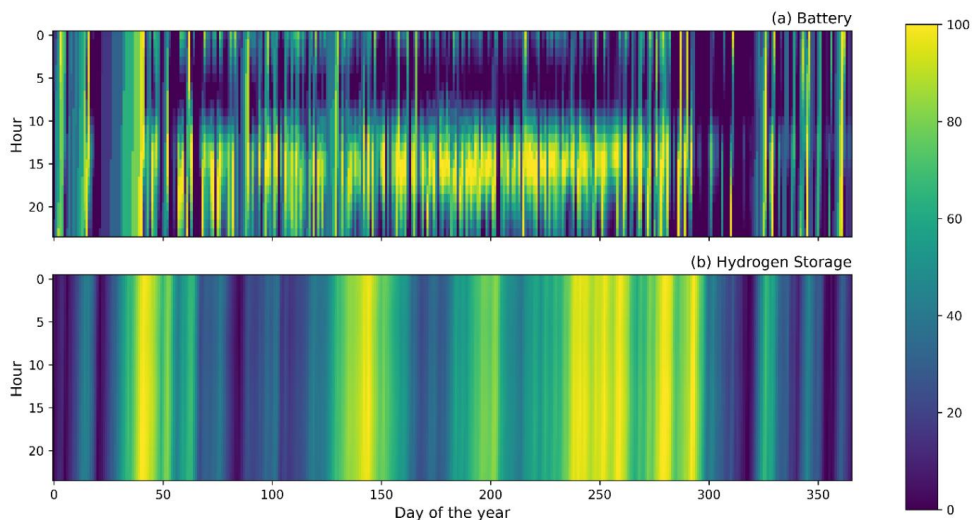


Abbildung 82: Füllstand [%] und Verbrauch von (a) der Batterie und (b) des Wasserstoffspeichers pro Stunde über den Zeitraum eines Jahres

2.4.8.4 Abregelung

Da das kleinskalige System so konzipiert ist, dass es ohne Netzanschluss autark ist, wird überschüssiger Strom abgeregelt. Der abgeregelter Strom könnte potenziell für andere Prozesse verwendet werden. Die Abregelung ist definiert als die Differenz zwischen dem potenziellen Strom und der tatsächlich genutzten Erzeugung (vgl. Abbildung 83). In diesem Modellierungsbeispiel wurde die Gesamtmenge der Abregelung mit ca. 200 MWh berechnet, was etwa 20 % des Gesamtpotenzials entspricht.

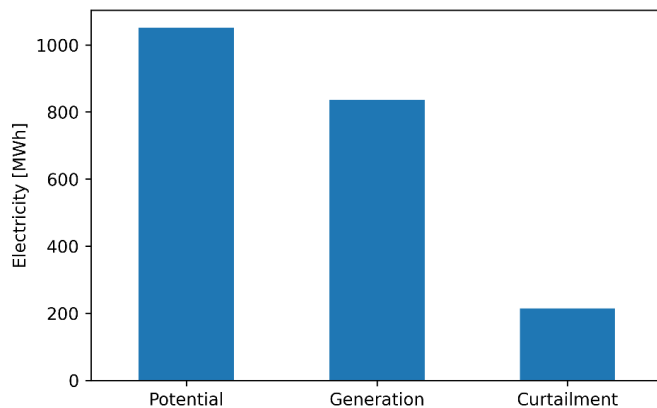


Abbildung 83: Die kumulierte Abregelung ist die Differenz zwischen dem Stromerzeugungspotenzial und der tatsächlichen Stromerzeugung (hier ca. 20 % des Gesamtpotentials)

Wenn der abgeregelter Strom für andere Prozesse verwendet werden soll, ist es wichtig, dessen Zeitpunkt und Lasthöhen zu bestimmen, um den Prozess anzupassen. Zu diesem Zweck werden typische wöchentliche Abregelungsprofile synthetisiert. Das Zeitreihenaggregationsmodul (time series aggregation module, TSAM) ist in der Lage, Zeitreihendaten in typische Zeiträume zu clustern [140, 141]. Das Modul wird verwendet, um die Zeitreihendaten aus dem Optimierungsprozess in vier typische Perioden zu clustern, die jeweils aus 168 Stunden bestehen. Dadurch ergeben sich vier typische Wochen, die in Abbildung 84 dargestellt sind. Das geclusterte Profil zeigt, dass die Abregelung typischerweise für eine kurze Dauer (Stunden bis Tage) mit eher hohen Spitzenwerten auftritt. Diese Profile sind für andere Prozesse eher ungünstig. Erstens, weil der abgeregelter Strom für etwa 60 % des Jahres nicht verfügbar ist. Außerdem ist die Abregelung immer dann, wenn sie auftritt nicht-kontinuierlich.

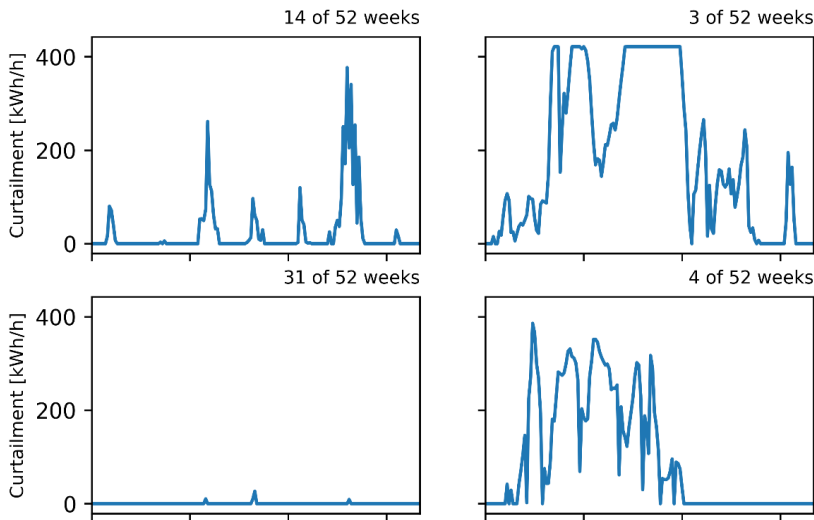


Abbildung 84: Geclusterte Abregelungs-Zeitreihe mit Lasthöhen und der Häufigkeit des Auftretens. Wenn der abgeregelte Strom für andere Prozesse genutzt werden soll, könnte ein typisches Erzeugungprofil wie die dargestellten geclusterten Daten aussehen

2.4.8.5 Elastizität

Die Elastizitätsberechnungen wurden nach der gleichen Methodik wie in Abschnitt 2.4.7.4 beschrieben durchgeführt. Für das komplexere kleinskalige System wurden zusätzlich weitere Parameter untersucht. Die Ergebnisse sind in Abbildung 85 zusammengefasst. Die Elektrizitätsversorgung hat einen hohen Einfluss, wobei die Investitionskosten für PV und Wind wichtiger sind als deren Lebensdauer. Der Elektrolyseur wird in zwei Komponenten unterteilt (Stack und System). Der Elektrolyseur-Stack hat einen höheren Einfluss als das System, wobei auch hier die Investitionskosten wichtiger sind als die jeweiligen Lebensdauern. Die Spanne ist jedoch nicht so groß wie bei der Stromversorgung. Überraschenderweise hat die Flexibilität des DME-Reaktors (hier wird die Flexibilität mit der Mindestlastbeschränkung abgebildet) den zweithöchsten Einfluss. Die maximale Laständerung pro Zeitschritt scheint dagegen irrelevant zu sein. Dies lässt sich dadurch erklären, dass eine erhöhte Flexibilität des DME-Reaktors zu geringeren Speichergrößen führen könnte, was wiederum zu geringeren Gesamtsystemkosten führen würde. Der Einfluss der Flexibilität des DME-Reaktors wird in Abschnitt 2.4.8.6 weiter untersucht. Andere Parameter haben einen moderaten Einfluss auf die resultierenden Kosten.

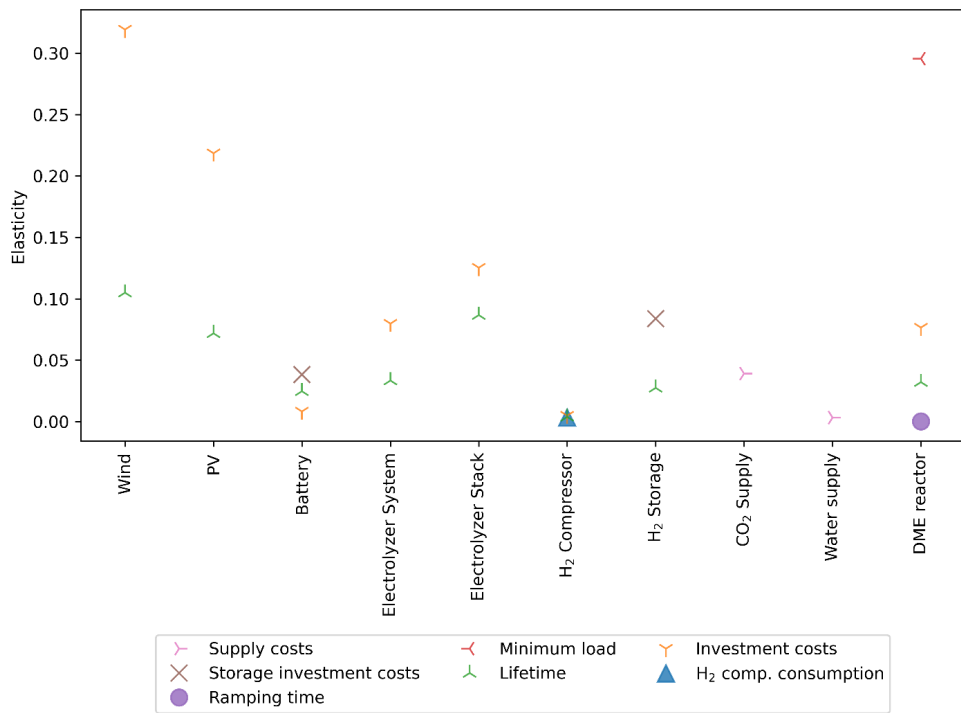


Abbildung 85: Ergebnisse der Elastizitätsberechnungen für das kleinskalige System

2.4.8.6 Flexibilität des DME-Reaktors

Die Flexibilität des DME-Reaktors wurde als ein entscheidender Systemparameter für die Kostenreduzierung identifiziert. Im Folgenden wird die Flexibilität des DME-Reaktors variiert. Der Einfluss auf die Kosten, die Speichergrößen, die Auslastung und die Abregelungsmengen in Abhängigkeit von der Mindestlast des DME-Reaktors wird ermittelt.

Im Ergebnis wurde ein starkes Kostensenkungspotenzial beobachtet, wenn der DME-Reaktor bei einem dynamischen Lastwechsel von 40 – 100 % flexibel betrieben werden könnte (vgl. Abbildung 86). Im Basisfall (d.h. 80 % Mindestlastbeschränkung) liegen die DME-Gestehungskosten bei 3,43 €/kg. Eine Flexibilitätserhöhung auf 40 % Mindestlast führt zu Gestehungskosten unter 3,2 €/kg. Es ist jedoch bekannt, dass ein dynamischer Betrieb von Destillationskolonnen sehr anspruchsvoll ist. Die technische und wirtschaftliche Machbarkeit eines flexiblen DME-Reaktors ist nicht Teil dieses Berichts.

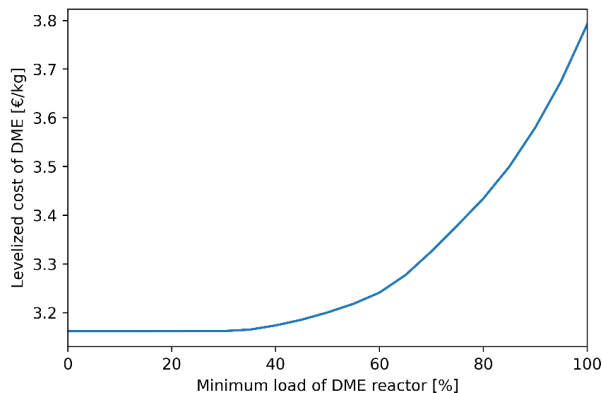


Abbildung 86: DME-Gestehungskosten als Funktion der Flexibilität des DME-Reaktors (abgebildet als Minimallast)

Die Mindestlastbeschränkung beeinflusst die optimale Systemauslegung, insbesondere die Größe der Speicher. Im Allgemeinen gilt: Je höher die Flexibilität, desto wichtiger wird der Batteriespeicher und desto unwichtiger wird der Wasserstoffspeicher. Dies lässt sich dadurch erklären, dass eine höhere Flexibilität den DME-Reaktor in die Lage versetzt, der Last des Elektrolyseurs zu folgen, wodurch ein Wasserstoff-Zwischenspeicher mehr und mehr obsolet wird. Potenziell kann die Komplexität des gesamten Prozesses mit einer erhöhten Flexibilität des DME-Reaktors deutlich verringert werden. Sie wirkt sich also nicht nur auf die Kostenreduktion aus, sondern erhöht auch die Freiheitsgrade im Anlagendesign. Die Speichergrößen in Abhängigkeit von der Mindestlastbeschränkung des DME-Reaktors sind in Abbildung 87 dargestellt.

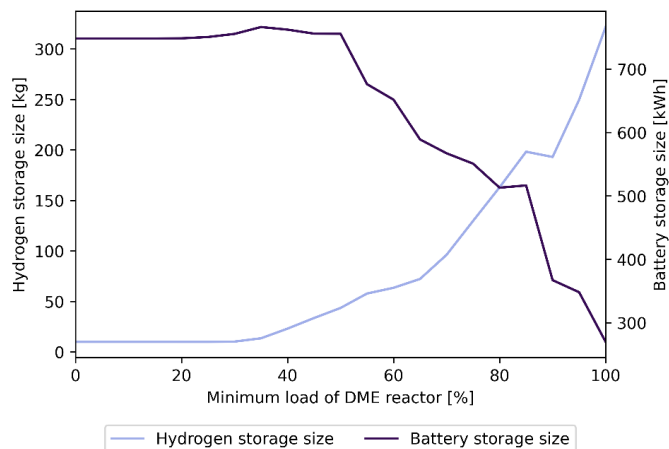


Abbildung 87: Speichergrößen (für Batterie und Wasserstoffspeicher) in Abhängigkeit von der Mindestlast des DME-Reaktors

Abregelungen treten in Zeiten hoher Stromerzeugung in Verbindung mit einem voll ausgelasteten System und vollen Speichern auf. Die Mindestlastbeschränkung wirkt sich

ebenfalls auf die abgeregelten Strommengen aus. Insbesondere kann die Abregelung bei einer Mindestlast unter 50 % drastisch reduziert werden (vgl. Abbildung 88).

Die durchschnittliche Last des Elektrolyseurs wird durch die Mindestlastbeschränkung kaum beeinflusst. Sie ist ziemlich konstant bei einem Lastniveau um 70 %. Ein voll flexibler DME-Reaktor führt jedoch zu einer durchschnittlichen Last von etwa 75 %. Mit anderen Worten: DME- und Elektrolyseur-Überkapazitäten werden benötigt, um mit dem intermittierenden Charakter der erneuerbaren Erzeugung umzugehen.

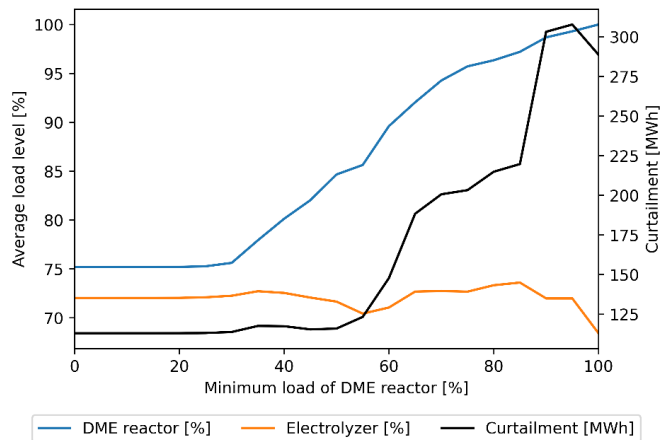


Abbildung 88: Durchschnittliches Lastniveau des Elektrolyseurs und des DME-Reaktors und daraus resultierende Kürzung in Abhängigkeit von der Mindestlast des DME-Reaktors

2.4.9 Vergleich der Ergebnisse im Rahmen des ALIGN-CCUS-Projekts

Parallel zu der in Arbeitspaket 5.3 durchgeführten Modellierung wurde auch im Arbeitspaket 4.2 eine techno-ökonomische Bewertung der DME-Produktion durchgeführt, allerdings aus einer anderen Perspektive und mit einem anderen Modellierungsansatz. Beide Bewertungen ergänzen sich in der jeweiligen Betrachtung des Energiesystems und liefern wertvolle Erkenntnisse. In diesem Abschnitt des Berichts werden die beiden Ansätze und ihre Ergebnisse verglichen und diskutiert.

Konzeptionell geht die Abschätzung im Arbeitspaket 4.4.2 von einem Energiesystem im Jahr 2050 aus, das fast vollständig auf erneuerbaren Energien aus Wind- und Sonnenenergie basiert und damit erhebliche ökologische und ökonomische Fortschritte für die DME-Produktion in zukünftigen Systemen vorwegnimmt. In Arbeitspaket 4.4.2 wird davon ausgegangen, dass eine großtechnische Wasserstoff-Infrastruktur bereits existiert. Die Infrastruktur umfasst Pipelines und großtechnische Wasserstoffspeicher. Der Fokus in Arbeitspaket 4.4.2 liegt auf der chemischen Prozesssimulation und -optimierung des DME-Prozesses, wobei die resultierenden Kosten für DME unter der Annahme eines Wasserstoffeinkaufspreises für das Jahr 2050 abgeschätzt wurden. Somit können die Ergebnisse als untere Grenze der DME-Produktionskosten angesehen werden.

Andererseits vergleicht die Arbeit aus Arbeitspaket 5.3 zwei Systemlayouts (kleines Inselsystem vs. großes, netzgekoppeltes System) unter Verwendung von linearen Optimierungsmodellen, die die Wasserstoff- und DME-Produktion einschließen (Zielfunktion ist die Minimierung der gesamten Systemkosten). Die techno-ökonomischen Parameter, die zur Beschreibung beider DME-Systeme in dieser Studie verwendet werden, sind für die nahe Zukunft gültig und berücksichtigen somit die derzeit ungünstigen Bedingungen für die (lokale) DME-Produktion. Das kleinskalige und das großskalige System unterscheiden sich grundlegend und weisen ökonomische und ökologische Kompromisse auf. Das kleinskalige Inselsystem hat eine eigene regenerative Stromversorgung und berücksichtigt das heutige detaillierte zeitliche Einspeiseprofil der regenerativen Stromerzeugung aus Wind und Sonne in Nordrhein-Westfalen, was zu geringeren Volllaststunden führt. Das großskalige System läuft kontinuierlich auf Grundlast und nutzt dabei Netzstrom, was mit CO₂-Emissionen und vergleichsweise hohen Stromkosten verbunden ist. Im Vergleich zu Arbeitspaket 4.4.2 können die Ergebnisse als obere Grenze der DME-Produktionskosten in der nahen Zukunft angesehen werden.

Die verschiedenen Konzepte sind in Abbildung 89 skizziert. Insellösungen, wie sie in Arbeitspaket 5.3 betrachtet werden, sind zu Beginn eines Infrastrukturaufbaus für die DME-Synthese erforderlich. Da die derzeitigen spezifischen Kosten für die Elektrolyseure hoch sind, könnten die DME-Produktionskosten durch hohe Betriebszeiten pro Jahr reduziert werden. Daher ist für kleinskalige Anlagen eine zusätzliche Batteriespeicherung und/oder Wasserstoffspeicherung möglicherweise sinnvoll, wie in Abschnitt 2.4.5 beschrieben. Für die großtechnische Produktion ist ein Stromnetzanschluss erforderlich. Da die Stromkosten entscheidend sind, ist zu beachten, dass sich die DME-Produktionskosten für einen industriellen Produzenten von denen eines Stromproduzenten unterscheiden, der erneuerbaren Strom speichern muss und geringere Strombezugskosten für die überbetriebliche Verrechnung berücksichtigen kann.

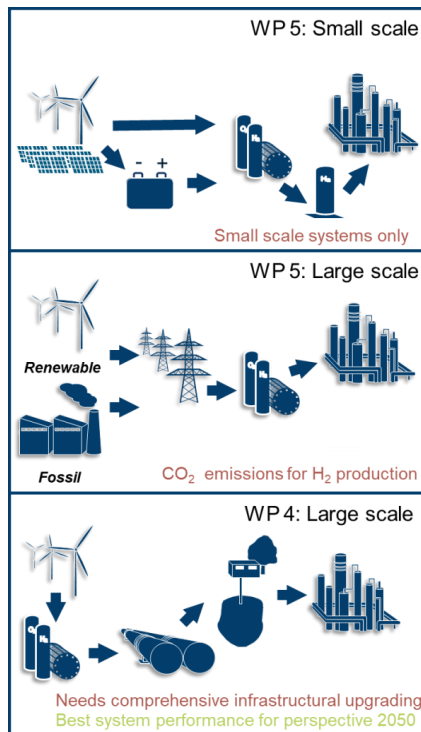


Abbildung 89: Prinzipielles Schema für die groß- und kleinskalige Produktion von DME in den Arbeitspaketen 4.4.2 und 5.3

2.4.9.1 Wasserstoffproduktionskosten

Die Wasserstoffkosten sind der entscheidende Parameter für die DME-Produktionskosten. Die beiden Ansätze verwenden unterschiedliche Methodiken zur Ermittlung der Wasserstoffkosten. Während im Arbeitspaket 4.4.2 ein Wasserstoff-Einkaufspreis für 2050 festgelegt wird, sind im Arbeitspaket 5.3 die Wasserstoff-Produktionskosten ein Zwischenprodukt des Systemmodells. Die Haupteinflussfaktoren für die Produktionskosten von Wasserstoff durch Elektrolyse sind der Strompreis und die Volllaststunden (Full Load Hours, FLH). Die Auswirkungen dieser beiden Schlüsselparameter werden durch eine Sensitivitätsanalyse für alle Parametersätze untersucht. Die Ergebnisse dieser Parameterstudie sind in Abbildung 90 dargestellt.

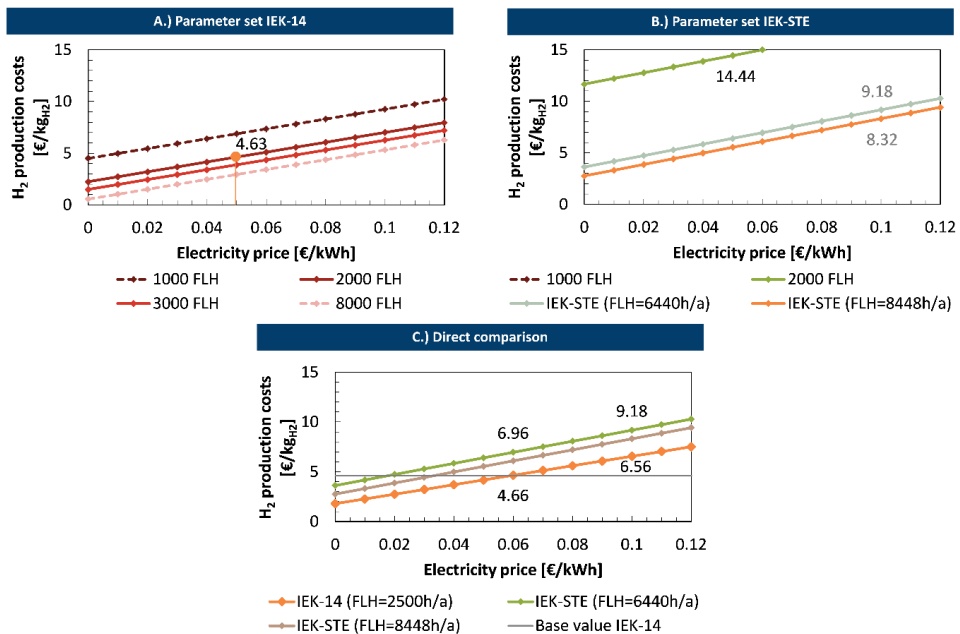


Abbildung 90: Abbildung der Wasserstoffproduktionskosten auf Basis verschiedener Parametersätze (A. IEK-14 Arbeitspaket 4.4.2, oben links und B. IEK-STE, Arbeitspaket 5.3 oben rechts, C. direkter Vergleich unten)

Die gewählten Referenzwerte für die jeweiligen Systemauslegungen sind in Abbildung 90 markiert. Die Wasserstoff-Einkaufskosten sind für die beiden Ansätze aufgrund der unterschiedlichen verwendeten Parametersätze verschieden. Die Parametersätze für die kleinskalige und großskalige Anlage sind ebenfalls in Abbildung 90 enthalten. Der betrachtete Strompreis von 0,0976 €/kWh führt zu Wasserstofferzeugungskosten von ca. 8,32 €/kgH₂ bzw. 9,18 €/kgH₂ für das großskalige bzw. kleinskalige System. Für die großskalige Systemauslegung stimmen die Wasserstoffproduktionskosten für die beiden Ansätze recht gut überein. Beim kleinskaligen System zeigen die unterschiedlichen Methoden zur Berechnung der Investitionskosten (Stack und BoP/System getrennt voneinander vs. Gesamtsystem) Auswirkungen auf die Wasserstoffgestehungskosten (10,9 €/kgH₂ Arbeitspaket 5.3 Ansatz vs. 9,18 €/kgH₂ Arbeitspaket 4.4.2 Ansatz). Darüber hinaus zeigt Abbildung 90C einen direkten Vergleich der verschiedenen Konfigurationen. In diesem Vergleich werden die unterschiedlichen Randbedingungen bezüglich Volllaststunden und Investitionskosten verwendet, um die Unterschiede in Abhängigkeit des angenommenen Strompreises herauszustellen. Die ermittelten Zahlen aus den verschiedenen Ansätzen (IEK-14 Arbeitspaket 4.4.2, oben links und IEK-STE, Arbeitspaket 5.3 oben rechts) finden sich auch in diesem direkten Vergleich wieder.

2.4.9.2 DME-Produktionskosten

Die geschätzten Produktionskosten für Wasserstoff haben einen großen Einfluss auf die DME-Produktionskosten. Neben den Wasserstoff- und CO₂-Bereitstellungskosten werden auch andere Kostenparameter (z. B. Kühlwasser) im techno-ökonomischen Modell berücksichtigt. Um die DME-Gestehungskosten der beiden Ansätze zu vergleichen, wurden die berechneten

Wasserstoffpreise aus dem Modell des Arbeitspaketes 5.3 als Eingangsdaten in das techno-ökonomische Modell aus Arbeitspaket 4.4.2 verwendet. Die Kosten für die DME-Synthese im großskaligen System belaufen sich im techno-ökonomischen Modell auf 2,99 €/LDE, während sie im linearen Optimierungsmodell bei 2,59 €/LDE liegen. Etwa die Hälfte der Unterschiede lassen sich durch zusätzliche Eingangsgrößen erklären, die im Modell des Arbeitspaketes 4.4.2 berücksichtigt wurden. Andere Parameter, die sich auf die Ergebnisse auswirken, sind z.B. Volllaststunden und Wirkungsgrad. Für das kleine System sind die DME-Gestehungskosten höher, aber die Abweichung zwischen den Ansätzen ist gering (3,98 €/LDE vs. 4,08 €/LDE).

2.4.9.3 Hauptannahmen und Ergebnisse der beiden Ansätze

Die Hauptannahmen, methodischen Hintergründe und Ergebnisse sind in Tabelle 32 zusammengefasst. Die Ergebnisse zeigen, dass selbst unter den derzeit ungünstigen Bedingungen ein Kostensenkungspotenzial beim Wechsel von regenerativ gespeisten kleinen Inselanlagen zu großen netzgekoppelten Anlagen besteht. Der Kostenvorteil beträgt ca. 36 %. Allerdings ist dieses System mit hohen CO₂-Emissionen verbunden. Implizit definieren die beiden Lösungen einen spezifischen CO₂-Reduktionsaufwand für den Systemansatz. Das kleine Inselsystem, das einen ersten Einstieg in ein DME-Synthesystem darstellen würde, bildet erwartungsgemäß die obere Grenze der DME-Gestehungskosten ab, die sehr hoch sind. Selbst bei einem großskaligen Produktionssystem wären die Produktionskosten derzeit mehr als doppelt so hoch wie bei konventionellem Diesel. Im Vergleich dazu besteht unter zukünftigen günstigen Bedingungen (2050) insbesondere für Stromerzeugung und Infrastruktur ein weiteres Kostensenkungspotenzial von ca. 32 % für die DME-Produktion, woraus sich die untere Grenze der Produktionskosten von 1,86 €/LDE ergibt. Beide Ansätze sind notwendig, um die Hürden und Verbesserungspotenziale eines DME-Synthesystems zu verstehen.

Tabelle 32: Hauptannahmen, methodischer Hintergrund und Ergebnisse aus Arbeitspaket 4.2 und Arbeitspaket 5.3

	Kleinskaliges System (kurz- bis mittelfristig)	Großskaliges System (langfristig)	Großskaliges System (kurz- bis mittelfristig)
Arbeitspaket	Arbeitspaket 5.3	Arbeitspaket 4.4.2	Arbeitspaket 5.3
Zeithorizont	Kurz- bis mittelfristig	2050	Kurz- bis mittelfristig
Aufgabenbereich	Heutige Obergrenze für die Produktion kleiner Mengen synthetischen DMEs ausschließlich aus erneuerbaren Energien.	Untere Grenze und theoretisches Minimum im Jahr 2050, wenn die großskalige Wasserstoffinfrastruktur Teil der erfolgreichen Energiewende ist.	Die heutige Obergrenze für die kontinuierliche Produktion großer Mengen an synthetischem DME.
CAPEX des Elektrolyseurs	2000 €/kW	500 €/kW	2000 €/kW
DME-Reaktor Größe	50 kW _{Ho} oder 6 kg/h	300 MW _{Hu} oder 37.45 t/h	520 MW _{Ho} or 59 t/h
Methodik	Lineares Optimierungsmodell unter Einbeziehung des lokalen Einspeiseprofils der erneuerbaren Energien PV und Wind auf Stundenbasis	Chemischer Prozesssimulationsansatz inkl. Kostenabschätzung basierend auf Turton et al. [142].	Lineares Optimierungsmodell
Volllaststunden	Elektrolyseur: 6440 h DME-Reaktor: 8460 hours <i>Die Auslastung ist ein Ergebnis des Optimierungsprozesses und liegt für alle Datenpunkte vor (vgl. Abbildung 81: Lastverhalten pro Stunde von (a) dem Elektrolyseur und (b)</i>	Elektrolyseur: 2500 h DME-Reaktor: 8000 h	Elektrolyseur: 8448 h DME-Reaktor: 8448 h <i>Kapazitätsauslastung wird als Modelleingabe spezifiziert</i>

	dem DME-Reaktor über den Zeitraum von einem Jahr)		
Stromkosten/preise	<i>Ergebnis der Optimierung</i> 0,1104 €/kWh	<i>Modell Eingangsgröße</i> 0,06 €/kWh <i>Strom für den Elektrolyseur</i> 0,0976 €/kWh <i>Strom für den DME-Reaktor</i>	<i>Modell Eingangsgröße</i> 0,0976 €/kWh
Wasserstoffkosten/preis	<i>Wasserstoffkosten können als Zwischenprodukt berechnet werden</i> 10,9 €/kg	<i>Modell Eingangsgröße</i> 4,6 €/kg <i>Kosten basieren auf Robinius et al. [143] unter der Annahme deutlich niedrigerer Elektrolyseurkosten und der Integration einer großflächigen Wasserstoffinfrastruktur im Jahr 2050. Kosten basieren auf [143] unter der Annahme deutlich niedrigerer Elektrolyseurkosten und der Integration einer großflächigen Wasserstoffinfrastruktur im Jahr 2050.</i>	<i>Wasserstoffkosten können als Zwischenprodukt berechnet werden</i> 8,3 €/kg
CO ₂ -Bereitstellungskosten	0,07 €/kg	0,07 €/kg	0,035 €/kg

Kosten für die Kühlwasserversorgung	Nicht betrachtet	0.0048 €/MJ	Nicht betrachtet
Berechnete DME-Gestehungskosten	3,43 €/kg_{DME} = 4,08 €/L_{DE}	1,49 €/kg_{DME} = 1,86 €/L_{DE}	2,18 €/kg_{DME} = 2,59 €/L_{DE}

2.4.10 Diskussion und Schlussfolgerung

In diesem Abschnitt wurden zwei generische Prozessketten mit unterschiedlichen Schlüsseleigenschaften entwickelt. Beide Konzepte wurden in ein lineares Optimierungsmodell übersetzt, das auf dem Open-Source-Framework Calliope basiert. Hier enthalten ist eine detaillierte Analyse hinsichtlich der Kosten für beide Konzepte und hinsichtlich der Emissionen für das großskalige System. Die Elastizitätsberechnungen identifizierten die wichtigsten Parameter, die für eine weitere Kostenreduktion verbessert werden könnten. Für das großskalige System sind das die Stromversorgungskosten, für das kleinskalige System ist es die Flexibilität (ausgedrückt als Mindestlast) des DME-Reaktors. Diese beiden Faktoren wurden einer weiteren Sensitivitätsanalyse unterzogen, um Kostensenkungspotenziale detaillierter aufzuschlüsseln. Zusätzlich könnte eine weitere Kostenreduzierung für das kleinskalige System durch die Verwendung des abgeregelten Stroms in anderen Prozessen erreicht werden. Der Bericht beinhaltet eine Zeitreihenanalyse der Abregelungen, um vier typische Abregelungsprofile zu identifizieren.

Aus wirtschaftlicher Sicht ist das großskalige System überlegen, auch bei eher hohen Stromkostenannahmen. Der Aufbau der Anlage ist recht einfach und überschaubar. Wenn Sauerstoff verkauft werden kann, können die Kosten weiter gesenkt werden. Der bei weitem einflussreichste Parameter sind die Stromversorgungskosten. Die DME-Gestehungskosten für das großskalige System können weiter reduziert werden, wenn dieser Parameter gesenkt wird. Das kleinskalige System ist insgesamt komplexer und enthält mehr Systemkomponenten. Infolge dieser Komplexität führt das kleinskalige System zu höheren Kosten, jedoch zeigt die Elastizitätsanalyse, dass das Kostensenkungspotenzial sehr vielfältig ist und somit mehrere Möglichkeiten bestehen.

Den niedrigen Produktionskosten steht gegenüber, dass das großskalige System mit dem heutigen Stromnetzmix nicht zur Treibhausgasreduzierung beitragen kann. Angesichts der Tatsache, dass der Kohleausstieg in Deutschland bis in die späten 2030er Jahre andauern wird, wird das großskalige System höchstwahrscheinlich noch für längere Zeit nicht in der Lage sein zur Treibhausgasreduzierung beizutragen.

Um mit der kleinskaligen Anlage nennenswerte Mengen DME zu produzieren, sind viele Inselanlagen erforderlich. Es ist denkbar, eine Containerlösung bereitzustellen und diese in höherer Anzahl zu betreiben. Diese könnten zum Beispiel von Energiegenossenschaften betrieben werden, die oft von der lokalen Bevölkerung finanziert werden, was ebenfalls die Akzeptanz solcher Projekte aktiv vorantreibt.

Die Herstellung von DME kann auch andere Ziele als die Reduzierung von Treibhausgasen verfolgen (z. B. Ruß- und NO_x-Reduktion oder einfache Energiespeicherung im großen Maßstab zur Notstromversorgung). Wenn das Hauptziel jedoch die Reduzierung von

Treibhausgasen ist, sollte DME ausschließlich aus erneuerbaren Stromquellen erzeugt werden. Dies garantiert, dass keine zusätzlichen Treibhausgase emittiert werden.

Es ist erwähnenswert, dass das Potenzial für Wind und PV in Deutschland im Vergleich zu anderen Standorten in der Welt eher gering ist. Es sollte Gegenstand weiterer Forschung sein, ob die in Europa entwickelten Technologien in andere Länder mit höherem erneuerbaren Potenzial exportiert werden können, auch um den produzierten synthetischen Kraftstoff zu reimportieren. Potenziell kann dies zu Synergieeffekten und guten Geschäftsmöglichkeiten für europäische Unternehmen mit großer Expertise auf diesem Gebiet (wie die ALIGN-Projektpartner) führen.

2.5 Stakeholder-Wahrnehmungen von CCUS in Deutschland und Rumänien WP 6 Sozialforschung

Die Stakeholder-Wahrnehmungen von CCUS in Deutschland und Rumänien waren Teil des Arbeitspaketes 6.3.1 des ALIGN-CCUS Projekts. Am Beispiel dieser Länder wurde die Wahrnehmung von Stakeholdern für unterschiedliche Entwicklungsstadien von CCUS verglichen. Den dazu gewählten Ansatz und die Ziele werden in Abschnitt 2.5.1 erläutert. Die Auswahl der Stakeholder (Abschnitt 2.5.2) sowie Ablauf (Abschnitt 2.5.3) und Auswertung (Abschnitt 2.5.4) werden in den genannten Abschnitten erläutert. In Abschnitt 2.5.5 werden Schlussfolgerungen für die Einbeziehung von Stakeholdern gezogen.

2.5.1 Ansatz und Ziele

In Deutschland existiert die technologische Entwicklung, die Forschung und die gesellschaftlichen Diskussionen über CCS seit mehr als zehn Jahren, so dass Deutschland als relativ fortschrittliches Land in Bezug auf CCS oder CCUS angesehen werden kann - allerdings sind empirische Daten zur Wahrnehmung von CCUS durch die Stakeholder rar. Im Gegensatz dazu befindet sich Rumänien in einem frühen Stadium der CCUS-Implementierung und es existieren keine Studien über die Wahrnehmung der Stakeholder in Bezug auf CCUS. Diese Wissenslücke bezüglich der Wahrnehmung der Stakeholder in den beiden europäischen Ländern sollte im ALIGN-CCUS Projekt geschlossen werden und zu einem Verständnis darüber führen, welche Faktoren für die öffentliche Debatte über CCUS relevant sind.

Die Identifizierung der Hauptthemen im Zusammenhang mit der CCUS-Entwicklung in Deutschland und wie sie sich in den Perspektiven der verschiedenen Stakeholder widerspiegeln, die Untersuchung der Unterschiede in den Wahrnehmungen (Entwicklungsstand und Erfahrungen, Zukunftsprognosen, Rollen und Verantwortlichkeiten) in beiden Ländern, die Bewertung des Akzeptanzniveaus für CCUS-Technologien und -Projekte aus Sicht der Stakeholder und die Identifizierung von Faktoren, die die öffentliche Akzeptanz in Deutschland und Rumänien beeinflussen wurden untersucht.

In einem zweistufigen Ansatz wurden zunächst Stakeholder in beiden Ländern identifiziert (Deutschland (n=15), Rumänien (n=17)), die anschließend anhand eines entwickelten Interviewprotokolls in halbstrukturierten persönlichen Interviews befragt wurden. Ausgewertet wurden die Interviews mit einer softwarebasierten Inhaltsanalyse.

2.5.2 Stakeholder-Identifikation in Deutschland und Rumänien

CCUS-Stakeholder werden üblicherweise definiert als "berechtigte Personen, die ein professionelles Interesse am Thema CCUS haben und in den Dialog eingebunden sind" [144]. Da sich das Entwicklungsstadium von CCUS-Projekten in Rumänien am Anfang befindet und daher nur wenige Personen ein professionelles Interesse am Thema CCUS haben, wurde die Definition von Stakeholdern erweitert auf "Personen oder Gruppen, die von den Zielen der Organisation betroffen sind oder diese beeinflussen können" [145]. Um die relevanten Stakeholder in Deutschland und Rumänien zu identifizieren, wurde eine Medienanalyse und eine Analyse sozialer Netzwerke durchgeführt.

2.5.2.1 Stakeholder in Deutschland

In einer Medienanalyse wurde eine Stichprobe von Artikeln, die in den letzten acht Jahren (2010-2018) in Deutschland veröffentlicht wurden, untersucht. Für die Sammlung der Zeitungsartikel wurde die Datenbank von ‚LexisNexis2‘ verwendet. Suchbegriffe waren 'CO₂' OR 'Kohlendioxid' kombiniert mit 'Nutzung' OR 'Recycling'. Im Ergebnis wurden 694 Artikel gefunden, von denen 251 Artikel für die Stakeholder-Identifikation verwendet wurden. In einer zweiten Suchanfrage wurden zusätzlich die Begriffen 'Carbon Capture Utilization and Storage' OR 'Carbon Capture, storage and Use' OR 'Carbon dioxide utilization' OR 'Carbon capture and utilization' OR 'Carbon capture and use' OR 'Carbon recycling' ausgewählt. Insgesamt wurden 51 Artikel als relevant bewertet. Zusätzlich wurde die Datenbank 'WISO' verwendet. Die hier verwendeten Suchbegriffe waren 'Carbon Capture Utilization and Storage' OR 'Carbon Capture, Storage and Use' OR 'Carbon dioxide utilization' OR 'Carbon capture and utilization' OR 'Carbon capture and use' OR 'Carbon recycling'. Es wurden 24 weitere Artikel identifiziert.

Nach der ersten Differenzierung innerhalb der Inhaltsanalysesoftware 'MAXQDA' wurde eine induktive Kategorisierung für die genannten Stakeholder vorgenommen. Es wurden sieben verschiedene Stakeholder-Typen identifiziert, die an der CCUS-Diskussion in Deutschland teilnehmen: Unternehmen, akademische Forschungsorganisationen, Umweltorganisationen, Wirtschaftsverbände, öffentliche Verwaltung, Kommunalverwaltung und Bundesregierung. Fast 60 % der identifizierten Stakeholder gehören zu Unternehmen. Die zweitgrößte Kategorie waren akademische Forschungsorganisationen mit einem Anteil von 20 %. Politische und Umweltakteure waren im CCUS-Mediendiskurs in Deutschland eher gering vertreten. Für die Kategorien Unternehmen und akademische Forschungsorganisationen wurde eine soziale Netzwerkanalyse durchzuführen, um die relevantesten Stakeholder für die Durchführung der Interviews zu identifizieren. Gesucht wurden sozialen Verbindungen zwischen den Stakeholdern über Indikatoren wie Joint Ventures, gemeinsame Forschungsprojekte, Finanzierung und die Gesamtzahl der Erwähnungen für jeden Stakeholder in den Medien sowie gemeinsame Start-ups [146].

Durch die Betrachtung der Gesamterwähnungen wurden 159 akademische Stakeholder und 366 Unternehmen identifiziert. In einem zweiten Schritt wurden die Stakeholder gesucht, die sich am meisten in Forschungsprogrammen oder -projekten engagierten. Insgesamt wurden 54 Forschungsprogramme oder -projekte identifiziert, an denen beide Stakeholder-Kategorien beteiligt waren. Nach der Untersuchung der Forschungsprogramme und Joint Ventures verblieben 13 relevante akademische Forschungseinrichtungen und 18 Unternehmen.

Um die Verteilung aus der Mediendiskussion abzubilden, wurden sechs Interviews mit Unternehmen geführt, fünf mit akademischen Forschungseinrichtungen, gefolgt von einem Interview mit einem politischen Stakeholder auf Bundesebene und zwei mit Umweltorganisationen. Zusätzlich wurde ein Stakeholder aus einer politisch-öffentlichen Beratungsorganisation nachträglich hinzugefügt.

2.5.2.2 Stakeholder in Rumänien

Bei der Auswahl relevanter Medienquellen wurde das SATI-Instrument (Audience and Traffic on Internet Websites in Romania) auf der BRAT (brat.ro)-Plattform verwendet, einer Non-Profit-Organisation der Medienbranche, die gemeinsame Standards und Maßnahmen zur Messung von Leistungskennzahlen für Medienprodukte verwendet. Bei dem SATI-Instrument

handelt es sich um eine zertifizierte Plattform, die das Publikum von Webseiten misst und sich dabei auf Indikatoren für die Nutzung von Webseiten konzentriert. Es wurden Informationen in Bezug auf Quellencharakteristika (Traffic/Monat, Volumen der Impressionen und Visualisierungen) bereitgestellt und soziodemografische Profile des Publikums identifiziert, das die ausgewählten Online-Medienangebote konsumiert. Im nächsten Schritt wurden die Online-Medien-Webseiten mit dem höchsten Besuchsvolumen und den meisten Impressionen für Oktober 2019 aus den folgenden Kategorien identifiziert: allgemeine Nachrichten (14 Webseiten), Nachrichten und Analysen (17 Webseiten), Wirtschaft und Finanzen (14 Webseiten), Wissenschaft und Technologie (2 Webseiten), lokale Nachrichten und Analysen (9 Webseiten), Gesundheit und Körperpflege (6 Webseiten). Auf die Webseiten aus diesen Kategorien wurde zugegriffen und das Suchmaschinentool für die folgenden Schlüsselwortsuchen in rumänischer Sprache verwendet: CCUS, CCS, CO₂-Technologien Abscheidung Nutzung Transport, Carbon Capture Transport Storage, Carbon Storage, Carbon Utilization, Carbon Capture, Carbon Transport, CO₂ Capture, CO₂ Storage, CO₂ Transport, CO₂ Utilization, CO₂ Emissionen, CO₂ Technologien. Insgesamt wurden 85 Nachrichten identifiziert, von denen 61 Artikel für die Analyse ausgewählt wurden. Bei der Auswahl wurden die inhaltliche Relevanz und das Veröffentlichungsdatum (2009 und 2019) berücksichtigt.

Bezogen auf die Stakeholder in Rumänien zeigten die Ergebnisse unserer Analyse, dass folgende Akteure involviert sind: Wissenschaftler, Forscher, Forschungsinstitute, die Ministerien für Wirtschaft und Energie (im Zusammenhang mit dem Zugang zu europäischen Fonds), Energieproduzenten, Unternehmen oder große Konzerne.

Folglich wurden fünf Kategorien von Stakeholdern für die Stichprobe berücksichtigt: zwei Vertreter öffentlicher Institutionen (einschließlich zentraler und lokaler öffentlicher Verwaltung im Energie- und Umweltsektor), vier Vertreter von Forschungsorganisationen (Universitäten und Forschungszentren), zwei Vertreter öffentlicher Unternehmen aus dem Bereich der Energieproduktion, fünf Vertreter von Industrieunternehmen (darunter ein großer CO₂-Emittent, eine Fabrik, ein Transportunternehmen, eine Ölgesellschaft), und vier Mitglieder der Zivilgesellschaft (ein Gewerkschaftsvertreter, ein NGO-Vertreter, lokale und zentrale Medienvertreter).

Es wurde eine signifikante Anzahl von Stakeholdern aus dem industriellen Bereich und dem Energiesektor berücksichtigt, da diese insbesondere bei der Initiierung von CCUS-Projekten eine wichtige Rolle spielen. Diese speziellen Perspektiven wurden mit Perspektiven von Befragten abgeglichen, die weniger über CCUS-Technologien informiert waren, aber ein größeres Potenzial haben, die öffentliche Meinung hinsichtlich der Akzeptanz oder Ablehnung von CCUS-Projekten zu beeinflussen (z. B. lokale und zentrale Massenmedien). Im Hinblick auf die territoriale Verteilung der Befragten in Rumänien war ein Ziel bei der Auswahl der Stichprobe die Einbeziehung der beiden für CCUS-Projekte relevanten Gebiete, das Gebiet Oltenia (mit Energieakteuren mit hohem CO₂-Ausstoß) bzw. das Gebiet Galati (ein Unternehmen, das ein großer CO₂-Emittent ist).

2.5.3 Stakeholder-Interviews und Interviewanalyse

2.5.3.1 Ablauf des Interviews

In einem ersten Schritt wurde zusammen mit den Projektpartnern aus WP 6 ein gemeinsames Interview-Skript als Leitfaden für beide Länder entwickelt, das in wesentlichen Teilen identisch war. Um die länderspezifische Situation Deutschlands und Rumäniens zu berücksichtigen, wurden einige Teile umformuliert und spezifiziert. Aufgrund der länderspezifischen Situation

lag der Fokus im ersten Abschnitt in Deutschland auf der Debatte CCS vs. CCU, während in Rumänien die Fragen allgemeiner gehalten waren. Darüber hinaus enthielt das Skript in beiden Fällen einen interaktiven Teil, der aus Gründen der Effektivität und Relevanz gewählt wurde.

Der Leitfaden enthielt Empfehlungen für die Durchführung des Interviews: das Verfahren zur Kontaktaufnahme mit den Befragten und das Einholen ihrer Zustimmung, das Verfahren zur Datenerhebung, Methoden zur Aufzeichnung des Gesprächs, die Phasen des Interviews, Gesprächsthemen und Aufgaben für die Befragten, die geschätzte Dauer für jeden Abschnitt und Anweisungen für die Technik der Arbeit mit Karten.

Das Interviewprotokoll bestand aus sechs Teilen: (1) Stand der Entwicklung von CCUS; (2) Erfahrungen mit CCUS-Projekten; (3) Einbeziehung von Interessenvertretern in die CCUS-Entwicklung; (4) die Wahrnehmung der Befragten in Bezug auf Kosten, Risiken, Nutzen und Akteure von CCUS; (5) die Wahrnehmung der Befragten in Bezug auf öffentliche Akzeptanz, Unterstützung und Opposition gegenüber CCUS-Projekten; (6) abschließende Fragen und Kommentare. Alle Interviews wurden aufgezeichnet und anschließend transkribiert.

2.5.3.2 Interviewanalyse in Deutschland und Rumänien

Nach der Transkription aller Interviewaufnahmen wurden die Transkriptdokumente anonymisiert. In beiden Ländern wurden die Interviewtranskripte mit Hilfe von Inhaltsanalyse-Software analysiert; MAXQDA für die deutschen Interviews und Atlas.ti für die rumänischen Interviews. Die während der Interviews gesammelten Daten wurden einer thematischen Inhaltsanalyse (Analyse der in jedem Abschnitt des Interviews gemachten Angaben, Suche nach Ähnlichkeiten und Unterschieden zwischen den Befragten) sowie einer Häufigkeitsinhaltsanalyse (Häufigkeit der Themennennungen) unterzogen.

2.5.4 Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Analysen der in Deutschland und Rumänien durchgeführten Stakeholder-Interviews vorgestellt.

2.5.4.1 Stakeholder-Wahrnehmungen in Deutschland

Stand der Entwicklung von CCUS

CCUS wurde von allen Befragten in Deutschland zum einen als "End-of-Pipe-Technologie" und zum anderen über Carbon Capture Technologien definiert. Alle Stakeholder (n=15) verknüpften den Prozess der CO₂-Abscheidung mit den Grundstoffindustrien Zement, Kalk und Glas, also mit Sektoren mit prozessbedingtem CO₂.

Insgesamt haben nur fünf Stakeholder die Abkürzung CCUS in ihren Antworten auf die Frage nach der Definition von CCUS verwendet. Die restlichen zehn Befragten definierten CCUS, indem sie ihr Verständnis von CCS und/oder CCU erläuterten.

Die Mehrheit der Befragten in Deutschland (n=13) stimmte den Argumenten und Schlussfolgerungen des IPCC-Berichts und der Notwendigkeit von CCS als notwendige Brückentechnologie für Netto-Null-Emissionsszenarien und für die Erreichung der globalen Klimaziele zu. CCS, also die Speicherung von CO₂ in unterirdischen Lagerstätten, Kavernen oder Gasspeichern (n=15) oder in verfestigter Form neben Kraftwerken (n=5), sollte nach

Ansicht der Befragten in Deutschland dann eingesetzt werden, wenn die Gesellschaft eine signifikante Reduktion der CO₂-Emissionen in kurzer Zeit anstrebt. Da es sich bei CCS um eine dauerhafte Speicherung von CO₂ in unterirdischen Lagerstätten mit einer Mindesttiefe von 600 Metern (n=2) handelt, hat es nach Ansicht der Befragten in Deutschland eine höhere Klimawirkung als CCU (n=2).

Während die Mehrheit der Befragten in Deutschland (n=12) die Dauer der Speicherung mit einer mittelfristigen Speicherung von 50, 100 oder 200 Jahren beschreibt, diskutieren einige eine langfristige Speicherung innerhalb der unterirdischen Lagerstätten (n=3), definiert als "dauerhaft, [...] tausend, zehntausend Jahre, hunderttausend Jahre". Neben dem wahrgenommenen Vorteil der dauerhaften Speicherung und dem Stand der Technologiebereitschaft als bereits etablierter Prozess (n=12) wurden die Speicherkapazitäten von CCS-Technologien als dritter Hauptdiskussionspunkt genannt (n=3).

Während die Mehrheit der Befragten in Deutschland (n = 11) angab, CCS als Möglichkeit zu sehen, industrielles CO₂, das bei der Stromerzeugung, der Energiekonversion oder bei chemischen Prozessen anfällt, abzuscheiden [...] und CO₂ zu speichern, waren vier Befragte skeptisch gegenüber der CCS-Einführung im Allgemeinen. Diese Akteure brachten CCS-Technologien mit Kohlekraftwerken und der auf fossilen Brennstoffen basierenden Industrie in Verbindung. Neben der kritischen Verknüpfung von fossiler Industrie und CCS, bezog sich ein weiterer kritischer Punkt auf die Behinderung von Entwicklungen anderer Innovationen (n=2). Hier wurde erwähnt, dass die Finanzierung und politische Unterstützung von CCS-Technologien die Entwicklung von kohlenstofffreien Technologien behindern wird. Darüber hinaus wurden die Argumente der hohen Kosten, der fehlenden Lebenszyklusökonomie und der Sicherheit der Lagerung in Endlagern über Jahre und Generationen (n=2) hinzugefügt. Als weitere Argumente gegen CCS-Technologien und -Projekte wurden ethische Argumente (n=2) genannt, die darauf hinweisen, dass der Mensch nicht das Recht hat, neue unterirdische Lagerstätten zu erschließen.

Insgesamt wurde von den Befragten ein relativ negatives Image und Narrativ für CCS-Technologien in Deutschland dargestellt. Der Hauptgrund für die negative Einschätzung kann mit den CCS-Erfahrungen in Deutschland aus dem Jahr 2012 in Verbindung gebracht werden (n=11). Die meisten der in Deutschland befragten Stakeholder zeichneten ein pessimistisches oder kritisches Bild für die zukünftige CCS-Implementierung in Deutschland aufgrund der fehlenden gesellschaftlichen Akzeptanz (n=15), äußerten aber die Notwendigkeit einer neuen Diskussion über CCS nach dem Kohleausstieg (n=13).

CCU wurde von den befragten Stakeholdern in Deutschland (n=15) positiver bewertet. Insgesamt wurde CCU als Nutzung von CO₂ im Sinne der Dekarbonisierung und in der Regel in Verbindung mit erneuerbaren Energien, in chemischen oder chemisch-physikalischen Prozessen definiert. Es wurde erwähnt, dass CO₂ bei CCU als Ressource in der chemischen Industrie eingesetzt wird.

Darüber hinaus wurde CCU im Sinne des Verwertungspfades der Lebenszyklus-Wirtschaft definiert, wo es für neue Produkte wiederverwendet wird (n=8). Als Hauptpfade wurden die Weiterverwendung von CO₂ als Kohlenwasserstoff für die Luftfahrt, den Landverkehr oder die Schifffahrt oder die Nutzung von CO₂ als Basisressource für neue Produkte wie Polymere (n=9), Dämmstoffe (N=2), Betonersatzstoffe (n=15) oder synthetische Kraftstoffe (Power-to-X) (n=15) genannt.

Zweifel an der Effizienz bestimmter CCU-Produkte, z.B. aufgrund der unterschiedlichen Bindungskapazitäten (n=9) wurden geäußert und speziell Power-to-X-Anwendungen wurden kritisiert (n=9). Im Gegensatz dazu befürworteten sechs Stakeholder die Herstellung von synthetischen Kraftstoffen auf Basis von CO₂, weil durch Power-to-X-Technologien CO₂ ohne große infrastrukturelle Veränderungen und ohne neue Vertriebswege schneller reduziert werden könne. Das heißt, Tankstellen und Automobilindustrie müssen sich nicht kurzfristig umstellen oder revolutionäre Veränderungen erwarten (n=4). CCU und Power-to-X könnten wesentliche Komponenten für die postfossile Zukunft sein und eine Kreislaufwirtschaft für Power-to-X-Technologien durch die Verknüpfung mit CO₂-Abscheidung aus der Luft (direct air capture, DAC) notwendig sein (n=6). Ohne DAC wird Power-to-X nur eine sinnvolle Zwischenlösung sein, wie von zwei Befragten angegeben. Jede Anwendung für CCU sollte individuell hinsichtlich der ökologischen Nutzung im Rahmen von LCA geprüft werden. Weitere kritische Fragen zu Power-to-X-Technologien betrafen die Kapazität und die Nachfrage nach CCU-Produkten. Zwei Befragte äußerten sich besorgt über die Menge der Produkte, die für einen signifikanten Einfluss auf den Klimawandel benötigt würden.

Position innerhalb der CCUS-Kette und Erfahrungen in CCUS-Projekten

Insgesamt waren fünf Stakeholder ausschließlich innerhalb der CCUS-Kette tätig, während nur zwei ausschließlich im Bereich CCS tätig waren. Von den Befragten waren acht innerhalb der gesamten CCUS-Kette in den Bereichen Umsetzung, Forschung und Entwicklung sowie Mediation zwischen den Akteuren tätig. Aufgrund der länderspezifischen Situation bei der CCS-Implementierung in Deutschland gaben die Befragten an, sich an internationalen Projekten wie Enhanced Oil Recovery (EOR) in den USA zu beteiligen (n=3). Weitere vier arbeiteten hauptsächlich an chemischen Prozessen wie Power-to-X-Technologien. Innerhalb der CCU-Kette bestätigten die Befragten (n=3) die Ambitionen der Industrie, organische Abfälle für Produktionsprozesse im Rahmen von Kreislaufwirtschaftskonzepten zu nutzen. Die meisten Stakeholder (n=12) gaben an, Erfahrungen in industriellen CCUS-Projekten zu haben. Während die meisten an CCU-Projekten arbeiteten (n=11), hatte eine Minderheit Erfahrungen mit CCS-Projekten in Deutschland vor 2012 (n=4).

Insgesamt sahen die Befragten einen Bedarf an integrierter und verstärkter Stakeholder-Kooperation für die CCUS-Implementierung und einen Bedarf an weiterer Forschung (n=12). Das meistgenannte Argument für die derzeit zurückhaltende Stakeholder-Kooperation bezog sich auf Vorbehalte aufgrund vergangener Erfahrungen zwischen der organisierten Zivilgesellschaft und der Industrie. Sie sahen in der Stakeholder-Beteiligung und -vernetzung nach wie vor eine Unterstützung für akzeptanzfördernde Maßnahmen. Nur drei Stakeholder bewerteten die derzeitige Stakeholder-Kooperation innerhalb von Forschungsprojekten oder der CCUS-Community als vorteilhaft und ausreichend. Diese Stakeholder äußerten sich zu den guten Vernetzungsaktivitäten ihrer Unternehmen und Geschäftsführungen sowie zu den effektiven Kooperationen innerhalb der Projekte. Speziell für CCU betonten alle Befragten den hohen Grad an sektoralen Kopplungseffekten als wichtig.

Während Forschungsprojekte nach Ansicht der meisten Befragten eine ausreichende Förderung durch die EU bzw. die Bundesregierung erhalten, muss die Förderung von Pilotanlagen nach Ansicht einiger Befragter verbessert werden. Darüber hinaus forderten alle Befragten neue Gesetze bezüglich einer DIN-Norm für synthetische Kraftstoffe und dem ETF-System. In Bezug auf das ETF-System wurde vor allem die Frage aufgeworfen: "Wer bekommt die Kredite?" Eine weitere Forderung nach einer neuen Gesetzgebung, betraf die EEG-

Umlage. Befragte aus Unternehmen bezweifelten, für unzählige Millionen einen neuen Motor oder eine neue Anlage zu bauen, weil sie danach noch mehr KWK- und EEG-Umlage zahlen müssten. Insgesamt teilten sieben Stakeholder die Einschätzung, dass im Kontext der CCUS-Entwicklung Politik und Realität derzeit nicht zusammenpassen.

Bewertung der Stakeholder für die CCUS-Implementierung

Alle Befragten stimmten zu, dass Unternehmen und akademische Forschungseinrichtungen als Initiatoren für eine erfolgreiche CCUS-Projektimplementierung sehr wichtig sind (n=15), sowohl in Bezug auf Forschung und Technologie, als auch in Bezug auf die Finanzierung. Politische Akteure wurden als zweitwichtigste Gruppe für die CCUS-Projektumsetzung eingeschätzt aufgrund ihrer Verantwortung für die politischen Rahmenbedingungen (n=14), Anreize (n=1) und die Notwendigkeit von Regelungen. Die Öffentlichkeit wurde als dritter wichtiger Stakeholder für eine erfolgreiche CCUS-Projektumsetzung eingestuft (n=13). Auf der einen Seite hielten die Befragten die Öffentlichkeit als Kunde für wichtig, weil Unternehmen Technologien nicht entwickeln, um das Klima zu retten, sondern um Geschäfte zu machen. Auf der anderen Seite sei die Öffentlichkeit als Vorreiter für die zukünftige technologische Ausrichtung und Entwicklung wichtig. Interessanterweise wurde die Öffentlichkeit auch von einigen der befragten Stakeholder als weniger wichtige Gruppe für die Projektumsetzung eingeschätzt (n=4), z.B. wegen der kleinteiligen öffentlichen Diskussion über CCUS (n=2).

Umweltorganisationen wurden von den Befragten in Deutschland (n=12) als vierte wichtige Stakeholdergruppe für eine erfolgreiche CCUS-Projektumsetzung eingeschätzt. Sie wurden als verlängerter Arm der Zivilgesellschaft und als relevant für die Verhinderung von Protesten wahrgenommen. Zwölf der Befragten teilten die Ansicht, dass Umweltverbände keine "Robin Hoods" sind, sondern ihre eigene Agenda und ihr eigenes Interessenfeld verfolgen. Wirtschaftsverbände wurden als weniger wichtige Stakeholdergruppe für eine erfolgreiche CCUS-Projektumsetzung eingeschätzt (n=12). Neun Befragte begründeten ihre Einstufung für die Wirtschaftsverbände mit ihren bisherigen Erfahrungen im Rahmen von Forschungsprojekten oder ihrem Wissen über frühere Projekte.

Hinsichtlich der wahrgenommenen Unterstützung der Stakeholder-Gruppen für die CCUS-Implementierung gaben alle Befragten an, dass sie die Industrie und akademische Forschungsorganisationen als die unterstützendsten Stakeholder für die weitere CCUS-Entwicklung in Deutschland sehen (n=15). Politische Akteure wurden als unterstützend, aber zurückhaltend angesehen (n=13), bedingt durch die negativen Erfahrungen mit der CCS-Implementierung in Deutschland im Jahr 2012. Die befragten Stakeholder gaben hier an, dass mehr Engagement im Rahmen des öffentlichen Dialogs erforderlich wäre (n=11). Gleichzeitig sahen die befragten Stakeholder aber auch die Öffentlichkeit (n=12) und Umweltorganisationen (n=15) als die kritischsten Stakeholdergruppen im Kontext der CCUS-Umsetzung. Als Erklärung für die kritische Haltung der Umweltorganisationen gegenüber CCUS wurde das Misstrauen gegenüber der konventionellen Industrie genannt (n=9). Als weitere Gründe nannten die Befragten die differenzierteren Interessen wie Klimaschutz, Umweltschutz, Bürgerinitiativen für Grundwasser oder die Abholzung.

Vorteile von CCUS

Während der Interviews in Deutschland wurden die Stakeholder nach den Vorteilen der CCUS-Implementierung gefragt. Die meistgenannten Vorteile der CCUS-Implementierung sind in Abbildung 91 dargestellt. Alle Befragten stimmten den Vorteilen der CCUS-Implementierung

der Reduzierung der industriellen Verschmutzung (n=15), dem Klima- und Umweltschutz (n=15) und der Aufrechterhaltung der industriellen Tätigkeit (n=14) zu. Klima- und Umweltschutz wurden als wichtigster Nutzen für alle Teile der Gesellschaft bewertet. Die Power-to-X-Technologie könnte dazu einen hohen Beitrag leisten, da sie nicht nur die CO₂-Emissionen, sondern auch NO_x und andere Schadstoffe reduziert (n=5).

Der mit der CCUS-Implementierung verbundene Wettbewerbsvorteil wurde von zwölf Befragten in Deutschland als Hauptnutzen der CCUS-Implementierung bewertet, da CCUS-Technologien aus Sicht der Befragten zu einem Innovationsschub führen würden. Die Schonung von Ressourcen wurde von zehn Befragten als wesentlicher Vorteil des CCUS-Einsatzes genannt. Darüber hinaus nannten neun Befragte sektorale Kopplungseffekte als Vorteil der CCUS-Implementierung, da die Installation von CCUS nicht nur die Zusammenarbeit zwischen den produzierenden Industrien, sondern auch zwischen der erneuerbaren Industrie und der Öl- und Gasindustrie verbessern würde. Sieben Befragte nannten die Steigerung der regionalen Wertschöpfung als Hauptvorteil der CCUS-Implementierung, aber dies wurde auch von acht Stakeholdern angezweifelt, weil die Implementierung von CCUS auch die regionale Produktion in Frage stellen könnte. Darüber hinaus wurde von vier Befragten der Nutzen einer Reduktion von ETF-Zertifikaten diskutiert, obwohl es derzeit keine anrechenbaren ETFs für CCUS-Technologien gibt. Die Befragten nannten außerdem Kreislaufwirtschafts- und Sektorkopplungseffekte als zusätzlichen Nutzen der CCUS-Implementierung.

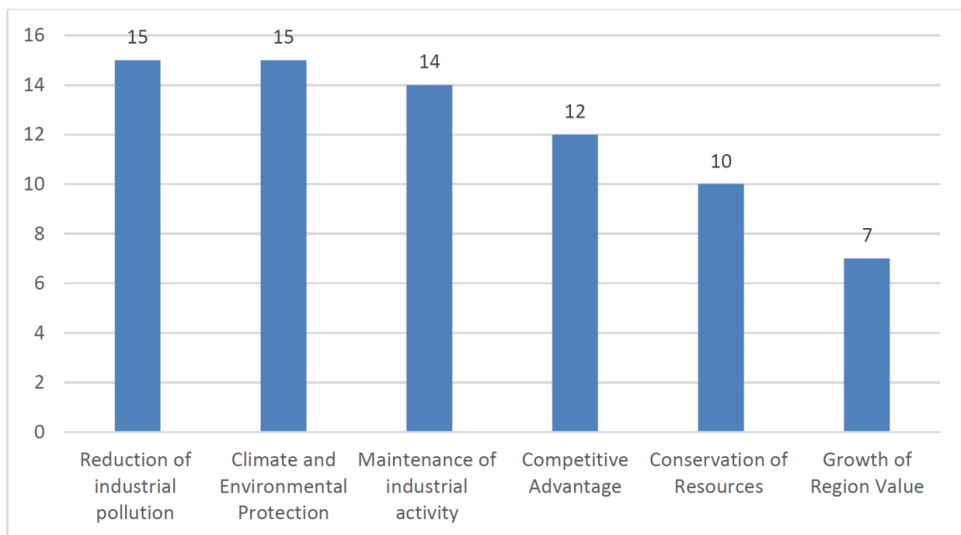


Abbildung 91: Häufigkeit der von den Stakeholdern in Deutschland genannten Vorteile der CCUS-Implementierung

Risiken von CCUS

Ähnlich wie bei den Vorteilen der CCUS-Implementierung wurden die Stakeholder in Deutschland auch nach den Risiken der CCUS-Implementierung gefragt. Die am häufigsten genannten Risiken der CCUS-Einführung sind in Abbildung 92 dargestellt.

In Deutschland wurden als Risiken des Einsatzes von CCUS am häufigsten eine fehlende öffentliche Akzeptanz und die lange Dauer von Infrastrukturprojekten genannt. In Bezug auf eine fehlende öffentliche Akzeptanz wurde festgestellt, dass das Bewusstsein für die Notwendigkeit von CCUS wichtig für die Akzeptanz in der Bevölkerung wäre. Die lange Laufzeit von Infrastrukturprojekten wurde von der Mehrheit als Risiko bei der Umsetzung von CCUS gesehen, da ungewiss sei, ob sich die Investitionen in CCUS-Projekte auszahlen würden.

Weitere Risiken betrafen das Framing von CCUS, den internationalen Wettbewerb in unsicheren Märkten und CO₂-Preisgestaltung. In Bezug auf das Framing von CCUS wurde betont, dass für die öffentliche Diskussion über CO₂ in Deutschland ein neues Narrativ notwendig sei, in dem CO₂ als Ressource und nicht als Gift dargestellt wird. Insgesamt äußerten alle die Wichtigkeit einer fairen Verteilung von Risiken und Nutzen zwischen allen Teilen der Gesellschaft. Als wichtiger verwandter Aspekt wurde die nationale Förderung von Industrieprojekten genannt (n=5).

Insgesamt wurde CCU in Bezug auf die Sicherheitsrisiken im Vergleich zu CCS als weniger riskant wahrgenommen (n=15). Andere Befragte wiesen darauf hin, dass CCU den Vorteil hat, dass keine CO₂-Pipelines benötigt würden (n=4) und dass, selbst wenn in Zukunft Pipelines für eine großflächige CCU-Implementierung benötigt würden, Studien belegen, dass ein Austritt von CO₂ kein Risiko für Pipelinesysteme darstellt (n=12). Im Gegensatz zu CCU sahen die Stakeholder die wahrgenommenen Sicherheitsrisiken für CCS als rational an (n=12).

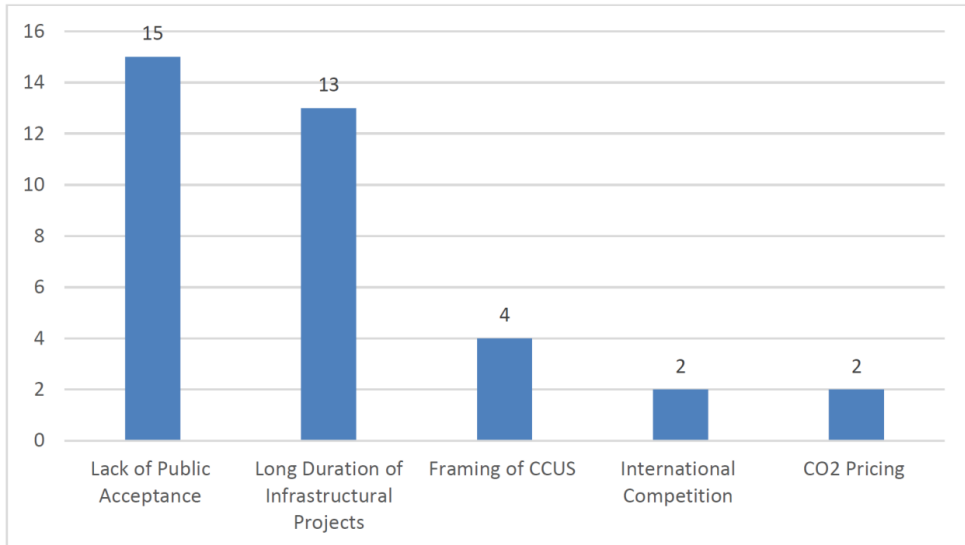


Abbildung 92: Häufigkeit der Stakeholder-Erwähnung von Risiken für die CCUS-Implementierung in Deutschland

Kosten von CCUS

Im letzten Teil der interaktiven Aufgabe wurden die Stakeholder zu den Kosten der CCUS-Implementierung befragt. Alle Stakeholder (n=15) stimmten darin überein, dass CCUS-Projekte hohe finanzielle Kosten verursachen, u.a. durch den Einsatz von erneuerbaren Energien und für die benötigten Anlagentechnologien. In Bezug auf die Implementierung von CCU oder CCS waren zwei der Befragten der Meinung, dass ein Business Case für CCU in einem kurzen Zeitrahmen möglich wäre, während vier Befragte erwähnten, dass CCS-Implementierungen unter den derzeitigen Rahmenbedingungen nicht rentabel seien, da die konventionellen Technologien viel billiger sind (n=4). Für CCS in Kombination mit DAC gaben die Befragten an, dass mit Kosten von 800 bis 1000 € pro Tonne zu rechnen sei (n=3). Ohne direkte Abluftreinigung, werden die Kosten etwa 1000 € pro Tonne betragen (n=3). Hinsichtlich zusätzlicher Investitionskosten, z.B. für Logistik und Transport, waren die meisten Stakeholder der Meinung, dass diese vernachlässigt werden können, da CCUS-Technologien neben den Abscheideseiten implementiert werden sollten (n=13).

Wichtigkeit einer öffentlichen Diskussion über CCUS

Fast alle Befragten (n=12) betonten die Notwendigkeit einer neuen öffentlichen Diskussion und eines neuen Narrativs für CCUS. Das am häufigsten genannte Argument für ein neues Narrativ für CCUS bezog sich auf die Entscheidung im Jahr 2019 für einen Kohleausstieg in Deutschland. Nach dieser Entscheidung würde die CCS-Implementierung nicht im Lichte der Kohleproduzenten gesehen und eher mit industriellen Prozessen (n=12) verknüpft. Darüber hinaus erklärten zwei Stakeholder die geringe öffentliche Akzeptanz für CCS mit einer allgemeinen Technologieskepsis in Deutschland, im Gegensatz zu anderen europäischen Ländern wie den Niederlanden oder Norwegen. Die geringere Verbreitung der Medienberichterstattung über CCS in Deutschland wurde damit erklärt, dass alle deutschen

Bundesländer, die über potenzielle Speicherseiten verfügen, CCS per Gesetz ablehnen (n=5). Die Zurückhaltung der Politiker bei der Unterstützung der CCS-Implementierung im Zusammenhang wurde mit den gescheiterten Verhandlungen für CCS im Jahr 2012 erklärt.

Im Gegensatz zu CCS wurde der öffentliche Widerstand gegen CCU von den Befragten in Deutschland als gering bis nicht vorhanden wahrgenommen (n=14), da das CO₂ wiederverwendet wird. Als Hauptargument für die eingeschränkte Medienberichterstattung über CCU wurde die Komplexität des Themas genannt (n=10). Einige Befragte verwiesen auf die Fridays For Future-Proteste (n=3). Darüber hinaus sollte CCUS nach Ansicht einiger Befragter als Ergänzung zu erneuerbaren Energien (n=9) oder im Sinne von Klimaneutralität und Netto-Null-Emissionen (n=4) kommuniziert werden, um ein neues Framing und Narrativ für die CCUS-Technologie in der deutschen Öffentlichkeit zu schaffen.

Herausforderungen und Chancen für die CCUS-Implementierung

Als wesentliche Herausforderungen für die CCUS-Umsetzung in Deutschland wurden von den Befragten die hohen Kosten, die mit der CCUS-Umsetzung verbunden sind, die politischen Rahmenbedingungen und die Finanzierung genannt (vgl. Abbildung 93). Bezüglich der Finanzierung erwähnten die Befragten (n=3), dass mehr und erweiterte Förderungen für Pilotanlagen und eine Projekt-Pipeline benötigt werden. Zwei Befragte nannten weitere F&E-Aktivitäten als Herausforderung für die CCUS-Umsetzung zwei weitere die Überarbeitung des bestehenden deutschen Gesetzes und drei weitere die Forderung nach einem neuen Kohlenstoffspeichergesetz. Ebenso existiert kein potenzieller Business Case für CCS-Technologien (n=4).

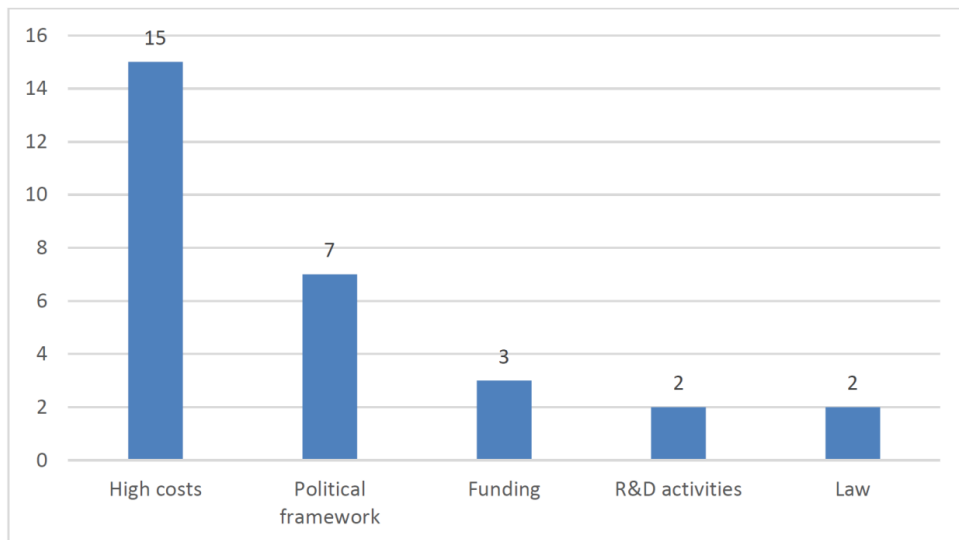


Abbildung 93: Häufigkeit der von den Stakeholdern in Deutschland genannten Herausforderungen für die CCUS-Implementierung

Wesentliche Chancen für eine CCUS-Umsetzung sahen die Befragten in der Integration von Ökobilanzen in die Energiediskussion und in der Entwicklung innovativer CCU-Anwendungen (siehe Abbildung 94), vor allem in Bezug auf Luftfahrt, Schwerlastverkehr und Schiffsverkehr. Darüber hinaus könnten Power-to-X-Anwendungen Chancen für Deutschland schaffen, da die

größentechnische Umsetzung synthetischer Kraftstoffe keine Umstellung des Versorgungssystems erfordert und zu einer schnelleren Reduktion des CO₂ in der Atmosphäre führen würde (n=2). Eine weitere Chance für CCU-Implementierungen ist die Wasserstoffproduktion (n=4). Die größte Chance für CCS-Implementierungen wurde in einer sogenannten europäischen Lösung gesehen, die die norwegische Geschichte der alten Salzkavernen beinhaltet (n=8).

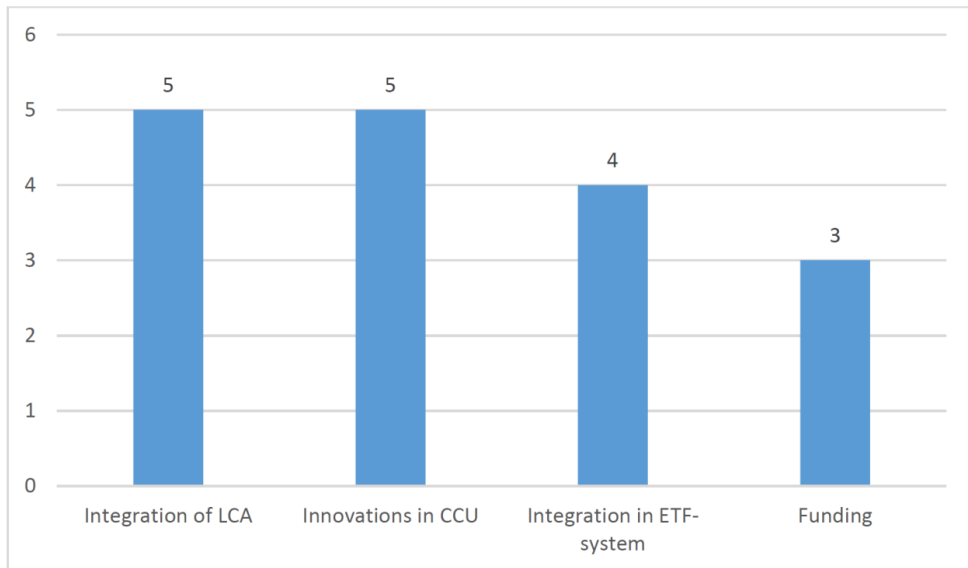


Abbildung 94: Häufigkeit der von den Stakeholdern genannten Chancen für die CCUS-Implementierung in Deutschland

Wahrnehmungen der Stakeholder zur Akzeptanz von CCUS

Alle Befragten waren sich der mangelnden öffentlichen Akzeptanz in Deutschland als nicht-technisches Risiko für die CCUS-Implementierung bewusst (n=15). Im Gegensatz zu CCS wurde CCU von allen Befragten mit einer hohen öffentlichen Akzeptanz bewertet (n=15). Sie betonten die Rolle der Medien für die öffentliche Unterstützung bzw. die Ablehnung von CCS oder CCU. In Bezug auf CCS wurden negative Medienartikel, die z.B. Assoziationen mit einem atomaren Endlager (n=5) herstellten, als ein Faktor bewertet, der die Opposition der deutschen Öffentlichkeit gegen CCS-Technologien verstärkt hat. Im Gegensatz dazu wurde CCU in den Medien positiver und als Strategie zur Vermeidung von CCS (n=1) beschrieben. Ein wesentlicher Vorteil von CCU wurde darin gesehen, dass Politiker mit einem Vertrauensbonus in der Öffentlichkeit unterstützen werden (n=15). Auf der anderen Seite gingen die meisten der Befragten davon aus, dass seit 2012 kein Politiker mehr CCS unterstützen würde (n=12). Außerdem würden Umweltorganisationen, als ein weiterer wichtiger vertrauenswürdiger Stakeholder, auch nicht für CCS Partei ergreifen (n=14). Innerhalb der CCU-Produktkette wurden Power-to-X-Technologien aufgrund geringer Bindungskapazitäten (n=13) mit der geringsten öffentlichen Akzeptanz bewertet. Eine Erklärung wurde mit dem Argument

gegeben, dass die Deutschen ihr Auto lieben und daher die Diskussion über Kraftstoffe sehr emotional sei (n=2). Im Gegensatz zu synthetischen Kraftstoffen seien andere CCU Produkte weniger emotionalisiert und schwieriger zu verkaufen, weil sie teurer sind (n=1).

Außerdem wurden die Befragten nach Strategien zur Akzeptanzgestaltung gefragt. Die Faktoren, die die öffentliche Akzeptanz für die CCUS-Implementierung in Deutschland erhöhen könnten, sind in Abbildung 95 dargestellt. Die öffentliche Unterstützung wurde dabei am häufigsten genannt. Der am zweithäufigsten genannte Faktor war die Notwendigkeit eines neuen Narrativs, während der am dritthäufigsten genannte Faktor die Transparenz zwischen den verschiedenen Stakeholdern und der Öffentlichkeit war. Zusätzlich sahen fünf Befragte das Bewusstsein für CCUS als Minderungsstrategie für den Klimawandel als wichtigen Faktor, der die öffentliche Akzeptanz für die Umsetzung von CCUS erhöhen könnte (n=5).

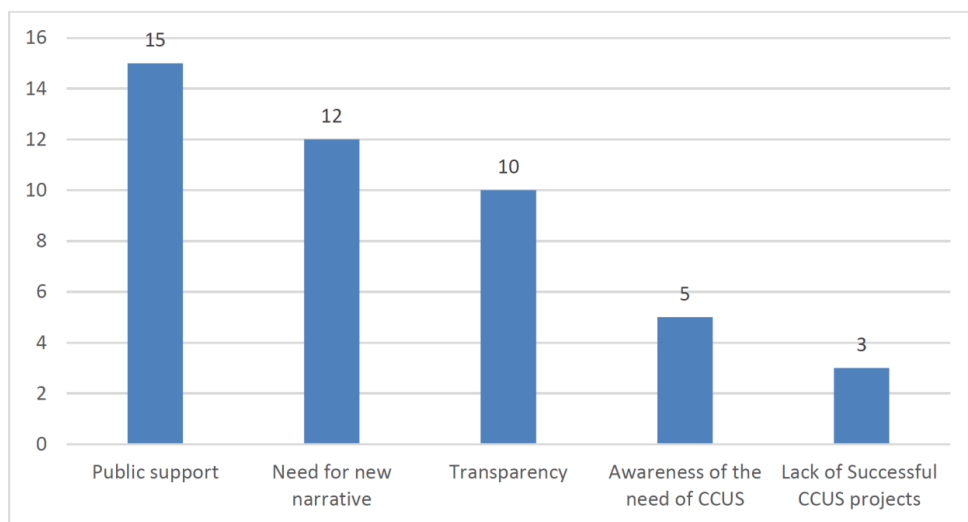


Abbildung 95: Häufigkeit der Nennungen der Stakeholder von Faktoren, die die öffentliche Akzeptanz für die Implementierung von CCUS in Deutschland erhöhen könnten

2.5.4.2 Stakeholder-Wahrnehmungen in Rumänien

In Rumänien lag der Fokus der Stakeholder-Interviews nicht auf der Frage, ob die Befragten für oder gegen CCUS sind, da frühere Forschungsdaten eher einen Zustand der Unentschlossenheit und des Mangels an Initiative gezeigt hatten. Gleichzeitig wurde bisher keine Opposition gegenüber CCUS im öffentlichen Raum geäußert, weder von spezialisierten Akteuren (Unternehmen oder Vertretern öffentlicher Institutionen), noch von Vertretern der Zivilgesellschaft (einschließlich NGOs und Massenmedien). Daher konzentrierten sich die Stakeholder-Interviews in Rumänien darauf, wie die Befragten CCUS verstehen, wie sie die Entwicklung dieses Bereichs wahrnehmen, auf welche Weise(n) sie in potenzielle CCUS-Projekte involviert sind und wie sie den allgemeinen Bekanntheitsgrad und die Akzeptanz der Öffentlichkeit wahrnehmen.

Die Entwicklung des CCUS-Feldes und die Beteiligung der Akteure

Der erste Abschnitt des Interviews bestand aus der Definition von CCUS und der Diskussion über den Stand der CCUS-Entwicklung in Rumänien. Mehrere Befragte (n=8) gaben an, dass sich der Stand der CCUS-Entwicklung in Rumänien am Anfang befindet. CCUS-Technologien befinden sich in einer experimentellen Phase und werden in den Laboren der Universität (z. B. Polytechnische Universität, Bukarest; Babes Bolyai Universität, Cluj) eingesetzt und derzeit in geringerem Umfang von großen Industrieunternehmen oder großen kohlebetriebenen Energieerzeugern in Betracht gezogen. Der größte Teil der CCUS-Initiativen stützt sich auf europäische Fonds

Der Bereich CCUS wurde als abhängig von europäischen Projekten und Richtlinien beschrieben, die die zu befolgenden Regeln und die notwendige Finanzierung (oder zumindest einen großen Teil davon) bieten können. Auch Partnerschaften mit Ländern, die in diesem Bereich weiter fortgeschritten sind, wurden als wichtiger Faktor angesehen. Norwegen, die Niederlande und Spanien wurden als gute Beispiele im Zusammenhang mit CCUS genannt, während Länder in Südosteuropa als überhaupt nicht an CCUS beteiligt beschrieben wurden. In Bezug auf die öffentlichen Einrichtungen war die Wahrnehmung mehrerer Befragter, dass CCUS in Rumänien keine Priorität hat (n=8):

Obwohl mehr als die Hälfte der Befragten (n=9) auf die Notwendigkeit hinwies, die CO₂-Emissionen in Rumänien zu senken, zeigten die Interviews, dass ein begrenztes Engagement seitens der Behörden und der industriellen Akteure wahrgenommen wird (n=9). Einige Befragte (n=8) schlugen Ideen vor, um die Entwicklung des CCUS-Bereichs in Rumänien zu beschleunigen. Ein Teil dieser Ideen bezog sich auf den Bereich Normen und Gesetze. Einige Befragte (n=5) betonten die Notwendigkeit von Zwang zur Umsetzung von Maßnahmen zur Verringerung der CO₂-Emissionen, entweder durch die Erhöhung des Preises von Zertifikaten, durch Gesetze und Verordnungen oder durch die Einstellung der Vergabe von Zertifikaten und die Schaffung eines Fonds für CCUS-Projekte. Eine weitere Idee war die Verwendung eines schrittweisen Ansatzes zur CCUS-Implementierung.

Einige Befragte aus dem Forschungsbereich (n=3) betonten die Wichtigkeit von Forschungsprojekten (vor allem internationale Projekte), die den Wissenstransfer unterstützen. Die meisten Befragten (n=12) drückten ihre persönliche Unterstützung für CCUS aus, auch wenn ein potenzielles CCUS-Projekt auf Schwierigkeiten stoßen würde.

Mehrere Befragte in Rumänien (n=8) äußerten die Präferenz, mit den größten CO₂-Emittenten (im Energiebereich, Kohlekraftwerke) oder industriellen Akteuren (ebenfalls große CO₂-Emittenten) in Rumänien zu beginnen, um das Problem der CO₂-Emissionen am stärksten anzugehen.

Die Perspektiven bezüglich der Entwicklung von CCUS-Projekten in den nächsten 10 Jahren wurden gleichermaßen optimistisch (n=8) als auch pessimistisch (n=7) eingeschätzt. Einige der optimistischen Vorhersagen, die von den Befragten aus dem Forschungssektor und von kleinen Unternehmen geäußert wurden, bezogen sich eher auf Pilotprojekte als auf die tatsächliche Umsetzung von groß angelegten CCUS-Projekten. Andere optimistische Antworten, die von Medienvertretern, aber auch von einem Forscher geäußert wurden, erklärten, dass die formalen internationalen Vereinbarungen in der Regel Mittel und Maßnahmen beinhalten, die eingehalten werden müssen.

Die pessimistischen Meinungen stützten sich einerseits auf das wahrgenommene mangelnde Interesse der Entscheidungsträger, andererseits auf fehlende finanzielle Mittel und logistische Schwierigkeiten.

In der Kategorie Nutzungspräferenz wurde Enhanced Oil Recovery (EOR) am häufigsten genannte (n=4), gefolgt von der Nutzung von CO₂ in/für Gewächshäuser, die Mineralwasserproduktion, die Entwicklung von Baumaterialien, nicht nachhaltige Produkte, die CO₂ eliminieren, Düngemittel in der Landwirtschaft und die Bierproduktion mit jeweils einer Nennung.

Erfahrungen in CCUS-Projekten und Bedenken

Im zweiten Abschnitt des Interviews wurden die Erfahrungen der Befragten in CCUS-Projekten und ihre beruflichen Anliegen abgefragt. Die Befragten äußerten unterschiedliche Bedenken in Bezug auf die CCUS-Kette (CO₂-Abscheidung, -Transport, -Nutzung, -Speicherung). Zum Beispiel wurde für die Abscheidung betont, dass in Rumänien das Ziel von Pilotanlagen zur CO₂-Abscheidung eher darin besteht, industrielle Funktionen aufrechtzuerhalten, anstatt moderne neue Anlagen zu bauen (und somit ist Rumänien aus strategischer Sicht im Vergleich zu anderen Ländern weniger entwickelt) (n=3). Bezüglich des Transportaspekts der CCUS-Kette gibt es, da in Rumänien noch kein CCUS-Großprojekt geplant ist, noch verschiedene Optionen (u.a. Transport mit Schiffen, als Alternative zum Straßen- oder Pipelinetransport). Bezüglich des Lagerungsaspekts der CCUS-Kette erwähnten einige Befragte (n=4), werden derzeit unter Forschern Alternativen, wie z. B. Enhanced Oil Recovery (EOR) diskutiert. Während EOR in den USA als eine ausgereifte Technik gilt, stellt sie in Europa und in Rumänien eine neuere Alternative dar. Die befragten relevanten industriellen Akteure (z. B. große Ölgesellschaften) zögerten, ein EOR-Pilotprojekt zu entwickeln.

Das Sicherheitsniveau für den Standort der CO₂-Speicherung wurde zwar von einigen Befragten (n=5) als hoch eingeschätzt, doch gibt es nach Ansicht der Befragten in Rumänien noch zwei ungelöste Aspekte, erstens die langfristige Sicherheit der CO₂-Lagerstätten und zweitens der fehlende Nutzen für die große Menge an CO₂, die dauerhaft gespeichert und nicht wiederverwendet werden kann. Bei der Diskussion um die Sicherheit der CO₂-Lagerung gaben einige wenige Befragte (n=3) an, dass Leckagen aus den Lagerstätten weiterhin ein Risiko darstellen. Während der Diskussion über die Speicherung wurde das Thema der CO₂-Nutzung als Alternative zur Speicherung von einigen Befragten (n=7) angesprochen, ausschließlich von Befragten, die entweder über Fachwissen im Bereich industrieller Prozesse verfügen oder an CCUS-Projekten beteiligt sind. Diese Befragten erwähnten, dass die Nutzung von CO₂ bevorzugt wird, dass aber die Möglichkeiten zur CO₂-Nutzung noch unterentwickelt sind und dass das meiste abgeschiedene CO₂ nicht wiederverwendet werden kann.

Herausforderungen für die CCUS-Entwicklung

Im dritten Abschnitt des Interviews wurden die Befragten in die hypothetische Situation versetzt, ein CCUS-Projekt zu entwickeln. Die wichtigsten Herausforderungen dafür bezogen sich auf drei Aspekte: Finanzierung, Regulierung und öffentliche Wahrnehmung und Akzeptanz (siehe Abschnitt 2.5.3.1).

Die am häufigsten genannte Herausforderung war der Aspekt der Finanzierung, der sich auf die hohen Kosten von CCUS-Projekten bezog und darauf, dass diese nicht durch eigene Ressourcen der Unternehmen gedeckt werden können, es aber dafür noch keine vollständige Finanzierungslösung gibt (n=12). Jedes CCUS-Projekt, würde eine bedeutende Investition mit

einem sehr langsamen Ertrag bedeuten. Unter diesen Bedingungen zog es der größte Teil der industriellen Akteure vor, die Einführung dieser Projekte zu verschieben. Logistische Hindernisse wurden als weniger wichtig wahrgenommen, während kompetente Humanressourcen nach Meinung der Befragten eine wichtige Rolle spielen, aber in gewissem Maße fehlen (n=3). Für die CCUS-Entwicklung bestünde ein Bedarf an multidisziplinären Teams (z. B. Chemiker, Geologen, Energiespezialisten).

Bei der Diskussion über die Regulierung und die Politik, die die CCUS-Entwicklung in Rumänien beeinflussen, wurden mehrere Probleme genannt. Der am häufigsten erwähnte Aspekt (n=10) war die fehlende Entscheidungsfindung auf den Führungsebenen (Regierungsebene, Management der Unternehmen, Management der Energieunternehmen).

Ein Befragter aus dem Forschungssektor gab an, dass im privaten Sektor die Unternehmen (bei denen es sich oft um multinationale Unternehmen handelt) nicht an der Entwicklung von CCUS-Technologien in Rumänien interessiert seien, weil die Entwicklung von Technologien von ihren Zentralen in einem anderen Land koordiniert wird, die beabsichtigen, in Innovationen zu investieren, die leichter zu kontrollieren sind. Daher sind sie nicht daran interessiert, Partner in einem europäischen Forschungsprojekt mit Sitz in Rumänien zu sein.

In Bezug auf die öffentliche Wahrnehmung als mögliches Hindernis waren einige Befragte (n=3) der Ansicht, dass die CCUS-Technologien in Konkurrenz zu Energie aus erneuerbaren Quellen wahrgenommen werden. Eine weitere wichtige Herausforderung bei der Umsetzung eines CCUS-Projekts war die Mobilisierung durch NGOs, die gegen CCUS seien (n=4).

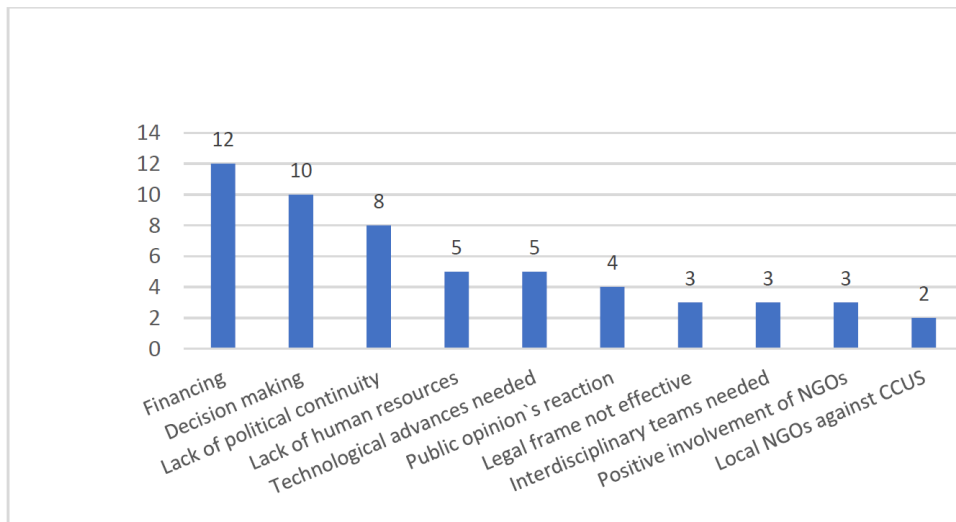


Abbildung 96: Häufigkeit der von den Stakeholdern in Rumänien genannten Herausforderungen für die CCUS-Implementierung

Wichtigkeit der mit CCUS verbundenen Akteure und Vorteile von CCUS

Die meisten der Befragten (n=15) identifizierten unter den wichtigsten Akteuren für CCUS in Rumänien das Umwelt- und das Energieministerium sowie das Management von

Industrieanlagen/Energieerzeugern. Andere Akteure, die als wichtig angesehen wurden waren Spezialisten (Techniker, Geologen, Ingenieure), lokale Gemeinden, die Öffentlichkeit, Massenmedien und Ölfirmen.

Die Vorteile von CCUS-Projekten spiegelten unterschiedliche Perspektiven wider. Der wichtigste Nutzen war die Reduzierung der CO₂-Emissionen gemäß internationaler Vereinbarungen, die von neun Befragten auf Platz 1 und von zwei weiteren Befragten auf Platz 2 oder 3 gesetzt wurde. Die Fortführung/Aufrechterhaltung der Tätigkeit für einige industrielle Akteure wurde von vier Befragten auf Platz 1 und von sechs weiteren Befragten auf Platz 2 und 3 gesetzt. Andere Vorteile, die identifiziert wurden, waren der Wegfall der Kosten für die grünen Zertifikate, die von fünf Befragten auf Rang 2 oder 3 gewählt wurden, und die Erhaltung der Arbeitsplätze - von sieben der Befragten auf Rang 2 oder 3 gesetzt.

Die Notwendigkeit, Informationskampagnen zu entwickeln und zu starten erschien als einer der am häufigsten genannten erleichternden Faktoren für die Erzeugung öffentlicher Unterstützung für CCUS, in Anbetracht des geringen Niveaus an öffentlichen Informationen in rumänischer Sprache. Andere Faktoren, die den Prozess der Implementierung von CCUS-Projekten in Rumänien nach Ansicht der Interviewteilnehmer potenziell unterstützen könnten, bezogen sich auf das Verständnis der Industrie, dass eine Anpassung an die EU-Vorschriften notwendig und kritisch sei, und dass die Erhöhung von CO₂-Steuern problematisch wäre (siehe Abbildung 97).

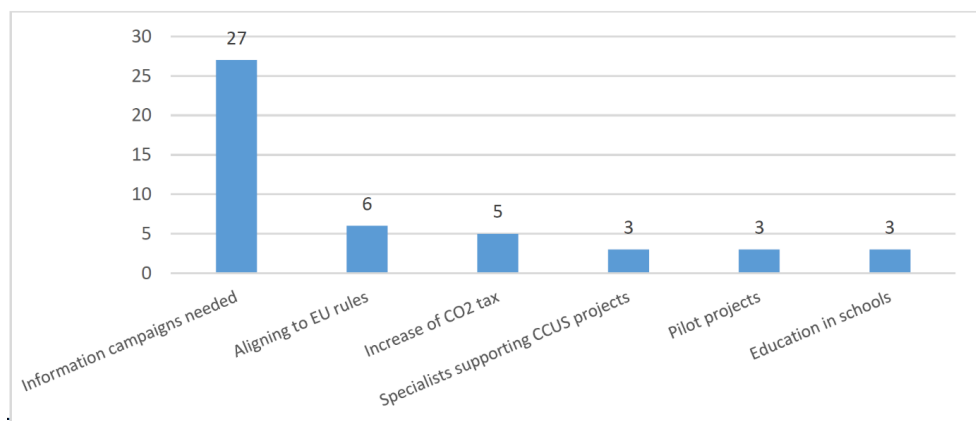


Abbildung 97: Häufigkeit der von den Stakeholdern in Rumänien genannten Aspekte für die CCUS-Unterstützung

Risiken und Kosten von CCUS-Projekten

Die genannten Risiken von CCUS-Projekten waren mit den Aspekten der Lagerung und des Transports verbunden, bei denen trotz Überwachungsmechanismen davon ausgegangen wurde, dass Leckagen mit negativen Folgen auftreten könnten. So wurden Leckagen aus Pipelines oder Lagerstätten und mögliche Unfälle im Zusammenhang mit der CO₂-Abscheidung zusammen mit der Beeinträchtigung der Sicherheit der Einwohner von einigen der Befragten (n=6) an erster Stelle genannt (siehe Abbildung 98). Weitere Risiken waren unzureichende finanzielle Mittel für die Fertigstellung des Projekts, eine unerwartete Verlängerung der Arbeiten und Konflikte zwischen den beteiligten Akteuren. Bei der Einstufung der Risiken mit den Medienvertretern wurden einige Beispiele von Krisenkommunikation (z.B.

die Schiefergas-Kommunikationskrise im Jahr 2013) bei Industrieprojekten diskutiert (n=3), mit der Betonung, dass die Krisen durch einen Mangel an Information der Öffentlichkeit verursacht wurden.

In Bezug auf die Kosten des CCUS-Projekts gaben die meisten Befragten (n=12) dies als höchstes Risiko an. Kosten, die häufig genannt wurden, waren die Innovation, die für die Implementierung von CCUS erforderlich ist, zusätzliche Investitionen, Änderungen am Industriestandort, lange Dauer der Arbeiten und Koordinationsschwierigkeiten zwischen den Partnern.

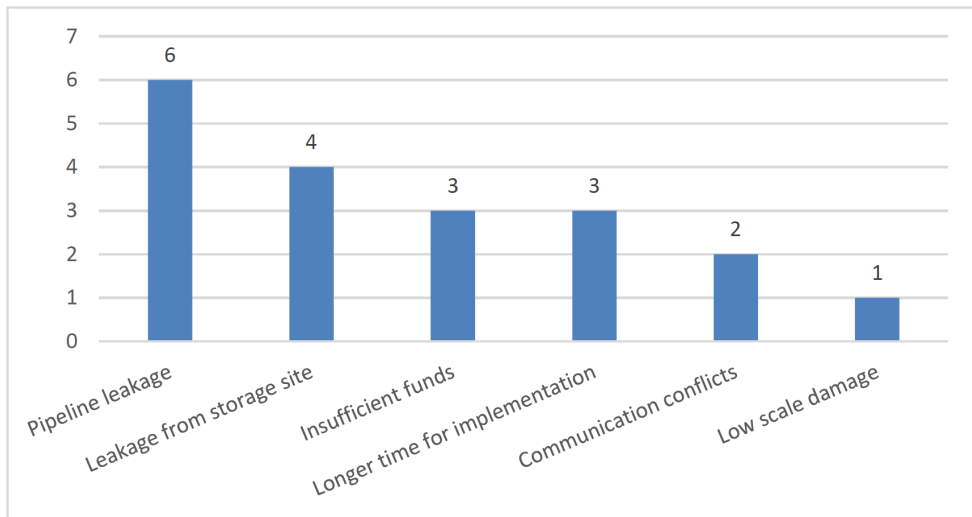


Abbildung 98: Häufigkeit der Stakeholder-Erwähnung von Risiken für die CCUS-Implementierung in Rumänien

Bekanntheitsgrad und Bedarf an CCUS-Kommunikation in der allgemeinen und lokalen Öffentlichkeit

Der fünfte Abschnitt der Befragung zielte darauf ab, den wahrgenommenen Bekanntheitsgrad und die potenzielle Akzeptanz von CCUS in der allgemeinen Öffentlichkeit in Rumänien zu ermitteln. Nach Ansicht der Befragten ist eine Untersuchung der Meinung der breiten Öffentlichkeit zu CCUS oder der Kommunikation über CCUS in Rumänien nie durchgeführt worden, mit Ausnahme der "Getica"-Projekte (n=3). Daher fehlen Umfragen, die den gegenwärtigen Stand der öffentlichen Meinung untersuchen. Alle Befragten (n=17) bewerteten den Informationsstand der breiten Öffentlichkeit als sehr begrenzt.

Gleichzeitig wurde die lokale Öffentlichkeit von den Befragten in den beiden potenziellen CCUS-Gebieten als nicht sehr offen für Innovationen (Gebiet Galati, n=1) oder als gestört durch einige Industrieprojekte, die das Gebiet verschmutzen (Gebiet Oltenia, n=2), bewertet. Diese Eigenschaften könnten in Zukunft der Grund für eine ablehnende Reaktion bei der Umsetzung von CCUS-Projekten sein, wie einige Befragte glaubten (n=2). Die meisten der Befragten (n=11) betrachteten die öffentliche Akzeptanz als ein sehr wichtiges Element für die Entwicklung von CCUS und gaben mehrere Empfehlungen in dieser Hinsicht. Um eine lokale

Akzeptanz zu erreichen, sollten CCUS-Projekte beispielsweise in Verbindung mit der lokalen Gemeinschaft präsentiert werden, da sie eine Rolle bei der Verbesserung der Infrastruktur oder der lokalen wirtschaftlichen Situation spielen (n=9).

Die Einbindung lokaler Stakeholder - z.B. Mitglieder der lokalen Gemeinden, NGOs - könnte eine Lösung sein, um die Sichtbarkeit von CCUS-Projekten zu erhöhen und das Thema auf die öffentliche Agenda zu setzen (n=8). Die Rolle der NGOs wurde als wichtig in diesem Prozess eingeschätzt, da sie die Hauptverbindung zwischen den Projektträgern und der lokalen Öffentlichkeit seien. Große und intensive Informationskampagnen wurden von mehr als der Hälfte der Befragten (n=10) als ein sehr notwendiges Element angesehen, das die Umsetzung eines CCUS-Projekts einleitet

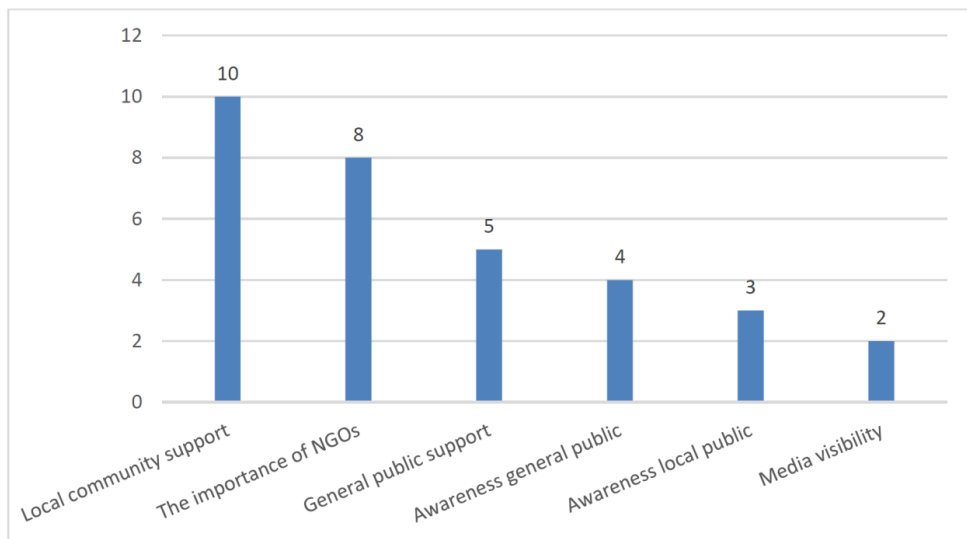


Abbildung 99: Häufigkeit der Nennungen der Stakeholder von Faktoren, die die öffentliche Akzeptanz für die Implementierung von CCUS in Rumänien erhöhen könnten

Überblick über die wichtigsten Faktoren und Themen

Die wichtigsten Faktoren und Themen, die bei den Interviews in Rumänien identifiziert wurden, sind in Abbildung 100 dargestellt. Die Ziele, die industriellen CO₂-Emissionen im Zusammenhang mit der Dekarbonisierung der Wirtschaft und der Produktion von Energie aus erneuerbaren Quellen zu verringern, führten zu verschiedenen Optionen für CCUS und einer kontinuierlichen Verbesserung der technologischen Innovation im CCUS-Bereich. Diese Fortschritte wurden durch institutionelle und organisatorische Strategien (EU-geförderte Projekte, Erfahrungsaustausch, Vernetzung) stimuliert. Unter formellen und informellen Bedingungen (grüne Zertifikate und EU-Vereinbarungen, Geschäftsmöglichkeiten) beeinflussen fördernde Faktoren und Herausforderungen die Entwicklung von CCUS-Projekten: fehlende Finanzierung, mangelnde Beteiligung und fehlende Managemententscheidungen sind die größten Herausforderungen, während die Unterstützung von Experten, erhöhte Preise für Zertifikate und öffentliche Informationskampagnen die Chancen für die CCUS-Implementierung erhöhen könnten. Beide

Strategien und moderierenden Faktoren haben als Ergebnis die Aufrechterhaltung der industriellen Aktivität, Pilotprojekte und industrielle Innovation. Die öffentliche Akzeptanz ist eine wichtige Bedingung, für die mehrere Unterstützungsfaktoren aktiviert werden müssen (Bewusstsein und Unterstützung der lokalen Gemeinschaft, Unterstützung von NGOs, Medienpräsenz zur Schaffung von Bewusstsein).

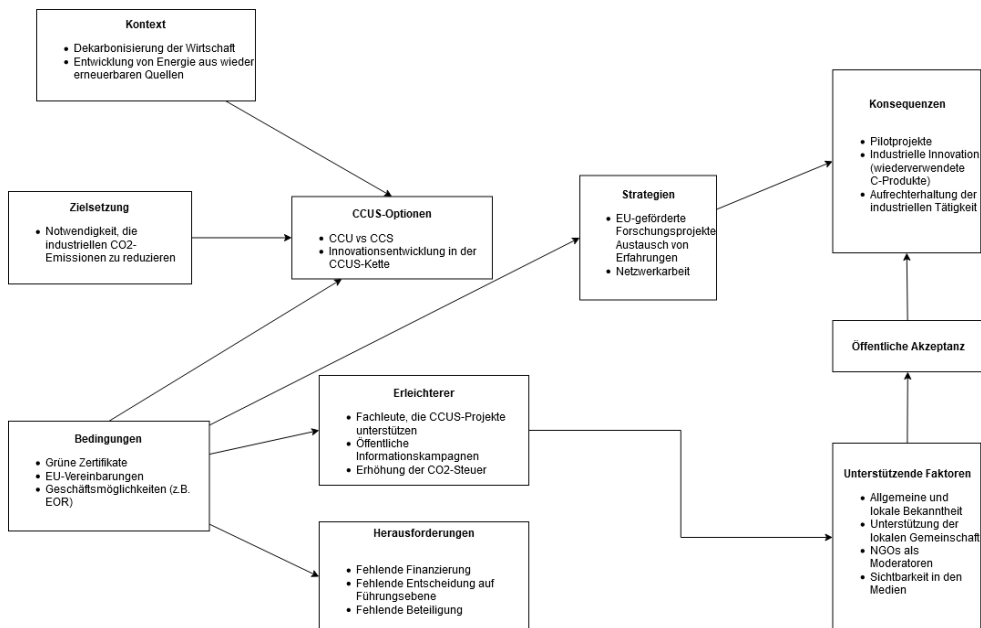


Abbildung 100: Hauptfaktoren und Themen, die bei der Interviewanalyse in Rumänien identifiziert wurden

2.5.5 Diskussion und Schlussfolgerungen der sozialen Begleitforschung

2.5.5.1 Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse

Die Ergebnisse der Stakeholder-Interviews in Deutschland und Rumänien verdeutlichen, dass die Entwicklung von CCUS, die geführten CCUS-Diskussionen und die Wahrnehmung von CCUS durch die Stakeholder in den einzelnen europäischen Ländern unterschiedlich sein können. Bei der Abbildung der verschiedenen Stadien der CCUS-Entwicklung in verschiedenen europäischen Ländern nehmen Deutschland und Rumänien unterschiedliche Positionen ein.

In Deutschland ist der CCUS-Bereich relativ weit entwickelt, aber das negative Framing in der öffentlichen Debatte über CCS ist ein herausragendes Merkmal. Die Wahrnehmungen der Stakeholder zu CCUS in Deutschland sind diversifiziert. Im Allgemeinen wird in Deutschland die Diskussion über CCUS zwischen CCU und CCS getrennt. Während die meisten Stakeholder in Deutschland positive Zukunftsprognosen für CCU abgeben und sich für CCU-

Technologien aussprechen, stehen sie CCS kritisch gegenüber. So wurde CCU als vorteilhafter Faktor zur Erlangung eines Wettbewerbsvorteils für die Industrie in Deutschland und als notwendiger Schritt hin zu einer kohlenstoffarmen Industrie in Deutschland und Europa beschrieben. Im Gegensatz dazu wurde CCS, obwohl die Befragten zustimmten, dass CCS eine notwendige Brückentechnologie sein würde, als "tote Technologie" bezeichnet. In Deutschland sahen die befragten Stakeholder einen Mangel an politischer Unterstützung und Finanzierung zur Entwicklung und Verbesserung von CCUS-Technologien als wichtige Barrieren für die CCUS-Implementierung in Deutschland.

Die meisten Befragten in Deutschland unterstützten die Umsetzung von CCU-Projekten für die Schwerindustrie, in der Produktkette für den Ersatz von Baumaterialien. Die Wiederverwendung von CO₂ wurde von den meisten Stakeholdern positiv konnotiert und als Ressource gerahmt.

Alle befragten Stakeholder in Deutschland waren sich der Bedeutung von akzeptanzbildenden Maßnahmen für eine erfolgreiche CCUS-Implementierung in Deutschland bewusst. Generell wurde die Öffentlichkeit als wichtig für die Implementierung der CCUS-Technologie eingestuft, da sie von kohlenstoffarmen Technologien als nützliche Maßnahmen gegen den Klimawandel profitieren würde. Insgesamt wurden die hohen Implementierungskosten als wichtiger Faktor für die Akzeptanz genannt. Darüber hinaus betonten die Befragten die Notwendigkeit einer neuen Öffentlichkeit und eines neuen Narrativs für CCUS in Deutschland. Das am häufigsten genannte Argument für ein neues Narrativ für CCUS bezog sich auf die Entscheidung im Jahr 2019 für einen Kohleausstieg in Deutschland.

In Rumänien befindet sich die Implementierung von CCUS in einem frühen Stadium. Die Stakeholder präsentierten sehr unterschiedliche Perspektiven zur CCUS-Entwicklung in Rumänien. Die Perspektiven hingen von den vielfältigen Erfahrungen und Informationen der Befragten ab und zeigten eine heterogene Positionierung gegenüber CCUS und unterschiedliche Wahrnehmungen der Rolle der Akteure sowie dem Stadium und den Möglichkeiten der CCUS-Entwicklung.

Hinsichtlich der Entwicklung von CCUS in den nächsten zehn Jahren in Rumänien waren die Ansichten der Stakeholder sehr unterschiedlich und reichten von sehr optimistisch bis sehr pessimistisch. Einige Befragte gaben eine sehr optimistische Perspektive für die CCUS-Entwicklung in Rumänien an, da sie davon ausgingen, dass die CCUS-Implementierung einerseits durch die europäischen Vereinbarungen und andererseits durch den technologischen Fortschritt stimuliert wird. Andere Befragte präsentierten eine pessimistischere Perspektive und betonten die hohen Kosten für die Umsetzung von CCUS-Projekten und die mangelnde Entscheidungsfindung des Industriemanagements und der Institutionen.

In Bezug auf die Beteiligung verschiedener Akteure zeigen die Ergebnisse, dass Industrieunternehmen ein echtes Interesse an der Entwicklung von CCUS in Rumänien haben, da sie sich aufgrund des Preisanstiegs für grüne Zertifikate in einer schwierigen Lage befinden. Dennoch vermeidet das Management der Unternehmen jegliche Initiative, da die Implementierung von CCUS aus ihrer Sicht hohe Kosten bedeutet, die nicht durch eigene Ressourcen gedeckt werden können. Kohlebetriebene Energieerzeuger zeigen mehr Interesse an CCUS als die befragten Industrieunternehmen. Die Kategorie der Stakeholder, die das höchste Maß an Motivation zur Implementierung von CCUS in Rumänien zeigte, bestand aus Forschungsinstituten, deren Motivation durch europäische Projekte aufrechterhalten wird, die es ihnen ermöglichen, sich professionell weiter zu entwickeln und

Erfahrungen und Wissen mit der internationalen Forschungsgemeinschaft auszutauschen. Mitglieder der Massenmedien oder der lokalen Öffentlichkeit in Rumänien zeigten wenig Wissen oder Bewusstsein über CCUS, aber gleichzeitig erwarten sie, dass die Öffentlichkeit eine positive Einstellung zu CCUS entwickeln wird, wenn CCUS in Verbindung mit lokalen wirtschaftlichen Interessen einhergeht.

Alle befragten Stakeholder in Rumänien betonten die Wichtigkeit der CCUS-Implementierung zur Abschwächung des Klimawandels. Als Hauptnutzen von CCUS sahen die Befragten die Reduzierung der CO₂-Emissionen gemäß internationaler Vereinbarungen und die Aufrechterhaltung der industriellen Aktivitäten für die jeweiligen Industrieunternehmen bzw. für die fossil betriebenen Energieerzeuger. Als Hauptrisiken wurden vor allem Leckagen aus Pipelines oder aus Lagerstätten, die für Projekte benötigten Finanzmittel und Konflikte zwischen Partnern bei der Umsetzung von CCUS-Projekten diskutiert. Die größten Herausforderungen für die CCUS-Entwicklung betrafen die begrenzte Beteiligung und den Mangel an Entscheidungen der industriellen und institutionellen Akteure, die eine führende Rolle bei der Entwicklung des CCUS-Bereichs in Rumänien spielen könnten, d.h. das Management von Industrieunternehmen, öffentliche Einrichtungen, nationale Finanzierungsinstitutionen. Obwohl auf strategischer Ebene die Dekarbonisierung in Rumänien notwendig ist, fehlen die Belohnungen, die an Unternehmen gerichtet sind, die versuchen, ihren Fußabdruck zu reduzieren. Die hohen finanziellen Kosten und die fehlende Verbindung zwischen den Elementen der CCUS-Kette und gleichzeitig die Notwendigkeit, Technologien mit höherer Effizienz für die Abscheidung und Nutzung oder Speicherung von CO₂ zu entwickeln, bestimmen eine langsame Entwicklung des CCUS-Bereichs in Rumänien. Auch der Mangel an öffentlicher Debatte und Information macht aus der öffentlichen Akzeptanz von CCUS noch einen ungelösten Aspekt und ein mögliches Hindernis für die CCUS-Entwicklung in der Zukunft.

Die breite Öffentlichkeit und die lokale Öffentlichkeit in Rumänien wurden als wenig informiert über CCUS-Themen wahrgenommen, sowohl auf nationaler als auch auf lokaler Ebene. Das mangelnde Bewusstsein der verschiedenen Öffentlichkeiten kann als Chance für die Durchführung proaktiver Informationskampagnen und die Gewinnung von Unterstützung für CCUS betrachtet werden. Die Befragten aus den Medien und dem potenziellen CCUS-Gebiet sahen in dem mangelnden Bewusstsein jedoch auch eine Herausforderung oder sogar ein Risiko, da frühere Kommunikationskrisen in Rumänien auf einem Mangel an Informationen beruhten.

2.5.5.2 Vergleich der Stakeholder Wahrnehmungen von CCUS in Deutschland und Rumänien

Die Ergebnisse der vergleichenden Analyse zeigen, dass die Umsetzung von CCUS in beiden Ländern ein Setzen des Rahmens für den CCUS-Einsatz durch politische Akteure und ein Auftreten von Unternehmen als Initiatoren von CCUS-Projekten voraussetzt. Die deutschen Befragten betonten stärker als die rumänischen, dass die Akzeptanz der Öffentlichkeit als Verbraucher von CO₂-abgeleiteten Produkten und für die Verbreitung der CCUS-Technologien wichtig ist, denn wenn sie fehlt, wird die CCUS-Implementierung erschwert oder verhindert. Darüber hinaus unterstrichen die deutschen Befragten, die Wichtigkeit akademischer Forschungsorganisationen als Initiatoren von CCUS-Projekten und dass Umweltorganisationen nicht gegen die Implementierung von CCUS vorgehen. Die

rumänischen Befragten betonten, dass die Unterstützung der lokalen Gemeinden für die CCUS-Implementierung wichtig ist und dass genügend Techniker zur Verfügung stehen.

Als wichtigste Herausforderungen für die CCUS-Implementierung nannten die Stakeholder in Deutschland und in Rumänien die hohen Kosten, die mit der CCUS-Einführung verbunden sind, die Finanzierung und die erforderlichen politischen Rahmenbedingungen. In beiden Ländern wurde das geringe Interesse von Unternehmen, Investitionen zu tätigen, als wichtige Herausforderung für die CCUS-Einführung bewertet. Die deutschen Befragten sahen zusätzlich die Überarbeitung bestehender Gesetze und die Verabschiedung eines neuen Gesetzes zur Kohlenstoffspeicherung als Herausforderung, während in Rumänien der Mangel an Experten, die in CCUS-Projekten arbeiten können, genannt wurde.

In beiden Ländern erkannten die meisten Befragten eine fehlende öffentliche Akzeptanz als nicht-technisches Risiko für die CCUS-Implementierung. Außerdem wurde die lange Dauer von Infrastrukturprojekten kritisch für die CCUS-Einführung eingeschätzt. Die erforderliche Finanzierung wurde in beiden Ländern als Risiko gesehen, in Rumänien im Hinblick auf unzureichende Mittel, in Deutschland im Hinblick auf die Anforderung an die Zuschussempfänger, transparent bei der Mittelausgabe zu sein. Darüber hinaus betonten rumänische Interviewpartner die Leckage aus Pipelines oder der Speicherstätte als Risiko von CCUS-Projekten, während deutsche Stakeholder umgekehrt betonten, dass Leckagen kein Risiko für den Transport von CO₂ über Pipelines oder für die Speicherung von CO₂ darstellen werden.

Wichtige Vorteile, die mit dem Einsatz von CCUS verbunden sind, wurden sowohl in Deutschland als auch in Rumänien mit der Aufrechterhaltung industrieller Aktivitäten sowie dem Klima- und Umweltschutz in Verbindung gebracht. Zusätzlich wurde in beiden Ländern die Schaffung neuer Arbeitsplätze als wichtiger Nutzen der Implementierung von CCUS bewertet, wobei in Deutschland einige Stakeholder einen positiven Effekt der CCUS-Implementierung auf den Arbeitsmarkt bezweifelten. Die deutschen Befragten nannten auch Wettbewerbsvorteile, Ressourcenschonung, sektorale Kopplungseffekte und Wachstum der regionalen Wertschöpfung als Vorteile im Zusammenhang mit der CCUS-Implementierung, während die rumänischen Befragten die Verbesserung der lokalen Umwelt und der lokalen Gemeinschaft sowie einen positiven Effekt der Schaffung neuer Arbeitsplätze auf die öffentliche Akzeptanz nannten.

In beiden Ländern wurde betont, dass Kommunikation für die Umsetzung von CCUS-Projekten notwendig ist. In Deutschland wurde hervorgehoben, dass eine neue öffentliche Diskussion und ein neues Narrativ für die CCUS-Implementierung notwendig sind. In Rumänien wurde hervorgehoben, dass die Kommunikation die Öffentlichkeit über Risiken und Vorteile informieren und das Wissen der Öffentlichkeit durch Bildungsprogramme in Schulen erhöhen sollte.

Entwicklungsrichtungen für CCUS und Anwendungen

Während die in Deutschland befragten Stakeholder CCS kritisch sahen, beurteilten sie CCU als akzeptable Entwicklungsrichtung. In Rumänien wurde der Status der von CCU als in einem frühen Stadium wahrgenommen, und die in Rumänien befragten Stakeholder sahen CCS und CCU nicht im Gegensatz zueinander. Aus Sicht der befragten Rumänen ist die CO₂-Speicherung eine Option, die für die in Rumänien abgeschiedenen industriellen CO₂-Emissionen in Frage kommt, da es in Anbetracht der großen emittierten CO₂-Mengen nicht genügend Anwendungen für die Wiederverwendung von CO₂ gibt. Zu den möglichen

Anwendungen von CCUS in Rumänien gehört, durch die Nutzung von Erfahrungen in den USA, EOR (Enhanced Oil Recovery). Im Vergleich dazu haben die Befragten aus Deutschland eine größere Vielfalt an Einsatzmöglichkeiten für das abgeschiedene CO₂ genannt. Die Zusammenarbeit zwischen Partnern aus CCUS-Projekten wurde von den deutschen Stakeholdern als gut oder sehr gut angesehen, während dies von den rumänischen Stakeholdern als Risiko genannt wurde, zusammen mit der langen Dauer der Projekte.

Bedeutung der Akteure

Die Stakeholder in Deutschland betonten die Bedeutung von Industrie und Forschung für die CCUS-Implementierung und politischen Akteuren wurde nur eine untergeordnete Bedeutung für die CCUS-Implementierung zugeschrieben. Die rumänischen Stakeholder hoben vor allem die Bedeutung von Entscheidungsakteuren (Ministerien, Management von Unternehmen) hervor. Als wichtigste Akteure für die CCUS-Entwicklung in Rumänien wurden die öffentlichen Institutionen und das Management von Unternehmen angesehen. Die Experten, Fachleute für CCUS oder die Vertreter der Zivilgesellschaft in Rumänien wurden als zweitrangig wahrgenommen.

Öffentliche Akzeptanz laut Befragten

Die breite Öffentlichkeit und die lokale Öffentlichkeit in Rumänien wurden von den Befragten als wenig informiert über CCUS-Themen wahrgenommen. Trotz des mangelnden Bewusstseins glaubten die Befragten in Rumänien, dass die Akzeptanz der Öffentlichkeit positiv wäre, wenn proaktive Informationskampagnen gestartet würden. Außerdem würden nach Ansicht der befragten Akteure die lokalen Gemeinden die CCUS-Projekte unterstützen, wenn die Projekte als eng mit ihren Bedürfnissen der lokalen Entwicklung verbunden dargestellt würden (z.B. die Fortführung der Tätigkeit einiger wichtiger Industrie- und Energieunternehmen).

Die deutschen Stakeholder identifizierten die fehlende öffentliche Unterstützung für CCUS als ein Hauptrisiko für die Implementierung von CCUS in Deutschland und betonten die Notwendigkeit eines neuen Narrativs und Framings zur Erhöhung der Akzeptanz von CCUS. Viele Befragte beobachteten das Potenzial von CCU, eine höhere Akzeptanz zu schaffen.

2.5.5.3 Theoretische und praktische Implikationen

Die dargestellten Ergebnisse der in Deutschland und Rumänien durchgeführten Stakeholder-Interviews sind unter mehreren Gesichtspunkten relevant.

Auf der Ebene der einzelnen Länder geben sie ein Bild von wichtigen Faktoren für die CCUS-Einführung in Deutschland und Rumänien wider. Der Vergleich zwischen Deutschland und Rumänien in der Entwicklung von CCUS und den Wahrnehmungen der Stakeholder ermöglicht darüber hinaus die Identifizierung von ähnlichen Merkmalen, die auch für die CCUS-Einführung in anderen europäischen Ländern in Betracht gezogen werden könnten und von unterschiedlichen Merkmalen, die als typisch für bestimmte Länder oder Entwicklungsstadien angesehen werden können. Diese gemeinsamen und einzigartigen Elemente können in ein theoretisches Modell für die CCUS-Entwicklung und die Innovationsentwicklung im Allgemeinen integriert werden.

Vor der Durchführung der Interviews war in Rumänien wenig über die Wahrnehmung von CCUS in osteuropäischen Ländern bekannt. Die Erkenntnisse aus den Interviews in

Deutschland bezüglich der Herausforderungen und Chancen für fortgeschrittene CCUS-Industrien und -Märkte könnten für die CCUS-Entwicklung in Ländern wie Rumänien, mit seinem früheren Stadium der CCUS-Entwicklung, relevant sein. Ein Beispiel dafür ist die Notwendigkeit eines politischen Rahmens für CO₂-Abgaben innerhalb des ETF-Systems für CCUS-Technologien. Länder wie Rumänien könnten von Anreizen oder Impulsen für eine Entwicklung auf EU-Ebene profitieren, die von deutschen Akteuren vorangetrieben werden, sowie von deren Entwicklungspfaden, Fehlern und Vorteilen.

Die von den Stakeholdern in Deutschland und Rumänien wahrgenommenen Herausforderungen bei der CCUS-Implementierung bieten darüber hinaus konkrete Handlungsanweisungen für öffentliche Einrichtungen, europäische Institutionen und Entscheidungsträger auf Management- und institutioneller Ebene. Auch die unterschiedliche Einbindung von Akteuren, die durch die Ergebnisse hervorgehoben wurde, legt zum einen nahe, von wo aus ein CCUS-Projekt gestartet werden sollte und auch welche Stakeholder wie angesprochen werden müssen (z.B. um ihren Informationsstand oder die Motivation zur Einbindung weiterer Akteure zu erhöhen). Wenn Kommunikationsstrategien für die erfolgreiche Umsetzung eines CCUS-Projekts projektiert werden, bieten die Ergebnisse darüber hinaus ein Bild über die Faktoren, die für die öffentliche Akzeptanz wichtig sein könnten (z.B. das Ansprechen lokaler Interessen). Unsere Ergebnisse deuten u.a. auf die Notwendigkeit der Bildung interdisziplinärer Teams für die CCUS-Implementierung hin, da die an CCUS beteiligten Aspekte komplex und in verschiedenen Sektoren angesiedelt sind. Daher sollten Instrumente zur Vernetzung und Koordination nicht nur auf nationaler, sondern auch auf internationaler Ebene ausgebaut werden, um den Wissenstransfer zu intensivieren und den gewünschten Grad der Zusammenarbeit zu erreichen. In Anbetracht der Rollen, die die Akteure in den Ländern spielen, sollten sich die Strategien zur CCUS-Umsetzung zunächst an die wichtigsten Akteure richten und sich schrittweise an die anderen beteiligten Akteure wenden. Des Weiteren sollten neue Wege zur Überwindung von Herausforderungen bei der CCUS-Implementierung erforscht werden, angefangen bei der Finanzierung, die von den befragten Akteuren in Deutschland und Rumänien als eine große Herausforderung angesehen wurde. Schließlich sollten proaktive öffentliche Informationskampagnen durchgeführt werden, insbesondere auf der Ebene der lokalen Öffentlichkeit, und die Kampagnen sollten in Verbindung mit den Interessen der lokalen Gemeinschaften aufgebaut werden.

Um die Einschätzungen der Akteure zu verifizieren und die öffentliche Wahrnehmung direkter zu untersuchen, wären repräsentative Umfragen in der Öffentlichkeit erforderlich. Da davon auszugehen ist, dass der Wissensstand über CCUS in der Öffentlichkeit gering ist, wäre eine informierte Meinungsumfrage erforderlich. Weiterhin sind für die Beurteilung des gegenwärtigen Zustandes und der zukünftigen Entwicklung von CCUS nicht nur die Wahrnehmungen der Stakeholder relevant, sondern auch die rechtliche Situation, der Modus der politischen Entscheidungsfindung und kulturelle Faktoren. Sie sollten in weitere Studien zur CCUS-Implementierung einbezogen werden.

2.6 Entwicklung eines Abgasnachbehandlungssystems auf Basis von katalytischer Verbrennung

Die zugrundeliegende Herausforderung für dieses Arbeitspaket bestand darin, dass Abgase aus der Syntheseanlage verbrannt und entsorgt werden mussten. Die Abgase stammen aus der Rezyklierung des Produktstroms (genauer Purge) und enthalten viele unterschiedliche brennbare Bestandteile. Der typische Weg diese Abgase zu entsorgen wäre die Verbrennung durch eine offene Fackel. Durch die Verbrennung werden alle verbleibenden Bestandteile zu Wasser und CO₂ umgesetzt und können gefahrlos an die Umgebung abgegeben werden. Die Errichtung einer Fackel hätte allerdings eine bauliche Veränderung am Kraftwerk Niederaußem bedeutet, wodurch eine neue Zertifizierung hätte beantragt werden müssen. Dieser Aufwand wurde als nicht zielführend eingestuft, sodass eine andere Lösung gefunden werden musste.

Es war naheliegend, das Prinzip der Verbrennung beizubehalten, aber auf eine flammlose Oxidation zu setzen. Eine solche flammlose Verbrennung kann durch den Einsatz von geeigneten Katalysatoren erzielt werden. Das Forschungszentrum Jülich hat in diesem Bereich sehr viel Expertise, da bereits für die Entwicklung eines Hilfstromaggregats (engl. auxiliary power unit, APU) auf Brennstoffzellenbasis [147, 148] verschiedene Katalytbrenner entwickelt wurden [149-151]. Die sich ergebende Aufgabe hieß, ein Abgasnachbehandlungssystem auf Basis der bestehenden Katalytbrennertechnologie für den Einsatz in der DME-Synthese (Demonstrator) zu entwickeln. Dieses Abgasnachbehandlungssystem (engl. purge gas treatment, PGT) musste dabei nachweisen können, dass die regulatorischen Anforderungen (Normwerte) der TA Luft [152] beim Betrieb eingehalten werden können.

Eine experimentelle Erprobung der Katalytbrenner an Prüfständen des Forschungszentrums Jülich war aufgrund des zeitlichen Ablaufs des Projekts nicht möglich. Aus diesem Grund musste eine Transferleistung erbracht werden, welche die Anwendungsmöglichkeit der Katalytbrennertechnologie in dieser neuen Betriebsumgebung bestätigt. Eine Simulationsstudie mithilfe von CFD-Berechnungen (engl. computational fluid dynamics, CFD) sollte diesen Nachweis erbringen. Das Forschungszentrum Jülich konnte dabei auf vorliegende Modellierungsansätze nach Scharf [153] zurückgreifen.

Im Folgenden werden alle relevanten Aspekte zur Auslegung des PGT-Systems beschrieben. Zunächst wird das Funktionsprinzip der Katalytbrenner beschrieben (siehe Abschnitt 2.6.1). Danach werden in Abschnitt 2.6.2 die Randbedingungen aus der DME-Syntheseanlage dargestellt. Aufbauend auf den dargestellten Randbedingungen folgen die Analysen der CFD-Simulationsergebnisse in Abschnitt 2.6.3. Eine kurze Schlussfolgerung schließt das Kapitel ab und stellt nochmal die wichtigsten Erkenntnisse der Analyse zusammen (siehe Abschnitt 2.6.6).

Die hier vorgestellten Beschreibungen und Analysen stellen eine Kurzfassung der durchgeführten Studien dar. Eine vollständige Darstellung der Berechnungen wird durch den an die Projektpartner RWE und MHPS verteilten Bericht „Integration des CAB 4 in ein Purge-Gas-Treatment (PGT) System für Kraftstoffsynthesen“ gegeben. Für detaillierte Ausführung wird an dieser Stelle auf den Bericht verwiesen, welcher letztmalig am 17.02.2020 aktualisiert wurde.

2.6.1 Funktionsprinzip der Katalytbrenner

Die Katalytbrenner besitzen einen monolithischen Katalysator, welcher das Zentrum des Reaktors bildet. Auf der Eingangsseite des Abgastrakts befindet sich eine Lochblende um das Gasgemisch – bestehend aus zu verbrennendem Abgas und Luft – vor dem Eintritt in die Reaktionszone zu homogenisieren. In der Reaktionszone finden die katalytische Verbrennung und damit die Wärmefreisetzung statt. Die Aktivität des Katalysators bezüglich der verschiedenen Bestandteile des Abgases ist temperaturabhängig. Wasserstoff kann bereits bei Umgebungstemperaturen oxidiert werden und die Zugabe von Wasserstoff und Luft kann daher für eine Aufheizstrategie genutzt werden. Die Verbrennung von CO findet größtenteils bei Temperaturen über 400 °C statt, deswegen sollte dies die typische Betriebstemperatur der Reaktoren in der DME-Synthesanlage sein. Nach der Reaktionszone wird das heiße Abgas durch die Verdampfung und Temperierung von Wasser bzw. Wasserdampf gekühlt. Das Wasser wird an der Oberseite der Reaktoren eingedüst. Eine technische Zeichnung der äußeren Geometrie ist in Abbildung 101 dargestellt.

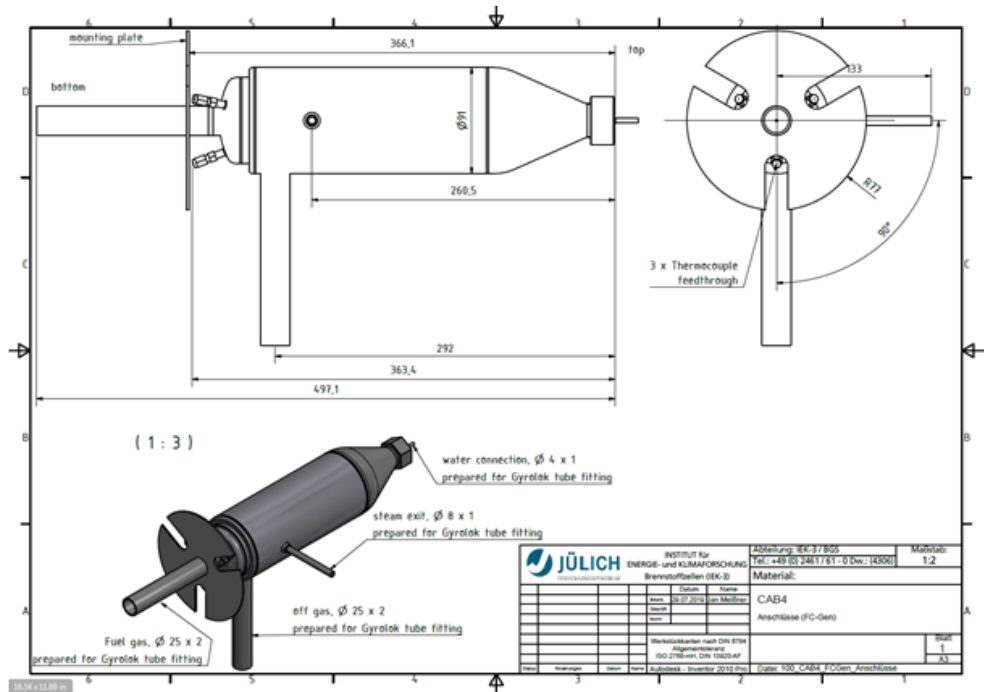


Abbildung 101: Technische Zeichnung des Katalytbrenners (CAB 4) in der Ausführungsversion 2

Die Katalytbrenner sind projektbezogen (Projekt: „FCGen“) leicht unterschiedlich ausgeführt, dabei bestehen die Unterschiede in der Abgasführung, die entweder gebogen oder rechtwinklig angeordnet ist. Innerhalb des ALIGN-CCUS Projekts wurden zwei Katalytbrenner der Version 1 und ein Katalytbrenner der Version 2 an Mitsubishi Power Europe GmbH

übergeben. Die Reaktoren gehören dabei der vierten Entwicklungsgeneration der Katalytbrenner an und werden daher im Folgenden als CAB 4 bezeichnet.

2.6.2 Randbedingungen aus dem Betrieb der DME-Syntheseanlage

Die relevanten Randbedingungen für den Betrieb des PGT-Systems wurden auf Basis von Prozesssimulationen von Mitsubishi Power Europe GmbH an das Forschungszentrum Jülich übergeben. Der Projektpartner Mitsubishi Power Europe GmbH hat hierfür verschiedene Fälle mit unterschiedlichen Zusammensetzungen, Massenströme, Temperaturen und Drücken zusammengestellt. Die wichtigsten Aspekte dieser Betriebsfälle werden durch Tabelle 33 widergegeben.

Tabelle 33: Randbedingungen der CFD-Studien

Parameter	Einheiten	Fall 1	Fall 2	Fall 3	Fall 4	Fall 5
Temperatur	°C	22	21	21	20	20
Druck	bar	Für alle Fälle 1				
Dampfgehalt		Für alle Fälle 1				
Massenströme	kg/s	0,002	0,026	0,036	0,043	0,053
O ₂	kg/kg	22,4%	21,5%	21,5%	22,0%	22,0%
H ₂ O	kg/kg	1,2%	1,1%	1,1%	1,1%	1,1%
DME	kg/kg	0,3%	0,1%	0,1%	0,1%	0,1%
CO	kg/kg	0,7%	1,5%	1,5%	0,9%	0,9%
H ₂	kg/kg	0,8%	0,7%	0,7%	0,8%	0,8%
CO ₂	kg/kg	0,3%	3,7%	3,7%	2,3%	2,3%
N ₂	kg/kg	73,2%	70,2%	70,2%	71,7%	71,7%
AR	kg/kg	1,3%	1,2%	1,2%	1,2%	1,2%

Es fällt auf, dass zwischen Fall 1 und Fall 5 sehr große Unterschiede in der Skalierung bestimmter Parameter herrschen. In Fall 5 muss das PGT-System einen ca. 28-mal so großen Massenstrom verarbeiten wie in Fall 1. Die Bestandteile sind allerdings relativ konstant, sodass die Heizwerte der Gemische in einem ähnlichen Bereich liegen. Für die Reaktoren bedeutet dies, dass die Verweilzeiten bei hohen Massendurchsätzen sinken, was sich negativ auf den Umsatz und damit letztlich auf die Einhaltung der Grenzwerte auswirken kann. Die einzige Möglichkeit diesen Effekten entgegenzuwirken, ist die Aufteilung der Ströme auf mehrere Reaktoren. Das Forschungszentrum Jülich konnte bei dieser Auslegung auf die bereits genannten drei Reaktoren zurückgreifen. Nach der Machbarkeitsanalyse galt es also zu prüfen, wie das PGT-System aufgebaut sein muss und wie viele Reaktoren verwendet werden müssen. Als Standardfall für den Betrieb wurde Fall 2 von Mitsubishi Power Europe GmbH ausgewiesen. Die restlichen Fälle dienen der Risikoanalyse.

2.6.3 Prüfung der Betriebsparameter auf Zulässigkeit

Die Prüfung der Einhaltung der Betriebsbedingungen schließt die Einhaltung der definierten Betriebstemperaturen, Betriebsdrucks bzw. –druckverlusts und die Bestimmungen der notwendigen Kühlwassermenge und Luftzufuhr ein. Die zulässigen maximalen Betriebsparameter ergeben sich sowohl aus den eingesetzten Materialien als auch aus der Zertifizierung der Brenner wie folgt:

- Für den Katalysator ist eine maximal zulässige Temperatur von 950 °C definiert (bei 1 bar). Bei einem Druckanstieg auf maximal **4 bar** im Reformatraum wird die maximal zulässige Temperatur für den Abgastrakt zu **700 °C** definiert.
- Für den Dampfraum gelten teilweise andere Grenzwerte, da hier verschiedene Materialien verwendet werden. Der maximal zulässige Betriebsdruck ist zu **8 bar** definiert und somit beträgt die maximal zulässige Temperatur in diesem Fall **400 °C**.

2.6.3.1 Einhaltung der maximalen Betriebstemperaturen

Die oben beschriebenen Betriebsparameter gelten als kritische Größen in Kombination mit den angegebenen Drücken. Für den standardmäßig angenommenen drucklosen Betrieb gelten die Grenztemperaturen aus der folgenden Abbildung 102.

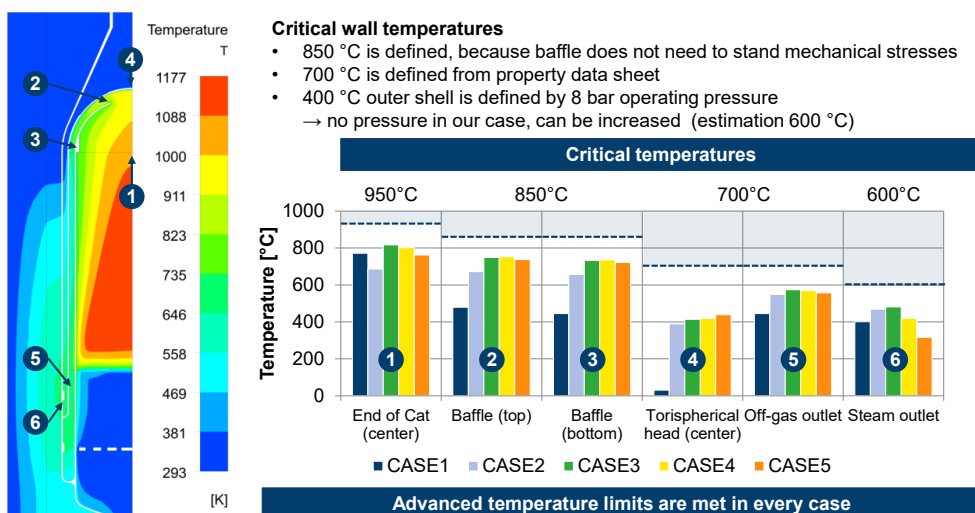


Abbildung 102: Hotspot-Analyse der Katalytbrenner (CAB 4) im Betrieb als PGT-System des DME-Demonstrators

Aus Abbildung 102 ist zu erkennen, dass die orts aufgelöste CFD-Simulationen die Temperaturverteilung innerhalb der Reaktoren vollständig beschreibt. Mit dieser Temperaturverteilung ist es möglich die verschiedenen Grenztemperaturen der Materialien und Bauteile mit den vorgeschagten Temperaturen abzugleichen. Dieser Abgleich ist auf der rechten Seite von Abbildung 102 dargestellt. Die Grenztemperaturen werden in keinem Betriebsfall überschritten und somit sind die Reaktoren grundsätzlich in der Lage im anvisierten PGT-System eingesetzt zu werden.

2.6.3.2 Zündtemperatur und Explosionsgrenzen

Eine genaue Definition der minimalen Zündtemperatur von Wasserstoff in Luftgemischen konnte an dieser Stelle nicht auf Basis von Literaturquellen ausgemacht werden. In den durchgeführten Versuchen wurde der Reaktor immer mit Luft bei Umgebungstemperaturen

(20 – 25 °C) versorgt. Bei diesen Bedingungen findet eine katalytische Verbrennung von Wasserstoff gesichert statt.

2.6.3.3 Flammenfront

Es galt zu prüfen, ob ausgehend von der Reaktionszone eine rückwärtsgerichtete Wanderung der Reaktion bzw. Flammenfront aus dem CAB-System stattfinden kann. Diese Wanderung der Flammenfront wäre sehr gefährlich für den Betrieb der Anlage und muss zwingend ausgeschlossen werden. Die laminare Flammengeschwindigkeit von Wasserstoff-Luftgemischen liegt im Bereich von 2,1 – 2,6 m/s. Die turbulente Flammengeschwindigkeit kann an dieser Stelle noch deutlich größer sein als im laminaren Fall (Faktor 10 und mehr). Die Reynoldszahl im Eingangsbereich des Reaktors ist mit ca. 18.000 hoch, daher kann angenommen werden, dass in diesem Bereich die turbulente Flammengeschwindigkeit höher als die Strömungsgeschwindigkeit von ca. 24 m/s wäre. Eine **Flammensperre** sollte dennoch in jedem Fall für die einzelnen Reaktoren vorgesehen werden. Der Einlass stellt in diesem Zusammenhang die engste Querschnittsstelle mit den höchsten Geschwindigkeiten dar. Im Bereich des Lochblechs mit Bohrungen von ca. 3 mm Durchmesser wird die Strömungsgeschwindigkeit auf ca. 10 – 12 m/s reduziert und somit werden gleichzeitig auch die Reynoldszahl und die turbulente Flammengeschwindigkeit reduziert. Die Strömungsgeschwindigkeiten im CAB 4 für den Betriebsfall 2 sind in der folgenden Abbildung 103 dargestellt.

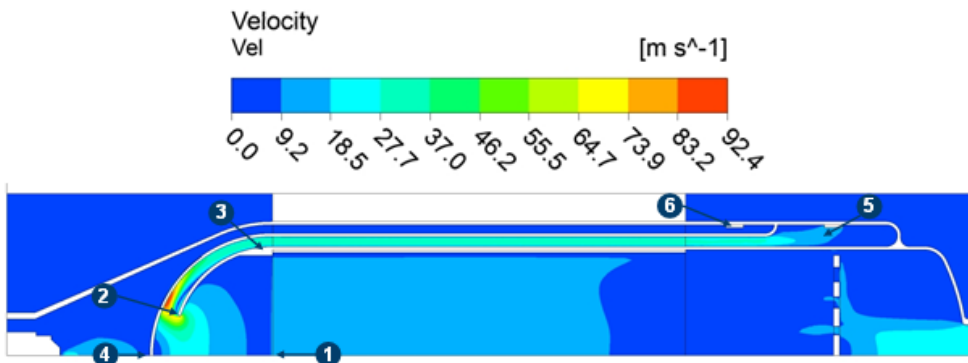


Abbildung 103: Geschwindigkeitsprofil im Katalytbrenner für den Betriebsfall 2

Der Druckverlust innerhalb der ersten Simulationsreihe beträgt 3,8 mbar und 100,9 mbar (Fall 5 mit 3 Reaktoren). Damit ist der Druckverlust auf einem sehr niedrigen Niveau, womit kein Hindernis für den Einsatz der Reaktoren festgestellt werden kann.

2.6.4 Analyse der Betriebsfälle

Die bisherigen Analysen haben gezeigt, dass die Katalytbrenner grundsätzlich für den Einsatz im PGT-System geeignet sind, da die Grenzwerte der Reaktoren nicht erreicht wurden. In der folgenden Analyse werden die Grenzwerte der TA-Luft mit den Ergebnissen der CFD-Simulationen abgeglichen. Tabelle 34 fasst die Ergebnisse zusammen.

Tabelle 34: Ergebnisse der Basisfallsimulationen mit einem CAB 4

Spezies	Einheit	Fall 1	Fall 2	Fall 3	Fall 4	Fall 5
H ₂	mg/m ³	0	368,26	218,75	340,11	459,44
CO	mg/m ³	0	146,85	843,6	686,33	934,34

Aus den Ergebnissen in Tabelle 34 ist zu erkennen, dass nur für den Betriebsfall 1 die Grenzwerte der TA-Luft (100 mg/m³ CO) eingehalten werden können. Aus diesem Grund muss das Systemdesign verändert werden. Für höhere Umsätze werden die beiden weiteren Reaktoren in das PGT-System integriert. Auf diese Weise können die Lasten der einzelnen Reaktoren deutlich reduziert werden. Die Ergebnisse des erweiterten PGT-Systems sind in Tabelle 35 dargestellt.

Tabelle 35: Finale Ergebnisse des PGT-System im Betrieb mit drei CAB 4

Spezies	Einheit	Fall 1	Fall 2 LW	Fall 3++	Fall 4++	Fall 5+
H ₂	mg/m ³	0	25	94,29	171,50	264,52
CO	mg/m ³	0	9,61	359,24	342,44	533,71
Last	%	100	100	60	50	40

Die Ergebnisse zeigen deutlich, dass der Referenzbetriebszustand (Fall 2) durch das System darstellbar ist. Allerdings kann die Einhaltung der TA Luft der weiteren Betriebsfälle nicht gewährleistet werden. Aus diesem Grund wurde überprüft, inwieweit die Lastverhältnisse des PGT-Systems für die Fälle 3, 4 und 5 angepasst werden müssen, um die Grenzwerte der TA Luft einzuhalten. Die Auslegung der Massenströme erfolgt mit festen Luftverhältnissen (Mischung Brenngas und Luft). Die Mischungen stehen dann für alle Brenner in gleicher Qualität und Quantität zur Verfügung (konstante Luftzahl und Menge). Abweichungen von der Luftzahl können zu einem deutlichen Anstieg der Verbrennungstemperaturen führen, falls der Luftüberschuss (überstöchiometrische Verbrennung) reduziert wird. Für die Analyse der Grenzwerte bezüglich der TA Luft wurden die Ergebnisse der Fallstudie aufbereitet. Die Betriebsfälle, welche die TA Luft nicht einhalten, wurden im Massenstrom reduziert (ca. 50 %) um das Antwortverhalten der Reaktoren zu prüfen. Durch die zusätzlichen Simulationenwerte konnte dann eine Linearisierung der Emissionswerte in Abhängigkeit der Massenströme erstellt werden. Mit dieser Linearisierung ist es anschließend möglich den Schnittpunkt der Linearisierung mit dem Grenzwert der TA Luft und so die Lastreduzierung für die Einhaltung der TA Luft zu bestimmen. Für die betrachteten Betriebsfälle 3, 4 und 5 folgt aus den gezeigten Berechnungen eine Lastreduktion von -44,9 %, -50,7 % und -55,3 %. Die zulässigen Massenströme sind also folglich zu 23,66 kg/h, 25,25 kg/h und 28,39 kg/h definiert. In Tabelle 35 werden die darstellbaren Lasten der Betriebsfälle mit dem anteiligen Massenstrom dargestellt.

2.6.5 Maximaler Wasserstoffmassenstrom

Der Ansatz dieser Falluntersuchung richtete sich nach der Anfahrstrategie der Demonstratoranlage, welche zu Beginn mit Wasserstoff aus der Elektrolyse versorgt wird. Aus

diesem Grund gilt es zu prüfen, ob über das CAB-System der volle Wasserstoffmassenstrom der Elektrolyse ($0,9 \text{ kg}_{\text{H}_2}/\text{h}$) umgesetzt werden kann. Als Ansatzpunkt für die Analyse des beschriebenen Lastfalls wurde eine Sensitivitätsstudie mit ASPEN Plus gewählt. Diese Sensitivitätsstudie sollte geeignete Betriebsbedingungen des Reaktors in Abhängigkeit von den definierten Randbedingungen herausarbeiten, indem die Verbrennungstemperatur in Abhängigkeit der Gemischzusammensetzung bzw. des Luftvolumenstroms bestimmt wurde. Die Simulationsergebnisse sind in der nachfolgenden Abbildung 104 visualisiert.

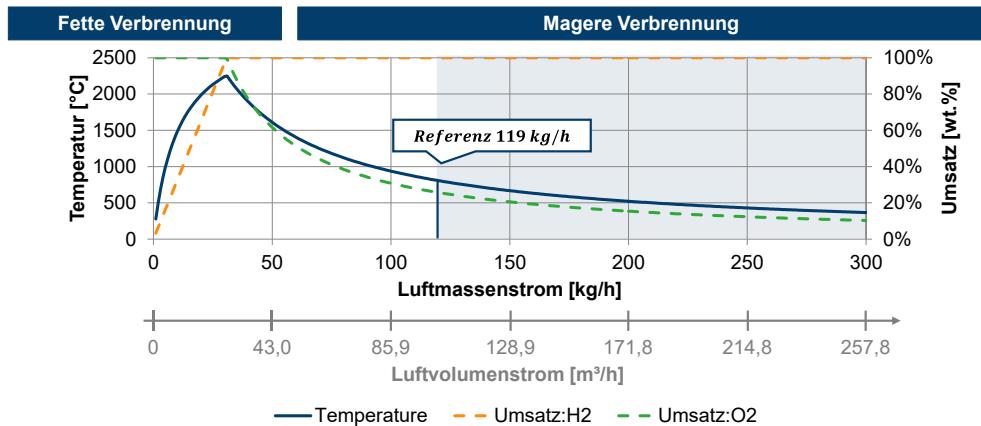


Abbildung 104: Adiabate Verbrennungstemperatur und Umsätze von Wasserstoff und Sauerstoff in Abhängigkeit des Luftvolumenstroms für den Betrieb mit $0,9 \text{ kg}/\text{h}$ Wasserstoff

Abbildung 104 zeigt zwei unterschiedliche Betriebsbereiche für die fette und magere Verbrennung von H_2 . Bei niedrigen Luftvolumenströmen findet eine unterstöchiometrische Verbrennung (fette Verbrennung) vom Wasserstoff statt. Die Betriebstemperatur der Reaktoren steigt mit zunehmendem Luftstrom an, da auf diese Weise mehr Wasserstoff umgesetzt werden kann. Der Umsatz an Sauerstoff ist in diesem Bereich immer 100 wt.% (Gleichgewichtsmodellierung mit R-Gibbs-Reaktor). Mit stöchiometrischen Mischungsverhältnis kann die adiabate Verbrennungstemperatur von über 2000 °C erreicht werden. Da kein Material dieser Temperatur standhalten kann und eine Abgabe von unverbranntem Wasserstoff nicht zulässig ist, ist dieser Bereich nicht für den Betrieb der Reaktoren und das PGT-System zulässig.

Als maximale Temperaturen im Monolithen wurden 950 °C (im Zentrum) und 850 °C definiert (siehe Abbildung 102). Als akzeptabel wurde ein Betriebspunkt mit einem Luftvolumenstrom mit mehr als $119 \text{ kg}/\text{h}$ oder $102,2 \text{ m}^3/\text{h}$ ausgewählt. Der angegebene Volumenstrom ist der reale Volumenstrom in der Anlage bei 25 °C und 1 bar.

Durch eine weitere Erhöhung des Luftvolumenstroms kann die Temperatur noch weiter gesenkt werden. In Abbildung 104 können Temperaturen von unter 500 °C bei Volumenströmen von mehr als $210 \text{ m}^3/\text{h}$ erreicht werden. Dieser Wert ist allerdings nur von theoretischer Natur, da bei einem so stark erhöhten Volumenstrom der vollständige Umsatz von Wasserstoff nicht mehr möglich ist.

Die Kontrolle des Wasserstoffumsatzes - im herausgearbeiteten Referenzfall - stellte einen zentralen Aspekt der CFD-Modellierung dar. Der durch die CFD-Simulation bestimmte Wasserstoffumsatz liegt bei 97,7 %. Der Massenanteil von Wasserstoff am Austritt der Reaktoren ist zu 0,17 % bestimmt (0,23 vol.%). Die untere Explosionsgrenze von Wasserstoff in Luft liegt bei 4 vol.% und somit ist in diesem Bereich ausreichend Abstand gegeben. Die Konzentration von Wasserstoff im Produktstrom beträgt 66,8 mg/m³ (nass). Bei diesem Wert der Wasserstoffkonzentration ist zu beachten, dass noch Wasser (ca. 6,6 wt.%) im Produktstrom vorliegt. Durch eine weitere Aspen Simulation wird dieser Wasseranteil abgezogen und das Abgas auf Standardbedingungen (25°C, 1 bar) gebracht. In diesem bereinigten Produktstrom steigt die Wasserstoffkonzentration auf 205,6 mg/m³ (trocken).

Ein weiterer wichtiger Aspekt der CFD-Simulation war es zu überprüfen, ob die Grenztemperaturen der verwendeten Materialien eingehalten werden können. Die Temperaturverteilung im Reaktor wird in Abbildung 105 gezeigt.

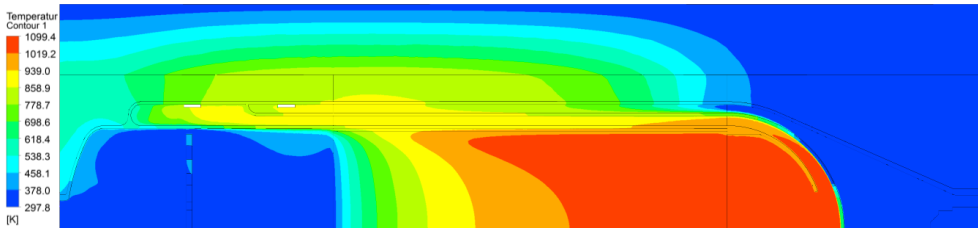


Abbildung 105: Temperaturverteilung im CAB 4 beim Betrieb mit 0,9 kg/h Wasserstoff

Die Auswertung der Temperaturverteilung ist an die zuvor gezeigte Hotspotanalyse (siehe Abbildung 102) angelehnt. Alle Temperaturen halten die kritischen Grenzwerte der Materialien ein. Aus diesem Grund ist der vorgeschlagene Betrieb technisch möglich. Die Abstände zwischen den Grenztemperaturen und den auftretenden Temperaturen liegen im Bereich zwischen ca. 120 K und 320 K und bieten somit ausreichende Sicherheitsabstände. Im Fall der Dampfauslasstemperatur ist der Abstand zur Grenztemperatur mit ca. 6 K sehr gering. An dieser Stelle empfiehlt sich eine Erhöhung des Wassermassenstroms. Der Referenzwert für den Wassermassenstrom beträgt in dieser Simulation 4,18 kg/h (12 kg/h für alle Reaktoren). Das Einspritzsystem ist für 100 kg/h ausgelegt.

2.6.6 Schlussfolgerungen und Fazit

Die Analysen haben gezeigt, dass die Katalytbrenner der vierten Generation (CAB 4) in einem Verbundsystem bestehend aus drei Reaktoren als Abgasnachbehandlungssystem im Demonstrator eingesetzt werden können. Neben den Anforderungen aus dem regulären Betrieb ist es zusätzlich möglich das PGT-System für den Anfahrvorgang der Anlage zu nutzen. Wichtig ist zu erwähnen, dass diese theoretische Analyse durch experimentelle Versuche validiert werden muss. Ergebnisse aus der Testphase des Demonstrators liegen zum Berichtszeitpunkt noch nicht vor. Der Partner Mitsubishi Power Europe GmbH hat aber die Brenner bereits erfolgreich in Betrieb genommen und wird Abgasmessungen in die zukünftigen Tests integrieren.

3 Darstellung des Nutzens und der Verwertbarkeit

Mit dem Ziel den Nutzen und die Verwertbarkeit der Forschungsleistungen des Forschungszentrums Jülich im ALIGN-CCUS Projekt darzustellen, wird das Kapitel 3 in drei Abschnitte eingeteilt. Im ersten Abschnitt 3.1 werden die Erfolgsaussichten der Projekteinhalte aus technischer und wissenschaftlicher Sicht bewertet. An diese Darstellung knüpft eine weitere Literaturanalyse an, welche Erfolge und Erkenntnisse außerhalb des Projekts auf den relevanten Themenfeldern zu den in diesem Bericht dargestellten Inhalten einordnen (siehe Abschnitt 3.2). Dieser Analyse steht die Darstellung der eigenen Veröffentlichungen in Abschnitt 3.3 gegenüber.

3.1 Fortschreibung des Verwertungsplanes

Die Fortschreibung des Verwertungsplanes bezieht die Anmeldung möglicher Patente (Abschnitt 3.1.1) sowie die Einordnung der wirtschaftlichen Erfolgsaussichten nach dem Projektende (Abschnitt 3.1.2) mit in die Betrachtung ein. Als letzter Teil werden die wissenschaftlichen bzw. technischen Erfolgsaussichten der Demonstratortechnologie und der Kraftstoffalternativen bewertet (Abschnitt 3.1.3).

3.1.1 Erfindungen/Schutzrechtsanmeldungen/erteilte Schutzrechte

Im Rahmen des Projektes ALIGN-CCUS wurden keine Patentanmeldungen vorgenommen.

3.1.2 Wirtschaftliche Erfolgsaussichten nach Projektende

Die Ergebnisse werden von und mit den industriellen Partnern in Nachfolgeprojekten wie *Take-Off* und *Power-to-BioJetFuel* technologisch weiterverfolgt und abgesichert. *Take-Off* wird vom ALIGN-CCUS Partner TNO koordiniert und fokussiert in der *Power-to-Fuel* Kette auf Kerosin. Leider wurde das Forschungszentrum Jülich seitens des Koordinators aus Proporzgründen nicht berücksichtigt. Der von Jülich gestellte katalytische Brenner wird aber für *Take-Off* im Rahmen einer bilateralen Kooperation mit Mitsubishi Power Systems weiterverwendet. Darüber hinaus besteht die Option solche Brenner auch für zukünftige Anlagen zur Synthese flüssiger Elektrokraftstoffe einzusetzen. Dabei ist ein schrittweises *Up-Scaling* geplant, um langfristig Anlagen einer Syntheseleistung von 30 – 300 MW_{th} (LHV) zu adressieren. Die in ALIGN-CCUS aufgebaute Demonstratoranlage erreicht mit einer Produktionsrate von 2-3 kg DME/ h eine Syntheseleistung von 16 – 24 kW_{th} (LHV).

In der Studie „*Demonstrationsprojekt NRW-Revier-Power-to-BioJetFuel*“ wird mit den Partnern RWE Power, RWE Renewables, BP Europe und Forschungszentrum Jülich ein Konzept und das Potential einer Demonstrationsanlage für die Produktion von erneuerbarem synthetischen Flugzeugtreibstoff als Beitrag zur Transformation der Reviere in NRW analysiert. Hier lassen sich die erarbeiteten Methoden der Prozessanalyse und der techno-ökonomischen Analyse erneut sehr gut einbinden und weiterentwickeln.

Im parallel ablaufende Projekt *Closed Carbon Cycle (C³) Mobility* Projekt werden die in ALIGN-CCUS erarbeiteten Ergebnisse der technischen Analysen für DME und OME₃₋₅ mit anderen Elektrokraftstoffen wie Methanol, Butanol, Oktanol und *Methanol-to-Gasoline*-Kraftstoffen verglichen. Daraus lassen sich Handlungsempfehlungen für zukünftige Kraftstoffketten ableiten.

In aktuellen Projektanträgen werden derzeit eine Reihe von Prozessanalysen für *Power-to-Fuel* und *Power-to-Chem* Anwendungen eingebracht. Damit können Umsetzungs- und

Transferstrategien im *Power-to-X*-Bereich weiterentwickelt werden. *Power-to-X*-Technologien sind ein wichtiges Element für die Energiewende und die damit verbundenen Ziele zur CO₂-Reduktion in 2050.

Damit ist das Forschungszentrum Jülich in der Lage durch die Einwerbung von Drittmitteln an der technologischen Weiterentwicklung mit Industriepartnern weiterzuarbeiten. Es ist auch geplant technische Lösungen zur erarbeiten, zu testen und bis zur Komponenten- und Systementwicklung weiterzutreiben. Hier lässt sich eine Wertschöpfung aus Patent- bzw. Lizenzvergaben ableiten.

3.1.3 Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten

Power-to-X-Technologien sind als Element der Sektorkopplung neben der Wasserelektrolyse ein Kernthema der Wasserstoffstrategie der Bundesregierung. Im wissenschaftlichen Bereich entstehen an zahlreichen Forschungseinrichtungen und Universitäts-Lehrstühlen zahlreiche Veröffentlichungen. Die Ergebnisse fließen auch in Lehrveranstaltungen und in die akademische Ausbildung von Doktoranden. Es ist zu erwarten, dass in den nächsten Jahren zahlreiche Entwicklungen den Weg vom Labor und Technikum über kleinere Demonstrationsanlagen wie in ALIGN-CCUS dargestellt in großtechnische Versuchsanlagen finden werden. Bis 2030 sind nennenswerte Mengen an Elektrokraftstoff bereitzustellen, damit ein Markteintritt realisiert werden kann. Eine wirtschaftliche Anschlussfähigkeit ist gegeben, hängt aber von der techno-ökonomischen Performance ab, die mit den in ALIGN-CCUS erarbeiteten Methoden analysiert werden kann.

Die wissenschaftliche Verwertung der unterschiedlichen Arbeitspakete wurde durch das Forschungszentrum Jülich mittels Konferenzbeiträgen und durch wissenschaftliche Beiträge in einschlägigen Fachzeitschriften vorgenommen. Die Ergebnisse der ökologischen Bewertungen der Demonstratortechnologie konnten auf mehreren internationalen Konferenzen (siehe Abschnitt 3.3) präsentiert und diskutiert werden. Methodische Weiterentwicklungen konnten auch in anderen Projekten, wie dem vom Land NRW geförderten OP EFR NRW Kompetenz-Zentrum Virtuelles Institut - Strom zu Gas und Wärme oder dem BMBF geförderten Kopernikus P2X Projekt eingebracht werden. Im letzteren Projekt wurden zudem die in WP 5 durchgeführten Modellierungen und Auswertungen zum NRW Cluster auf das gesamtdeutsche System ausgeweitet.

Derzeit ist das Forschungszentrum Partner im Projekt „EverLong“ unter Federführung von TNO. In diesem Projekt wird das Forschungszentrum eine LCA zu CO₂-Abscheidung auf Schiffen mit anschließender Speicherung oder Nutzung des CO₂ erstellen.

Die Methoden und Erfahrungen zur Stakeholderbefragung sind in die erfolgreiche Einwerbung des interdisziplinären Projektes Transform2Bio (Integrierte Transformationsprozesse und deren regionale Implementierung – Strukturwandel von fossiler Ökonomie zur Bioökonomie) das vom Ministerium für Kultur und Wissenschaft des Landes Nordrhein-Westfalen im Rahmen des NRW-Strategieprojekt BioSC gefördert wird eingeflossen. Am Beispiel des Strukturwandels des Rheinischen Reviers werden sozio-technische Dynamiken analysiert und regionale Implementierungsoptionen hin zu einer regional-zusammenhängenden nachhaltigen Bioökonomie gestaltet. Darüber hinaus wird ein interaktives Stakeholder-Netzwerk, das Stakes2Bio Lab, etabliert.

3.2 Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Dieser Abschnitt stellt den Fortschritt Projekt-externer Stellen zusammen, welcher während der Projektlaufzeit erzielt wurde. Um diese Literaturarbeit zu strukturieren werden die Analysen nach den verschiedenen Themengebieten aufgeschlüsselt. Wie im bisherigen Bericht üblich werden zunächst in Abschnitt 3.2.1 und Abschnitt 3.2.2 die Vergleiche zu Arbeiten aus dem Bereich der techno-ökonomie herausgestellt. Die Analyse im Bereich der LCA findet in Abschnitt 3.2.3 statt. In Abschnitt 3.2.4 werden dann die industriellen Cluster sowie unterschiedliche PtF-Systementwürfe ausgewertet. Abgeschlossen wird dieses Kapitel durch den Abschnitt 3.2.5, welcher die Arbeit auf dem Gebiet der sozialen Akzeptanzforschung einordnet.

3.2.1 Literaturanalyse zu begleitenden Veröffentlichungen im Bereich der Verfahrensanalysen

Die Literaturanalyse deckt alle relevanten Themenfelder der techno-ökonomischen Analyse ab. Besonders hervorgehoben werden die Methanol, DME und OME₃₋₅-Synthesen sowie der Vergleich der Produktgestehungskosten mit externen Arbeiten.

3.2.1.1 Methanol-Synthese

Marlin et al. [154] beschreiben in ihrer Veröffentlichung die verfahrensbedingten Veränderungen der CO₂-basierten Methanolsynthese anhand einer Pilotanlage des Unternehmens Carbon Recycling International in Island. Im Vergleich zur konventionellen Synthese stellen Marlin et al. [154] fest, dass die CO₂-basierte Methanolsynthese sauberer, weniger energieintensiv und umweltfreundlicher ist. Die Verfahrensauslegung ähnelt der in Abschnitt 2.1.3 beschriebenen Prozesssimulation zur Methanolsynthese, wobei hier die Produktaufbereitung durch eine einzelne Kolonne angenähert wird und Marlin et al. [154] dagegen mehrere Kolonnen integrieren. Die Anlage in Island gilt weitläufig als Vorbild für PtF-Verfahren und besitzt aus diesem Grund eine besondere Bedeutung für die Arbeit im ALIGN-CCUS Projekt.

Dieser kommerziellen Anlage stehen verschiedene Forschungsprojekte gegenüber, welche die Synthese von Methanol im Themenfeld von Power-to-Fuel untersuchten:

Im MefCO₂-Projekt wurde ebenfalls am Standort Niederaußem eine PtF-Anlage aufgebaut. Die Partner CRI, RWE und MHPS nahmen eine Methanolsyntheseanlage in Betrieb. Die öffentlich zugänglichen Deliverables [155, 156] lassen sich allerdings nicht prozesstechnisch auswerten und mit den Ergebnissen der Simulationen vergleichen. Die Methanolanlage wurde für 1 t/Tag Produktionskapazität ausgelegt und konnte auch einer flexiblen Betriebsstrategie folgen. Die Laständerungen konnten mit Gradienten von 20 %/min bis 40 %/min aufgebracht werden. Die Rezyklierung besaß dabei eine Antwortzeit von ca. 3 – 5 min. <https://cordis.europa.eu/project/id/637016/reporting/de>

Einen hohen Verwandtschaftsgrad zum ALIGN-CCUS Projekt kann auch dem Forschungsvorhaben Carbon2Chem® [157-159] zugeordnet werden. Im Carbon2Chem werden u. A. Hüttengase als Rohstoffe für chemische Prozesse untersucht. Im Arbeitspaket L2 wird die Synthese von Methanol auf eben dieser Basis analysiert. Eine Pilotanlage konnte 2019 am Standort Duisburg in Betrieb genommen werden und soll ab 2020 ca. 75 t Methanol pro Tag produzieren (Pressemitteilung <https://www.umsicht.fraunhofer.de/de/presse->

medien/pressemitteilungen/2019/Methanolanlage.html). Detaillierte Ergebnisse aus dem Betrieb der Forschungsanlage stehen aus.

3.2.1.2 DME-Synthesen

Einen sehr detaillierten Überblick über die Herstellungsverfahren der DME-Synthese geben die Literaturreviews von Azizi et al. [8] (2014) und Bozzano et al. [160] (2016), welche für die Verfahrensauslegung in der techno-ökonomischen Bewertung verwendet wurden. Diese Arbeiten waren bereits zu Beginn der Projektlaufzeit verfügbar. Im Folgenden sollen neuere Entwicklungen und Veröffentlichungen im Bereich der DME-Synthese ausgewertet werden, die während der Projektlaufzeit erschienen sind.

Im Anschluss an die oben genannten Reviews schlussfolgern Dieterich et al. [68] (2020), dass im Gegensatz zu Power-to-Methanol und Power-to-Fischer-Tropsch, Power-to-DME weniger untersucht wurde und sich diese Technologie in einer im Vergleich früheren Entwicklungsstufe befindet. Betriebserfahrungen aus Pilotanlagen fehlen und genau an diesen Punkt hat das ALIGN-CCUS Projekt angesetzt und versucht eine Forschungslücke zu schließen. Das Projekt kann in diesem Zusammenhang als Vorreiter angesehen werden.

Alvarez et al. [161] analysieren sehr tiefgehend die Reaktionsbedingungen für verschiedene CO₂-Hydrierungen und stellen Ergebnisse im Bereich der Katalysatorforschung für die Synthesen von Methanol und DME vor. H-ZSM-5 wird als bester Katalysator herausgestellt, da dieser weitläufig verfügbar und wasser-tolerant ist. In der Prozessanalyse wurde durch die Gleichgewichtsmodellierung die kinetische Modellierung des Katalysators vernachlässigt und ein effektiver Katalysator – auch in Verbindung mit der Methanolsynthese (Cu-ZnO-AL₂O₃) – vorausgesetzt.

De Falco et al. [162, 163] zeigen in ihren Arbeiten die Entwicklung eines Membranreaktors zur Prozessintensivierung der direkten DME-Synthese. Ein solcher Reaktor wurde durch die in Abschnitt beschriebene in-situ Wasserabscheidung simplifiziert abgebildet. Diese Optimierung des Verfahrens besitzt einen positiven Einfluss auf den Systemwirkungsgrad und sollte für die direkte Synthese angewendet werden.

3.2.1.3 OME₃₋₅-Synthesen

Während der Projektlaufzeit erhielt die OME₃₋₅-Synthese vor dem Hintergrund der Energiewende im Verkehr eine deutlich gesteigerte Relevanz und verschiedensten Forschergruppen in Deutschland als auch international haben sich mit dem Themenfeld beschäftigt. Die Arbeiten besitzen unterschiedliche Bezüge zu der Arbeit des Forschungszentrums und sollen an dieser Stelle in den Abschlussbericht zum ALIGN_CCUS Projekt eingegliedert werden. Für den folgenden Vergleich müssen noch weitere Kennziffern für die Prozessbewertung eingeführt werden. Die Kennziffern sind der Dissertation von Schemme [63, S. 77] entnommen.

$$\eta_{LHV} = \frac{\dot{m}_K \cdot H_{u,K}}{\dot{m}_{H_2} \cdot H_{H_2}} \quad \text{Gl. 21}$$

$$\eta_A = \frac{\dot{m}_K \cdot H_{u,K}}{\dot{m}_{H_2} \cdot H_{H_2} + P_A} \quad \text{Gl. 22}$$

Der chemische Umsetzungsgrad η_{LHV} bilanziert wieviel der im H_2 gebundenen Energie im Ausgangsprodukt gespeichert werden kann. Der Anlagenwirkungsgrad η_A bilanziert zusätzlich noch die energetischen Aufwändungen innerhalb des Prozesses. Mit diesen beiden Kennziffern können zusätzlich zum PtF-Wirkungsgrad Vergleiche zu externen Arbeiten und Autoren gezogen werden.

Ouda et al. [16] präsentieren in ihrer Arbeit eine mathematische Modellierung zur Beschreibung von Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichten in Mischungen aus Formaldehyd, Wasser und Methanol. Diese mathematische Modellierung wird auf die OME₃₋₅-Syntheserouten A und B angewendet und deren Wirkungsgrad abgeschätzt. In einer auf dieser Modellierung aufbauenden Veröffentlichung von Ouda et al. [164] wird die Syntheseroute A genauer analysiert. Ouda et al. [164] verknüpfen die Prozesssimulationen und Batch-Reaktor Experimente mit einer Kostenabschätzung. Die beiden vorgestellten Arbeiten besitzen offensichtlich großen inhaltlichen Bezug zu den Arbeiten des Forschungszentrums im ALIGN_CCUS Projekt. Es sei darauf verwiesen, dass unterschiedliche Software für die Prozesssimulationen eingesetzt wurden und somit auch die Modellierungsansätze sich unterscheiden. Für die OME₃₋₅-Synthese nach Route A geben Ouda et al. [164] eine Prozesseffizienz von ca. 86,4 % an, welche im direkten Vergleich mit den selbst bestimmten Werten sehr hoch liegt. Der vom Forschungszentrum Jülich bestimmte Anlagenwirkungsgrad der OME₃₋₅-Synthese liegt bei ca. 40,9 %. Der chemische Umsetzungsgrad bei ca. 59,8 %.

Held et al. [165, 166] bewerten die Synthese Routen A und B der OME₃₋₅-Synthese energetisch durch die Einführung von Szenarien für die Systemauslegung. Die Produktionssysteme werden dabei mit verschiedenen CO₂-Abscheidetechnologien gekoppelt. Der Gesamtwirkungsgrad dieser Produktionssysteme steht in guter Übereinstimmung mit den in diesem Bericht bestimmten Werten. Für die Kopplung mit einem PCC-Verfahren (engl. post combustion capture) liegen die Werte für den Power-to-Fuel Wirkungsgrad ebenfalls unterhalb von 30 %. Diese Analyse kann also als eine Bestätigung der hier aufgezeigten Prozesskette verstanden werden.

Held et al. [165, 166] verwenden in ihrer Arbeit die Prozessauslegungen des Lehrstuhls für Thermodynamik an der Universität Kaiserslautern von Prof. Hasse und Prof. Burger (ehemals Kaiserslautern, jetzt Technische Universität München). Diese Arbeiten wurden – wie bereits erwähnt – ebenfalls für die Prozessauslegung herangezogen. Während der Projektlaufzeit sind hier einige Arbeiten mit starker Relevanz zur präsentierten Analyse hinzugekommen. Schmitz et al. [20] etablieren in ihrer Arbeit die Verfahrensrouten A für die OME₃₋₅-Synthese mit einer innovativen Adsorptionstechnologie. Diese Veröffentlichung von Schmitz et al. [20] wurde dementsprechend für die Prozessauslegung herangezogen. Um das vorgeschlagene Anlagenkonzept umzusetzen, haben Schmitz et al. [167] kommerzielle Zeolith- und Polymermembranen für die Produktaufbereitungen untersucht. Der Einsatz von solchen Membranen ist vielversprechend, um den Energiebedarf der Synthese zu reduzieren. Allerdings wurde dieser Ansatz der Prozessintensivierung in dieser Arbeit nicht berücksichtigt. Schmitz et al. [168] haben ebenfalls wie auch Ouda et al. [16] ihre Modellierung zur Beschreibung von Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichten in Mischungen aus Formaldehyd, Wasser, Methanol, Trioxan und diversen OME-Molekülen veröffentlicht. Die Modellierung konnte durch geeignete Experimente validiert werden. Diese Arbeit kann zukünftig für die Entwicklung von neuen Verfahren genutzt werden.

Breitkreuz et al. [169] stellen in ihrer Prozessanalyse zur OME₃₋₅-Synthese nach Route C ebenfalls fest, dass die Route C mehr Energie benötigt als Route B, dafür aber mit einem günstigeren Zwischenprodukt (DME) arbeitet. Eine ökonomische Bewertung dieser Verfahrensauslegung liegt nicht vor. Aus den Ergebnissen der eigenen techno-ökonomischen Analyse ist allerdings ablesbar, dass der angesprochene Vorteil durch die Verwendung von DME nicht zum Tragen kommt und die Route C in allen Bereichen schlechter als Route B abschneidet. Route A gilt weiterhin als wirtschaftlichste Synthese-Route für die Produktion von OME₃₋₅.

Pelaez et al. [170] haben in einer kinetischen Studie mit unterschiedlichen Reaktoren gezeigt, dass die Zersetzung von Trioxan der geschwindigkeitsbestimmende Schritt in der OME₃₋₅-Synthese nach Route B ist. Die kinetische Modellierung könnte in die Prozessanalyse integriert werden um die Modellierungstiefe an dieser Stelle zu verbessern, wobei die Bildung der OME₃₋₅-Moleküle dem chemischen Gleichgewicht folgt und daher eine überaus gute Übereinstimmung besteht. Klokic et al. [171] untersuchen in ihrer Arbeit ebenfalls die Synthese nach Route B. Klokic et al. [171] zeigen, dass neben Schwefelsäure auch Methansulfonsäure und Deloxan® als Katalysatoren eingesetzt werden können, um die Ausbeute an OME₃₋₅ zu steigern.

3.2.2 Literaturanalyse zu begleitenden Veröffentlichungen im Bereich der Ökonomie von alternativen Kraftstoffen

Wie bereits in Abschnitt 3.2.1.3 erwähnt besitzt die Arbeit von Ouda et al. [164] eine große inhaltliche Nähe zu den Analysen im ALIGN Projekt. An diese technische Bewertung ist ebenfalls eine ökonomische Abschätzung angegliedert. Die von Ouda et al. [164] angegebenen Kosten für die OME₃₋₅-Synthesen liegen bei 772,5 US\$/t bei einer jährlichen Produktionskapazität von 30 kt/a (571 US\$/t bei 1 Mt/a). Dem stehen Kosten von 1481,6 – 2988,1 US\$/t bei einer jährlichen Produktionskapazität von 449,51 kt/a in der Bewertung des Forschungszentrum Jülichs gegenüber. Der Grund für diese gewaltige Kostenspreizung liegt im Aufbau der erneuerbaren Produktionskette in diesem Bericht. Als Eingangsstoffe werden H₂ und CO₂ mit den zugeordneten Bereitstellungskosten bilanziert. Die ökonomische Analyse nach Ouda et al. [164] basiert auf der Nutzung von Methanol. Dieses Methanol wird zu marktüblichen Preisen von ca. 400 US\$/t bezogen. Um vergleichbare Methanolbezugskosten im Systemverbund der OME₃₋₅-Synthese zu erzielen müsste H₂ mit ca. 1 €/kg und CO₂ mit 0,035 €/kg bereitgestellt werden. Bei diesen Bedingungen liegen die Produktgestehungskosten für OME₃₋₅ von ca. 804 €/t bzw. 973 US\$/t. Ouda et al. [164] vergleichen ihre Kostenschätzung mit Angaben von OME-technologie GmbH/TU Kaiserslautern (ca. 660 US\$/t) und Jiangsou Kaimao Co. Ltd. (ca. 670 US\$/t) und zeigen so ein einheitliches Bild der Gestehungskosten. Damit liegen die angegebenen und selbst-bestimmten Kosten in einem ähnlichen Bereich, wobei die eigene Abschätzung höhere Kosten vorhersagt. Allein an dieser Betrachtung wird schon ersichtlich, wie komplex der direkte Vergleich von Wirtschaftlichkeitsbetrachtungen mit unterschiedlichen Randbedingungen und Parameterisierungen ist.

Brynnolf et al. [92] zeigen in ihrer Meta-Studie, dass die größten Einflussfaktoren auf die Gestehungskosten von alternativen Kraftstoffen durch äußere Faktoren wie z. B. die Investitionskosten der Elektrolyse und die Strombezugskosten vorgegeben werden. Diese beiden Faktoren stehen in dieser techno-ökonomischen Analyse exemplarisch für die H₂-Bereitstellungskosten. Die Arbeit von Brynnolf et al. [92] wurde bereits zur Validierung der

eigenen Kostenmodellierung in Abschnitt 2.2.4 eingesetzt. Die bestimmten Investitionskosten zeigen für die exemplarisch untersuchte Methanolsynthese eine gute Übereinstimmung. Dementsprechend liegen die bestimmten Produktgestehungskosten auch nah zusammen. Für 2015 geben Brynolf et al. [92] einen Kostenbereich für Methanol von ca. 1,11 – 1,55 €/kg an. In der eigenen Analyse wurden Referenzkosten mit dem Basisparametersatz von 1,06 €/kg bestimmt. Die Sensitivitätsstudie zeigte einen möglichen Bereich von 0,62 – 1,5 €/kg, was sehr gut mit den Werten von Brynolf et al. [92] übereinstimmt.

Decker et al. [98] analysieren die zeitaufgelöste PtF-Produktion von Methanol und Fischer-Tropsch-Produkten an unterschiedlichen Standorten in Deutschland. Eine in Cuxhaven platzierte Methanolanlage ist in der Lage für 1,73 €/l_{GE} zu produzieren. Umgerechnet auf die Bezugsgröße von 1L-Diesel-Equivalent bedeutet Gestehungskosten von ca. 1,93 €/l_{DE}, was sehr genau mit den hier bestimmten Kosten übereinstimmt.

Schnuelle et al. [172] untersuchen die Markteinführung und –entwicklung mithilfe einer Agenten-basierten Modellierung für PtF-Kraftstoffe (Methan, H₂ und Power-to-Liquids) in Deutschland. Die Verfahren werden allerdings nicht spezifisch auf bestimmte Produkte ausgerichtet, sondern pauschal mit einem Wirkungsgrad von 50 % und spezifischen Investitionskosten parametrisiert. Die Kosten für diese Verfahren liegen innerhalb der Szenarien zwischen 15,4 ct/kWh und 38,7 ct/kWh, was übertragen auf Methanol zu Kosten von ca. 0,86 €/kg bis 2,1 €/kg entspricht. Dieser Kostenbereich deckt sich zum großen Teil mit den modellierten Kosten, wenngleich die obere Grenze sehr weit nach oben verschoben ist.

Bellotti et al. [173] weist vom Systemdesign eine besonders hohe Nähe zum ALIGN-CCUS Projekt auf, da hier ein PtF-Produktionssystem mit einer CCS-Anlage an einem Kohlekraftwerk gekoppelt wird. Die Analyse von Bellotti et al. [173] zeigt, dass der ausgewählte Betriebspunkt der Methanolsynthese mit 80 bar Betriebsdruck eine gute Wahl im Bezug auf die Techno-Ökonomie darstellt. Bellotti et al. [173] bestimmen Methanolgestehungskosten von ca. 800 €/t, was einer Verdopplung der typischen Marktpreise entspricht. Diese Kosten entsprechen dem unteren Lösungsraum der hier aufgezeigten Analyse (s.o.).

Die vorgestellten Publikationen verdeutlichen somit die treffende Kostenschätzung dieser techno-ökonomischen Analyse. Die Auslegungen sind im Rahmen der Literaturanalyse eher als konservativ einzuschätzen, dies gilt besonders für die Synthesen von OME₃₋₅. Die Kostenschätzung neigt eher zu höheren Gestehungskosten im Vergleich zu Methanol. Dies zeigt, dass die Verfahrensauslegung konservativ einzustufen ist, obwohl eher niedrigerer Werte für die Kosten der H₂-Bereitstellung ausgewählt wurden (vgl. Abschnitt 2.2.2).

3.2.3 Literaturanalyse zu begleitenden Veröffentlichungen im Bereich der LCA-Analysen von alternativen Kraftstoffen

Während der Projektlaufzeit stieg das Interesse an den ökologischen Auswirkungen durch den Einsatz von CCUS deutlich an. Thonemann [174] identifizierte in einem Review zu CO₂ basierten Chemikalien alleine 38 von 52 LCA-Studien in den Jahren 2016-2019. Neben Thonemann [174] führte auch Artz et al. [175] eine systematische Literaturrecherche zu CCU Studien durch. Dabei wurden vielversprechende Produktionspfade in allen Bereichen von CCU identifiziert. Thonemanns [174] Hauptfokus lag auf der Chemikalienproduktion, Artz et al. [175] haben daneben die Herstellung synthetischer Brennstoffe für den Mobilitätssektor mit einbezogen. Auch wenn die Produktionspfade grundsätzlich sehr verschieden sind, ist auch hier eine Kernaussage der Ergebnisse, dass der intensive Einsatz erneuerbarer Energien unabdingbar ist, um GWP zu reduzieren. Dies gilt insbesondere für die Produktionspfade der

Kraftstoffherstellung mit dem Einsatz von H_2 im Syntheseprozess. Ein hoher Einsatz erneuerbarer Energie kann wiederum zum Anstieg der Werte in anderen Wirkungskategorien führen, beispielsweise höhere Auswirkungen für Ecotoxizität durch erhöhten Kupferbedarf für Windenergieanlagen.

In einem weiteren Review verglichen Koj et al. [165] 32 LCA-Studien, die entweder ökologische, technologische oder methodische Aspekte von Power-to-X-Systemen analysieren. Neben den unterschiedlichen Power-to-X Pfaden standen hier unterschiedliche Ansätze der LCA Methodik im Fokus. Auch Koj et al. [165] stellten den entscheidenden Einfluss der Stromquelle heraus. Unter den methodischen Aspekten ist das Konzept der Allokation für die CO_2 -Bereitstellung ein entscheidender Treiber bei der Interpretation der Umweltauswirkungen. Die Zuordnung der Aufwendungen hat einen wesentlichen Einfluss auf die Ergebnisse und sollte in Sensitivitätsanalysen untersucht werden. Im Rahmen des ALIGN-CCUS Projektes wurden daher auch unterschiedliche Allokationsmethoden untersucht und mit den Projektpartnern diskutiert, bevor sich auf die in diesem Bericht genutzte Form der Darstellung geeinigt wurde (siehe Abschnitt 2.3.1.2).

Methodische Fragestellungen, wie die Allokationsmethoden, werden in vielen Veröffentlichungen diskutiert. Dabei geben methodische Guidelines einen Leitfaden zur Vorgehensweise. Beispielsweise wird insbesondere in Müller et al. [109] die Doppelrolle des CO_2 als Abfall und Wertstoff thematisiert, mitsamt der damit einhergehenden Allokationsproblematik. Auch Ramirez et al. [166] greifen diesen Punkt auf, diskutieren aber auch die Wichtigkeit einer ganzheitlichen Betrachtung im Lebenszyklus in Deckung mit der Zieldefinition oder auch die Unsicherheit für die Ergebnisse einer LCA, die ein niedriges TRL mit sich bringt. Die umfassende Guideline von Zimmermann et al. [167] diskutiert außerdem die Vorteile, die eine parallele Durchführung von LCA mit TEA mit den gleichen Input-Parametern mit sich bringt.

Für CCUS oder Power-to-X Systeme werden diese Guidelines genutzt, um möglichst vielversprechende Routen aus der Vielzahl von Möglichkeiten zu identifizieren. In einer 2019 veröffentlichten Studie der Europäischen Kommission [176] wird die LCA als ein Bewertungswerkzeug genutzt, um aus einer Liste von 130 Produkten die vielversprechendsten Technologien zur CO_2 -Abscheidung und -nutzung zu identifizieren. Zu den 15 vielversprechendsten CCU-Routen, die in die engere Wahl genommen wurden, gehören: Kraftstoffe und Basischemikalien (Ethanol, Methan (biologisch), Methan (chemisch hydrierend), Methanol, Oxymethylenether (OME1)), Chemikalien (Ethylen; Propylen), die für die Herstellung von Polymeren (Polyethylen (PE)), Polyoxymethylen (POM), Polypropylen (PP), Polycarbonat (BisA-PC), Polyole für die Herstellung von Polyurethan ((PU)-Schäumen) und Mineralien (Kalzium- und Natriumkarbonat) bestimmt sind.

Im BMBF geförderten Kopernikusprojekt Power-to-X wird LCA ebenfalls genutzt, um die verschiedenen Technologieentwicklungen zu bewerten. Für jede der drei Wasserstoff bzw. Synthesegas-Produktionstechnologien sowie den Nutzungsoptionen Kraftstoffe und chemische Grundwerkstoffe wurden in der Roadmap Auswertungen zu den ökologischen Effekten aufgezeigt [177]. Um die Bedeutung der Strombereitstellung zu verdeutlichen wurde der Einfluss unterschiedlicher Strommische mit unterschiedlichen Anteilen erneuerbaren Stroms für die Jahre 2017, 2030 und 2050 verglichen. Auch hier zeigte sich, dass nur bei der ausschließlichen Nutzung erneuerbaren Stroms ein Vorteil für die CCU-Technologien erlangt werden konnte. Zusätzlich wurden auch noch zwischen zwei Betriebsweisen der Syntheseprozesse unterschieden, einem kontinuierlichen Betrieb und einer netzdienlichen,

verminderten Betriebsweise. Beim netzdienlichen Betrieb wurden deutlich weniger Betriebsstunden erreicht, was den Einfluss der Bauphase auf die Umweltwirkungen merklich erhöht. Im Rahmen dieses Projektes ist auch die Bewertung ökologischer Auswirkungen der OME Produktion entstanden [14]. Die Studie von Deutz zeigt, dass OME₁ das Potenzial hat, als nahezu kohlenstoffneutrale Mischungskomponente zu dienen. In einer weiteren Studie wird die Produktion von synthetischem Diesel aus CO₂ mittels Direct Air Capture und Fischer-Tropsch-Synthese analysiert. Liu et al. [178] zeigen, dass ein CO₂-Wert von 139 g/kWh produziertem Strom nicht überschritten werden darf, damit der synthetische Diesel umweltfreundlicher ist als fossil produzierter Diesel.

Ergebnisse einer LCA Studie zur Nutzung von OME₃₋₅ in Fahrzeugen wurden von Hank et al. [115] 2019 veröffentlicht. Die LCI Daten der Untersuchung, insbesondere zu Emissionswerten am Fahrzeug, beruhen auf Abschätzungen, die einer Literaturrecherche entstammen. Im ALIGN-CCUS Projekt wurden deutliche Unterschiede zu den in Hank et al. [115] angegebenen Emissionswerten und Ergebnissen sichtbar. Zunächst sind die Emissionswerte der Messungen des Projektpartners VKA, RWTH Aachen deutlich geringer und führen zu geringeren Umweltwirkungen in allen untersuchten Wirkungskategorien. Auf der anderen Seite unterscheiden sich die Angaben zum Energieverbrauch für die Synthese deutlich – der Energiebedarf der Wasserstoffbereitstellung wird in Hank et al. [115] beispielsweise knapp 20 % geringer angegeben als die uns vorliegenden LCI des Elektrolyseur-Herstellers Asahi Kasei. Insgesamt kommen Hank et al. [115] im Vergleich dadurch auf geringere Werte für die GWP-Auswirkungen. Nichtsdestotrotz ist auch hier das Ergebnis, dass ein hoher Einsatz an erneuerbaren Energien für die Strombereitstellung unerlässlich ist.

Im Forschungsprojekt ‚XME-Diesel – Bio-Methylether als alternative Kraftstoffe in bivalenten Diesel-Brennverfahren‘ (Laufzeit 1.6.2015 – 31.3.2019) wurde die Anwendung der Kraftstoffe DME und OME₁ für Dieselmotoren im Pkw- und Nutzfahrzeugbereich erforscht. Unterschiedliche zukünftige Anforderungen wie CO₂-Emissionsreduktion, verfügbare Normen, globale Verfügbarkeit und niedrige Kosten wurden dabei berücksichtigt. Insbesondere der Einsatz von DME erwies sich in der Untersuchung als vielversprechend. Die Leistungsfähigkeit von DME wurde anhand von grundlegenden Einspritzkammermessungen über Einzylinder- und Vollmotortests bis hin zu Demonstratorfahrzeugen (Ford Mondeo) analysiert und demonstriert. Ergebnisse von Emissionsmessungen wurde von FORD für die Arbeiten im ALIGN-CCUS Projekt bereitgestellt. Daraus resultierende Veröffentlichungen sind in Arbeit.

3.2.4 Literaturanalyse zu begleitenden Veröffentlichungen im Bereich der industriellen Clusterforschung

Eine Vielzahl von Forschungsprojekten beschäftigt sich mit der Thematik der synthetischen Kraftstofferzeugung. Beispielsweise das Verbundvorhaben „MENA-Fuels“, in welchem Synthesewege, synthetische Kraftstoffbedarfe, deren Ökonomie und mögliche Transformationspfade untersucht werden. Unter der Annahme, dass die inländischen Kapazitäten nicht ausreichen, den Kraftstoffbedarf in Deutschland zu decken, wird ein besonderer Fokus auf die „MENA“-Region („Middle East & North Africa“, Nahost und Nordafrika) zur synthetischen Kraftstofferzeugung gelegt (detaillierte Information siehe zum Beispiel Webseite des IZES gGmbH [179]). Ein weiteres Beispiel ist das Forschungsprojekt „NAMOSYN - Nachhaltige Mobilität durch synthetische Kraftstoffe“. Im Mittelpunkt steht hierbei die Entwicklung und Testung einer Reihe verschiedener synthetischer Kraftstoffe, welche in aktuellen Fahrzeugflotten mit Otto- und Dieselmotor verwendet werden können [180].

Neben den Forschungsprojekten existiert auch eine ganze Reihe an Demonstrationsprojekten innerhalb von Europa. Wulf et al. nennen in ihrem Übersichtsartikel insgesamt 220 Forschungs- und Demonstrationsprojekte im Power-to-X Kontext [181]. Der Übersichtsartikel zeigt die enorme Entwicklungsgeschwindigkeit der verschiedenen Power-to-X-Technologien auf. Hierbei werden neben der Anzahl der Projekte und der kumulativen Anschlussleistung der Elektrolyseure ebenso die Weiterverarbeitung des produzierten Wasserstoffs sowie deren Anwendung analysiert.

Einige Fachpublikationen beschäftigen sich explizit mit regionalen Potenzialen von CCU Anwendungen, auch hinsichtlich industrieller Anwendungen. Patricio et al. schätzen das regionale Potenzial für CCU innerhalb von Europa und vergleichen ihre Ergebnisse zur verfügbaren industriellen CO₂-Menge [182]. Psarras et al. entwickeln eine Methodik, um die Kosten für CO₂-Abtrennung, Verdichtung und Transport explizit für CCU Anwendungen zu bestimmen. Die entwickelte Methodik wird auf 18 verschiedene industrielle Prozesse angewandt. Ihre Arbeit beinhaltet ebenfalls eine regionale Fallstudie für den US-Bundesstaat Pennsylvania [183].

3.2.5 Literaturanalyse zu begleitenden Veröffentlichungen im Bereich der sozialen Begleitforschung

Politische Entscheidungsträger in mehreren Ländern unterstützen die CCUS-Technologien, beispielsweise betrachtet die britische Regierung CCUS als Teil ihrer Strategie zur Reduzierung der CO₂-Emissionen [184]. Dennoch gibt es immer noch einige Unwägbarkeiten, die den Einsatz von CCUS behindern. Zum Beispiel sind laut Markusson et al. [184] die Hauptunsicherheiten: 1. die Vielfalt der existierenden Pfade; 2. die Sicherheit der Speicherung über lange Zeiträume; 3. die Skalierung und Geschwindigkeit der Entwicklung und des Einsatzes; 4. die Integration von CCUS-Systemen; 5. die wirtschaftliche und finanzielle Tragfähigkeit im Vergleich zu Alternativen; 6. die politische und regulatorische Ungewissheit; 7. die öffentliche Akzeptanz. Andere Autoren listen die Kosten der Einführung und die Sorge, dass Investitionen in CCUS politische Anstrengungen von erneuerbaren Energien und Energieeffizienz ablenken wird als Gründe für die Skepsis von NGOs auf [185].

Huaman und Jun [186] empfehlen, dass internationale Institutionen und lokale Regierungen die CCUS-Forschung und -Entwicklung fördern sollten. Da China immer noch das größte Kohleverbrauchsland der Welt ist, schlagen die beiden Autoren außerdem vor, dass China den F&E-Input für CCUS-Technologie erhöht, um zu vermeiden, dass es einen höheren Preis für den Import von CCUS-Technologie aus z. B. Deutschland zahlt. Um den Einsatz und die Entwicklung von CCUS-Projekten aus der Perspektive des Umweltmanagements in China besser zu fördern, wurde durch Li et al. [187] eine landesweite Umfrage durchgeführt, um das öffentliche Bewusstsein und Verständnis für die Umweltauswirkungen und das Management der CCUS-Technologie zu untersuchen. Die Ergebnisse zeigten: (1) Die CCUS-Technologie zeigt einige günstige Umweltvorteile, aber das Bewusstsein für hohe Umweltrisiken senkt die öffentliche Akzeptanz; (2) Regierungsabteilungen mit hohen Erwartungen spielen eine Schlüsselrolle im Umweltmanagement; (3) Informationen über CCUS-Projekte in traditionellen und elektronischen Medien oder durch Expertenvorträge und Regierungsabteilungen können das wahrgenommene Risiko senken und die öffentliche Akzeptanz von CCUS verbessern. Von besonderem Interesse ist die Feststellung, dass Chinas CCUS-Forschungsfortschritt in direktem Zusammenhang mit der zunehmenden politischen Unterstützung durch Chinas Fünfjahresplanung zu stehen scheint. Die Forschung in Bezug auf die öffentliche

Wahrnehmung, Finanzierungsmechanismen und geeignete Geschäftsmodelle für den Einsatz von CCUS ist jedoch weniger verbreitet [188].

Stephens et al. [189] stellten 2011 fest, dass sich ein internationales Netzwerk von Fachleuten (aus Regierungen, Wirtschaft, Wissenschaft und NGOs verschiedener Ländern) gebildet hatte, das sich auf die Weiterentwicklung der CCUS-Technologie konzentriert. Innerhalb dieser internationalen Gemeinschaft gab es eine gemeinsame Wahrnehmung von neuen CCUS-Technologien, die zu einer groß angelegten Reduzierung der CO₂-Emissionen aus industriellen Quellen zur Abschwächung des Klimawandels beitragen könne. Seit den gescheiterten CCS-Projekten und dem öffentlichen Widerstand gegen diese Projekte im Jahr 2012 in Deutschland haben CCS-Technologien jedoch auf den politischen Agenden und in den Forschungsaktivitäten in Deutschland an Bedeutung verloren. Im Gegenzug haben die der CCU-Technologien zugenommen.

Insgesamt ist der öffentliche Dialog zu CCUS in Deutschland relativ weit fortgeschritten. Verschiedene Arten von Stakeholdern sind an den Diskussionen beteiligt. Nichtsdestotrotz konzentrierten sich die meisten empirischen sozialen Studien, die in Deutschland durchgeführt wurden, auf die öffentliche Akzeptanz und die öffentlichen Perspektiven auf CCUS-Technologien und es liegen nur wenige Studien zu den Perspektiven der übrigen Stakeholder in Deutschland vor. Jones et al. [190] identifizierten 2017 nur wenige Gruppen, die den Fokus ihrer sozialen Begleitforschung auf CCU gelegt hatten. Schwerpunkt lag dabei auf Großbritannien [191, 192] und Deutschland [193, 194]. Ein Ergebnis der Analyse existierender Studien war die von Jones et al. [190] gesehene Notwendigkeit eine formale Stakeholder-Analyse durchzuführen, um die wichtigsten industriellen (und anderen) Stakeholder innerhalb des Sektors (sowohl Emittenten als auch Nutzer) zu identifizieren und ihre Motivationen und Anforderungen an Investitionen zu ermitteln. Ziel sollte es sein Hebel, Synergien und Handlungsoptionen zu identifiziert, die sowohl aus politischer als auch aus industrieller Sicht ergriffen werden können. Dies ist im ALIGN CCUS Projekt erfolgt.

Olfe-Kräutlein et al. [194] identifizierten in ihrer Studie als potenzielle Treiber für eine CCU-Implementierung das Vorhandensein einer starken chemischen Industrie (wie z.B. in Deutschland, Niederlande, Korea), einer fördernden Öl- oder Gasindustrie, die ein Interesse an "Enhanced Recovery"-Anwendungen hat (wie z.B. in Kanada, USA), oder Länder, die weiterhin fossile Energieressourcen für ihre Energieversorgung nutzen wollen (wie z.B. China),

Von den existierenden Studien zur Wahrnehmung und Akzeptanz von CCU nutzen eine Vielzahl eher qualitative Methoden, um die zugrundeliegenden Motive und Determinanten der CCU-Akzeptanz zu erfassen. Es existieren aber auch vereinzelte quantitative Studien, die auf eine Quantifizierung der CCU-Akzeptanzniveaus [192] oder die Modellierung der CCU-Wahrnehmung und -Akzeptanz zu bestimmten Produkten [193, 195] ausgerichtet sind. Diese Studien zeigen, dass das allgemeine Bewusstsein und der Informationsstand über die CCU-Technologie und kohlenstoffhaltige Produkte in der breiten Öffentlichkeit eher gering ist. Auch wenn CCU aufgrund seiner Umweltvorteile generell positiv wahrgenommen wird, assoziieren vor allem technische Laien, mit einem geringen Bewusstsein für CCU, höhere Risiken. Häufig genannte Risiken oder Bedenken im Zusammenhang mit CCU beziehen sich auf Risiken von Gesundheit, Umwelt, Produktqualität oder Nachhaltigkeit.

In einer Studie befragten Arning et al. [196] 25 Teilnehmer mit dem Ziel akzeptanzrelevante Parameter der CCU-Standortnutzung zu identifizieren. Nachfolgend wurden dann bei 110 Befragten die Wirtschaftlichkeit, die CO₂-Quelle und die Art des CO₂-abgeleiteten Produkts als akzeptanzrelevante Kriterien identifiziert und in der anschließenden Befragung systematisch

variiert. Die Ergebnisse zeigten, dass die Rentabilität den größten Einfluss auf die Präferenzen für CCU-Technologie hatte. Kraftstoff war die attraktivste Produktoption und Stahlwerke waren die am meisten bevorzugte CO₂-Quelle.

Im Rahmen des Exzellenzcluster "The Fuel Science Center" der RWTH Aachen wurde daraufhin die Akzeptanz von CO₂-basierten Kraftstoffen untersucht [197]. Um die Einführung von CO₂-basierten Kraftstoffen auf breiter Basis akzeptabel und technisch, ökonomisch und ökologisch erfolgreich zu machen ist es notwendig, die Voraussetzungen und Treiber der Akzeptanz von CCU und ihrer Anwendungen zu kennen. Dazu sollte untersucht werden: 1) Welche Nutzenwahrnehmungen die Akzeptanz am stärksten beeinflussen 2) Welche Kontextfaktoren die Akzeptanz beeinflussen 3) Ob die Einflussfaktoren bei allen Menschen gleich wirken oder in Teilgruppen unterschiedlich wiegen? Bei den Befragten war die Einstellung gegenüber CO₂-basierten Kraftstoffen grundsätzlich positiv, allerdings nur bei günstigen Kraftstoffpreisen und geringen Umrüstkosten [198]. Es wurden Akzeptanzprofile mit spezifischen Akzeptanzmustern identifiziert. Diese Profile deuten darauf hin, dass für einen Teil der Bevölkerung zusätzliche produktbezogene Faktoren (Preis und Qualität) sowie infrastrukturtechnische Faktoren (Beteiligung am lokalen Roll-out-Prozess und die Wirtschaftlichkeit der CCU-Technologieanwendung) einen erheblichen Akzeptanzbestimmenden Einfluss haben und bei Nichtberücksichtigung als Diffusionsbarrieren wirken können. Das Wissen um den Einfluss dieser Treiber auf die Akzeptanz sowie deren mögliche Barrieren soll helfen, effektive, zielgruppenspezifische Kommunikationsstrategien zu entwickeln.

Im gleichen Projektrahmen wurde auch die Akzeptanz von den im ALIGN-CCUS Projekt hergestellten DME und OME Kraftstoffen untersucht [198]. Ziel der Studie war es zu verstehen, welche Kriterien die Präferenzen und Nutzungsentscheidungen der Verbraucher von CCU-Kraftstoffen bestimmen. Dazu wurden fünf Kriterien ausgewählt, zu dem 256 Befragten ihre Präferenzen angeben sollten. Dies waren Kraftstoffverfügbarkeit, Reichweite, Schadstoffemissionen, Kraftstoffkosten und Nutzungsanforderungen. Den höchsten Entscheidungseinfluss auf die Präferenzen für alternative Kraftstoffe hatten die Kraftstoffkosten, gefolgt von der Kraftstoffverfügbarkeit und den Nutzungsanforderungen. Die Schadstoffemissionen hatten den geringsten Einfluss auf die Entscheidung für einen alternativen Kraftstoff. Die Studie fand heraus, dass derzeit eine große Mehrheit der Autofahrer konventionelle fossile Kraftstoffoptionen bevorzugen würde, was eine geringe Nachfrage der Verbraucher nach alternativen Kraftstoffen bewirkt. Somit zeigen die Ergebnisse, wie wichtig es ist, die soziale Akzeptanz als Zielfunktion in die Entwicklung neuartiger Kraftstoffe und Produktionsprozesse zu integrieren.

3.3 Erfolgte und geplante Veröffentlichungen

Tabelle 36: Liste der Veröffentlichungen mit Beteiligung des Forschungszentrums Jülich aus dem ALIGN-CCUS Projekt heraus

Art	Veröffentlichung
Paper	<u>Schemme et al. [77]:</u> <i>Property Data Estimation for Hemiformals, Methylene Glycols and Polyoxymethylene Dimethyl Ethers and Process Optimization in Formaldehyde Synthesis.</i> Energies, 2020. 13(13). <u>Moser et al. [199]:</u> <i>Das Projekt ALIGN-CCUS - Ein Beitrag zum evolutiven Transformationsprozess der Energie- und Rohstoffversorgung durch Recycling von Kohlenstoff.</i> VGB Powertech, 2020(1/2): p. 43-49
Conference Proceeding (International)	<u>Moser et al. [200]:</u> <i>Demonstrating the CCU-chain and sector coupling as part of ALIGN-CCUS - Dimethyl ether from CO₂ as chemical energy storage, fuel and feedstock for industries.</i> in <i>14th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, GHGT-14.</i> 2018. Melbourne, Australia. <u>Mikunda et al. [201]:</u> <i>Targeted CCUS R&D Activities in Industrial Clusters in 14th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, GHGT-14.</i> 2018. Melbourne, Australia
Konferenzbeitrag (Deutschland)	ALIGN-CCUS: Synthese und Nutzung des Dieselsatztreibstoffs DME aus abgetrenntem CO₂ – Ergebnisse der gesamten CCU-Kette am Standort Niederaußem, Kraftwerkstechnik 2020, Dresden, 2020 "LCA of CCU-Chain Demonstration in the ALIGN-CCUS project – Poly(oxymethylene) Dimethyl Ethers from H₂ and CO₂" 17th International Conference on Carbon Dioxide Utilization - ICCDU 2019, 23-27.6.2019, Aachen Prozesstechnik der DME und OME-Synthese und Life Cycle Assessment, 12. Sitzung Expertengruppe Power-to-Gas „Industrielle Erprobung von Power-to-Liquids-Verfahren“ Kraftwerk Niederaußem, 17.5.2019 "Carbon Dioxide Sources in the Industrial Cluster of NRW for CCU Applications" CLUSTER Symposium: CO₂ and H₂ Technologies for the Energy Transition, Berlin 29.11.2018

ALIGN-CCUS: Synthese des Dieselerstattreibstoffs DME aus abgetrenntem CO₂ des Kraftwerks Niederaußem – Demonstration der gesamten CCU-Kette, 2019, 51. Kraftwerkstechnisches Kolloquium, Dresden, 2019

Demonstrating the CCU-Chain and Sector Coupling as Part of ALIGN-CCUS - Dimethyl Ether from CO₂ as Chemical Energy Storage, Fuel and Feedstock for Industries, 14th International Conference on Greenhouse Gas Control Techniques, Melbourne, 2018

ALIGN-CCUS: Synthese des Dieselerstattreibstoffs DME aus abgetrenntem CO₂ des Kraftwerks Niederaußem – Demonstration der gesamten CCU-Kette und Sektorkopplung, 50. Kraftwerkstechnisches Kolloquium, Dresden, 2018

Poster	Thermodynamische Aspekte und verfahrensanalytische Auslegungen zur Herstellung von OME ₃₋₅ , Jahrestreffen der ProcessNet Fachgruppe Energieverfahrenstechnik, Frankfurt, 07.03.2018
Webinar	ALIGN-CCUS Webinar 2 – CCUS as an element for large-scale energy storage and conversion ALIGN-CCUS, June 5, 2018
Tabelle 37: Liste geplanter Veröffentlichungen im Anschluss an das Ende des ALIGN-CCUS Projekt	

Art	Veröffentlichung
Paper	- Comparative Life Cycle Assessment of well-to-tank synthesis routes for OME, DME 1 step, 2 step und methanol, IEK-STE, IEK-14 - Life Cycle Assessment of CCU mobility options with dimethyl ether and polyoxymethylen dimethyl ethers - a comparative investigation from well-to-wheel, IEK-STE, VKA, IEK-14 - Techno-economic evaluation of Power-to-fuel Production Pathways towards Poly(Oxymethylene) Dimethyl Ethers from H₂ and CO₂ based on Process Simulations, IEK-14
Conference Proceeding	- Life Cycle Assessment for full chain CCU demonstration in the ALIGN-CCUS project –dimethyl ether and polyoxymethylen dimethyl ethers production from CO₂ and its usages in the mobility and electricity sectors, 15th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, GHGT-14. 2021. Virtual conference - ALIGN-CCUS: Production of dimethyl ether from CO₂ and its use as energy carrier - Results from the CCU demonstration plant, 15th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, GHGT-14. 2021. Virtual conference

Prof. Dr. Ralf Peters

Projektleiter des FZJ im ALIGN-CCUS Projekt
Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK-14) – Elektrochemische Verfahrenstechnik
Forschungszentrum Jülich GmbH

Dr. Steffen Schemme

Wissenschaftlicher Mitarbeiter
Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK-14) – Elektrochemische Verfahrenstechnik
Forschungszentrum Jülich GmbH

Stefan Weiske

Wissenschaftlicher Mitarbeiter
Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK-14) – Elektrochemische Verfahrenstechnik
Forschungszentrum Jülich GmbH

Dr. Petra Zapp

Stellvertretende Leiterin
Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK-STE) - Systemforschung und Technologische
Entwicklung
Forschungszentrum Jülich GmbH

Dr. Stefanie Troy

Wissenschaftliche Mitarbeiterin
Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK-STE) - Systemforschung und Technologische
Entwicklung
Forschungszentrum Jülich GmbH

Dr. Diana Schumann

Wissenschaftliche Mitarbeiterin
Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK-STE) - Systemforschung und Technologische
Entwicklung
Forschungszentrum Jülich GmbH

Simon Morgenthaler

Wissenschaftlicher Mitarbeiter
Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK-STE) - Systemforschung und Technologische
Entwicklung
Forschungszentrum Jülich GmbH

Berichtsblatt

- | | |
|---|--|
| 1. ISBN oder ISSN
<i>geplant</i> | 2. Berichtsart (Schlussbericht oder Veröffentlichung)
Schlussbericht |
| 3. Titel
Accelerating Low- carbon Industrial Growth through CCUS (ALIGN-CCUS)

ERA ACT ALIGN – CCUS – Beschleunigung des Wachstums CO ₂ -armer Industrien durch CCUS

Schlussbericht | |
| 4. Autor(en/innen) [Name(n), Vorname(n)]
Stefan Weiske, Steffen Schemme, Remzi Can Samsun, Ralf Peters

Stefanie Troy, Simon Morgenthaler, Diana Schumann, Petra Zapp | 5. Abschlussdatum des Vorhabens
November 2020

6. Veröffentlichungsdatum
<i>geplant</i>

7. Form der Publikation
Buch |
| 8. Durchführende Institution(en) (Name Adresse)
Forschungszentrum Jülich GmbH

Institut für Energie- und Klimaforschung

IEK-14: Elektrochemische Verfahrenstechnik

IEK-STE: Systemforschung und Technologische Entwicklung

D-52425 Jülich | 9. Ber. Nr. durchführende Institution

IEK-14/KSS/2021-1

10. Förderkennzeichen

0324186D

11. Seitenzahl
213 |
| 12. Fördernde Institution (Name, Adresse)

ACT ALIGN-CCUS Project No 271501 This project has received funding from PTJ (DE), RVO (NL), Gassnova (NO), UEFISCDI (RO) and BEIS (UK) and is co-funded by the European Commission under the Horizon 2020 programme, Accelerating CCS Technologies (ACT), Grant Agreement No 691712. | 13. Literaturangaben

201

14. Tabellen
38

15. Abbildungen
106 |
| 16. Zusätzliche Angaben | |
| 17. Vorgelegt bei PTJ, Jülich, 31.03.2021 | |

18. Kurzfassung

Innerhalb des ALIGN-CCUS Projekts hat das Forschungszentrum Jülich durch die Organisationseinheiten IEK-14 und IEK-STE eine umfassende Analyse zur Produktion von nachhaltigen Kraftstoffen durch das Power-to-Fuel Konzept erarbeitet. Die Analysen umfassen dabei die Techno-Ökonomie von PtF-Produktionssystemen zur Herstellung von Methanol, Dimethylether und Polyoxymethyldimethylether (OME₃₋₅). Diese technischen und wirtschaftlichen Betrachtungen haben gezeigt, dass die Speicherung von erneuerbarer Energie mit hohen Wirkungsgraden und akzeptablen Kosten für simple, alternative Kraftstoffe wie Methanol und Dimethylether möglich ist. Die Speicherung von erneuerbarer Energie in Polyoxymethyldimethylether zeigte deutlich höhere Kosten bei niedrigeren Wirkungsgraden. Für Dimethylether konnte ein Power-to-Fuel Wirkungsgrad von 52,6 % und Basiskosten von ca. 1,94 €/l_{DE} bestimmt werden. Die Ergebnisse der technischen Analyse wurden als Grundlage für das Life Cycle Assessment verwendet. Diese ökologische Analyse verdeutlicht, dass die Power-to-Fuel Kraftstoffe wie Dimethylether einen Beitrag zur Energiewende im Verkehr leisten können, wenn diese auf Basis von erneuerbaren Energien hergestellt wurden. Wird der aktuelle Strommix in Deutschland verwendet, zeigen alle überprüften Alternativen hohe Umweltauswirkungen. Im Arbeitspaket 5 wurden die Verfahrensanalysen für eine systemische Untersuchung von industriellen Clustern in Nordrhein-Westfalen verwendet. Die Cluster wurden auf die Eignung zur Bereitstellung von unvermeidbaren CO₂-geprüft und infrastrukturell analysiert. Auf Basis von lokalen Standortfaktoren für den Betrieb von EE-Anlagen wurden zwei Systementwürfe entwickelt, welche ein großskaliges und kleinskaliges Power-to-Fuel-System widerspiegeln. Ökonomisch zu bevorzugen ist das großskalige System, aber das kleinskalige System kann einen Beitrag zur Netzstabilisation entrichten. Beim kleinskaligen System ist die Flexibilität des DME-Reaktors der limitierende Faktor, wobei beim großskaligen System die Bezugskosten von Elektrizität entscheidend sind. Die ausgearbeiteten Analysen konnten durch eine nationale (Deutschland) und internationale Stakeholder-Befragung erweitert werden. Die Befragung zeigt deutlich, dass die Wahrnehmung von CCUS regionalen Unterschieden unterliegt und dass die CCU-Technologien in Deutschland und besonders von industrieller Seite positiv gesehen werden, um eine nachhaltige Wirtschaft aufzubauen.

19. Schlagwörter

Power-to-Fuel, Methanol, Dimethylether, Polyoxymethyldimethylether (OME₃₋₅), Carbon Capture and Utilization (CCUS), Life Cycle Assessment, soziale Akzeptanzforschung

20. Verlag

Forschungszentrum Jülich GmbH
Zentralbibliothek, Verlag (geplant)

21. Preis

geplant

Literaturverzeichnis

1. *Paris Agreement*. 2015, United Nations Framework Convention on Climate Change (UNFCCC).
2. Lashof, D.A. and D.R. Ahuja, *Relative contributions of greenhouse gas emissions to global warming*. Nature, 1990. **344**: p. 529.
3. Bundestag, W.D.D., *Anthropogener Treibhauseffekt und Klimaänderungen - Darstellung des gegenwärtigen wissenschaftlichen Erkenntnisstandes*. 2017.
4. Schemme, S., et al., *Power-to-fuel as a key to sustainable transport systems - An analysis of diesel fuels produced from CO₂ and renewable electricity*. Fuel, 2017. **205**: p. 198-221.
5. Partrick Schmidt, W.W., *German Environment Agency - Power-to-Liquids Potentials and Perspectives for the Future Supply of Renewable Aviation Fuel*. 2016.
6. Connolly, D., B.V. Mathiesen, and I. Ridjan, *A comparison between renewable transport fuels that can supplement or replace biofuels in a 100% renewable energy system*. Energy, 2014. **73**: p. 110-125.
7. Olah, G.A., A. Goepfert, and G.K.S. Prakash, *Chemical Recycling of Carbon Dioxide to Methanol and Dimethyl Ether: From Greenhouse Gas to Renewable, Environmentally Carbon Neutral Fuels and Synthetic Hydrocarbons*. The Journal of Organic Chemistry, 2009. **74**(2): p. 487-498.
8. Azizi, Z., et al., *Dimethyl ether: A review of technologies and production challenges*. Chemical Engineering and Processing, 2014. **82**: p. 150-172.
9. Otto, A., *Chemische, verfahrenstechnische und ökonomische Bewertung von Kohlendioxid als Rohstoff in der chemischen Industrie [E-Book]*. Schriften des Forschungszentrums Jülich. Reihe Energie und Umwelt / energy and environment ;. Vol. 268. 2015, Jülich: Forschungszentrum, Zentralbibliothek.
10. Manfred Müller, U.H., *Dimethyl Ether*, in *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. 2000.
11. Chen, W.H., C.L. Hsu, and X.D. Wang, *Thermodynamic approach and comparison of two-step and single step DME (dimethyl ether) syntheses with carbon dioxide utilization*. Energy, 2016. **109**: p. 326-340.
12. Omari, A., et al., *Potential of long-chain oxymethylene ether and oxymethylene ether-diesel blends for ultra-low emission engines*. Applied Energy, 2019. **239**: p. 1242-1249.
13. Omari, A., B. Heuser, and S. Pischinger, *Potential of oxymethylenether-diesel blends for ultra-low emission engines*. Fuel, 2017. **209**: p. 232-237.
14. Deutz, S., et al., *Cleaner production of cleaner fuels: wind-to-wheel - environmental assessment of CO₂-based oxymethylene ether as a drop-in fuel*. Energy & Environmental Science, 2018. **11**(2): p. 331-343.
15. Burger, J., *A novel process for the production of diesel fuel additives by hierarchical design*. 2012, Techn. Univ.:: Kaiserslautern.
16. Ouda, M., et al., *Poly(oxymethylene) dimethyl ether synthesis - a combined chemical equilibrium investigation towards an increasingly efficient and potentially sustainable synthetic route*. Reaction Chemistry & Engineering, 2017. **2**(1): p. 50-59.
17. Burger, J., E. Strofer, and H. Hasse, *Chemical Equilibrium and Reaction Kinetics of the Heterogeneously Catalyzed Formation of Poly(oxymethylene) Dimethyl Ethers from Methylal and Trioxane*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2012. **51**(39): p. 12751-12761.
18. Burger, J., et al., *Poly(oxymethylene) dimethyl ethers as components of tailored diesel fuel: Properties, synthesis and purification concepts*. Fuel, 2010. **89**(11): p. 3315-3319.
19. Peters, R., *Identification and thermodynamic analysis of reaction pathways of methylal and OME-n formation*. Energy, 2017. **138**: p. 1221-1246.

20. Schmitz, N., et al., *Conceptual Design of a Novel Process for the Production of Poly(oxymethylene) Dimethyl Ethers from Formaldehyde and Methanol*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2017. **56**(40): p. 11519-11530.
21. Schmitz, N., J. Burger, and H. Hasse, *Reaction Kinetics of the Formation of Poly(oxymethylene) Dimethyl Ethers from Formaldehyde and Methanol in Aqueous Solutions*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2015. **54**(50): p. 12553-12560.
22. Oestreich, D., et al., *Reaction kinetics and equilibrium parameters for the production of oxymethylene dimethyl ethers (OME) from methanol and formaldehyde*. Chemical Engineering Science, 2017. **163**: p. 92-104.
23. Alkhayat WA and G. AM., *Estimating Manning levels for process plants*, in *AACE Transactions* 1984. I.2.1-I.2.4.
24. Turton, R., et al., *Analysis, synthesis, and design of chemical processes*. Vol. XXXV. 2013, Upper Saddle River: Pearson Education International.
25. Peter Christensen and L.R. Dysert, *AACE International Recommended Practice No. 18R-97 - COST ESTIMATE CLASSIFICATION SYSTEM – AS APPLIED IN ENGINEERING, PROCUREMENT, AND CONSTRUCTION FOR THE PROCESS INDUSTRIES*. 2011.
26. Pfenninger, S. and J. Keirstead, *Renewables, nuclear, or fossil fuels? Scenarios for Great Britain's power system considering costs, emissions and energy security*. Applied Energy, 2015. **152**: p. 83-93.
27. Pfenninger, S., *Calliope 0.6.4 documentation*.
28. Schreiber, A., P. Zapp, and J. Marx, *Meta-Analysis of Life Cycle Assessment Studies on Electricity Generation with Carbon Capture and Storage*. Journal of Industrial Ecology, 2012. **16**: p. S155-S168.
29. Troy, S., A. Schreiber, and P. Zapp, *Life cycle assessment of membrane-based carbon capture and storage*. Clean Technologies and Environmental Policy, 2016. **18**(6): p. 1641-1654.
30. von der Assen, N., et al., *Selecting CO2 Sources for CO2 Utilization by Environmental-Merit-Order Curves*. Environmental Science & Technology, 2016. **50**(3): p. 1093-1101.
31. Sternberg, A. and A. Bardow, *Power-to-What? - Environmental assessment of energy storage systems*. Energy & Environmental Science, 2015. **8**(2): p. 389-400.
32. Reiter, G. and J. Lindorfer, *Global warming potential of hydrogen and methane production from renewable electricity via power-to-gas technology*. The International Journal of Life Cycle Assessment, 2015. **20**(4): p. 477-489.
33. van der Giesen, C., R. Kleijn, and G.J. Kramer, *Energy and Climate Impacts of Producing Synthetic Hydrocarbon Fuels from CO2*. Environmental Science & Technology, 2014. **48**(12): p. 7111-7121.
34. Zhang, X., et al., *Life Cycle Assessment of Power-to-Gas: Approaches, system variations and their environmental implications*. Applied Energy, 2017. **190**: p. 326-338.
35. Sternberg, A. and A. Bardow, *Life Cycle Assessment of Power-to-Gas: Syngas vs Methane*. ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 2016. **4**(8): p. 4156-4165.
36. Baltrusaitis, J. and W.L. Luyben, *Methane Conversion to Syngas for Gas-to-Liquids (GTL): Is Sustainable CO2 Reuse via Dry Methane Reforming (DMR) Cost Competitive with SMR and ATR Processes? ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2015. **3**(9): p. 2100-2111.
37. Matzen, M. and Y. Demirel, *Methanol and dimethyl ether from renewable hydrogen and carbon dioxide: Alternative fuels production and life-cycle assessment*. Journal of Cleaner Production, 2016. **139**: p. 1068-1077.
38. Fernandez-Dacosta, C., V. Stojcheva, and A. Ramirez, *Closing carbon cycles: Evaluating the performance of multi-product CO2 utilisation and storage configurations in a refinery*. Journal of Co2 Utilization, 2018. **23**: p. 128-142.

39. Schakel, W., et al., *Assessing the techno-environmental performance of CO₂ utilization via dry reforming of methane for the production of dimethyl ether*. Journal of Co₂ Utilization, 2016. **16**: p. 138-149.
40. Landesamt für Natur, U.u.V.N.-W., *Treibhausgas-Emissionsinventar Nordrhein-Westfalen 2014*. 2014.
41. Ministerium für Klimaschutz, U., Landwirtschaft, Natur- und Verbraucherschutz des Landes Nordrhein-Westfalen, *Klimaschutzplan Nordrhein-Westfalen Klimaschutz und Klimafolgenanpassung*. 2015.
42. Wärme, V.I.-S.z.G.u., *Strom zu Gas & Wärme*. 2021.
43. Eichel, R., et al., *Gutachten Power to Gas*. Energiespeicher: NRW Enquete-Kommission II, 2014.
44. Bongartz, R., J. Linssen, and P. Markewitz, *CO₂ Transportation*, in *Carbon Capture, Storage and Use*. 2015, Springer. p. 47-65.
45. Albrecht, U., et al., *Kraftstoffstudie-Zukünftige Kraftstoffe für Verbrennungsmotoren und Gasturbinen*. 2013, Patrick R. Schmidt Werner Zittel Werner Weindorf Tetyana Raksha.
46. Shackley, S., et al., *Stakeholder perceptions of CO₂ capture and storage in Europe: Results from a survey*. Energy Policy, 2007. **35**(10): p. 5091-5108.
47. Gough, C., *State of the art in carbon dioxide capture and storage in the UK: An experts' review*. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2008. **2**(1): p. 155-168.
48. Huijts, N.M.A., C.J.H. Midden, and A.L. Meijnders, *Social acceptance of carbon dioxide storage*. Energy Policy, 2007. **35**(5): p. 2780-2789.
49. Teir, S., et al., *Potential for carbon capture and storage (CCS) in the Nordic region*. VTT Tiedotteita - Valtion Teknillinen Tutkimuskeskus, 2010.
50. Johnsson, F., et al., *Stakeholder attitudes on Carbon Capture and Storage—An international comparison*. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2010. **4**(2): p. 410-418.
51. Cremer, C., et al., *Sozioökonomische Begleitforschung zur gesellschaftlichen Akzeptanz von Carbon Capture and Storage (CCS) auf nationaler und internationaler Ebene*. 2008.
52. Fishedick, M., et al., *Stakeholder acceptance of carbon capture and storage in Germany*. Energy Procedia, 2009. **1**(1): p. 4783-4787.
53. Schumann, D., *Public Acceptance of Carbon Dioxide Capture and Storage – Research Approaches for Investigating the Impact of Communication*. GAIA - Ecological Perspectives for Science and Society, 2009. **18**(3): p. 261-263.
54. Dütschke, E., *What drives local public acceptance—Comparing two cases from Germany*. Energy Procedia, 2011. **4**: p. 6234-6240.
55. Dütschke, E., et al., *Differences in the public perception of CCS in Germany depending on CO₂ source, transport option and storage location*. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2016. **53**: p. 149-159.
56. Pietzner, K., et al., *Public awareness and perceptions of carbon dioxide capture and storage (CCS): Insights from surveys administered to representative samples in six European countries*. Energy Procedia, 2011. **4**: p. 6300-6306.
57. Pietzner, K., et al., *Media coverage of four Carbon Capture and Storage (CCS) projects in Germany: analysis of 1,115 regional newspaper articles*. Energy Procedia, 2014. **63**: p. 7141-7148.
58. Schumann, D., *Public acceptance*, in *Carbon Capture, storage and use*. 2015, Springer. p. 221-251.
59. Smolinka, T., et al., *Studie IndWEde - Industrialisierung der Wasserelektrolyse in Deutschland: Chancen und Herausforderungen für nachhaltigen Wasserstoff für Verkehr, Strom und Wärme*. 2018, NOW-GmbH.
60. Smolinka, T., M. Günther, and J. Garche, *NOW-Studie Stand und Entwicklungspotenzial der Wasserelektrolyse zur Herstellung von Wasserstoff aus*

-
- regenerativen Energien - Kurzfassung des Abschlussberichts.* 2010, Nationale Organisation Wasserstoff- und Brennstoffzellentechnologie – NOW GmbH.
61. Hirschberg, H.G., *Handbuch Verfahrenstechnik und Anlagenbau - Chemie, Technik, Wirtschaftlichkeit.* 1999: Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
 62. Rules of Thumb, in *Rules of Thumb in Engineering Practice.* 2007. p. 1-44.
 63. Schemme, S., *Techno-ökonomische Bewertung von Verfahren zur Herstellung von Kraftstoffen aus H₂ und CO₂, in Schriften des Forschungszentrums Jülich . Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment 2020, RWTH Aachen University: Jülich. p. 357.*
 64. König, D.H., et al., *Techno-economic study of the storage of fluctuating renewable energy in liquid hydrocarbons.* Fuel, 2015. **159**: p. 289-297.
 65. Doss, B., C. Ramos, and S. Atkins, *Optimization of Methanol Synthesis from Carbon Dioxide and Hydrogen: Demonstration of a Pilot-Scale Carbon-Neutral Synthetic Fuels Process.* Energy & Fuels, 2009. **23**(9): p. 4647-4650.
 66. Pontzen, F., et al., *CO₂-based methanol and DME - Efficient technologies for industrial scale production.* Catalysis Today, 2011. **171**(1): p. 242-250.
 67. Toyir, J., et al., *Sustainable process for the production of methanol from CO₂ and H-2 using Cu/ZnO-based multicomponent catalyst.* Proceedings of the Jmsm 2008 Conference, 2009. **2**(3): p. 1075-1079.
 68. Dieterich, V., et al., *Power-to-liquid via synthesis of methanol, DME or Fischer-Tropsch-fuels: a review.* Energy & Environmental Science, 2020.
 69. Graaf, G., *The Synthesis of methanol in Gas-Solid and Gas-Slurry Reactors - PhD Thesis,* 1988. 2015.
 70. VandenBussche, K.M. and G.F. Froment, *A steady-state kinetic model for methanol synthesis and the water gas shift reaction on a commercial Cu/ZnO/Al₂O₃ catalyst.* Journal of Catalysis, 1996. **161**(1): p. 1-10.
 71. Seidel, C., et al., *Kinetic modeling of methanol synthesis from renewable resources.* Chemical Engineering Science, 2018. **175**: p. 130-138.
 72. IMPCA, *Methanol Reference Specifications.* 2015.
 73. Van-Dal, É.S. and C. Bouallou, *Design and simulation of a methanol production plant from CO₂ hydrogenation.* Journal of Cleaner Production, 2013. **57**: p. 38-45.
 74. Van-Dal, E.S. and C. Bouallou, *CO₂ Abatement Through a Methanol Production Process.* Pres 2012: 15th International Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction, 2012. **29**: p. 463-468.
 75. Renk, C., *Die einstufige Dimethylether-Synthese aus Synthesegas.* Universität Karlsruhe, 2009.
 76. Maurer, G., *Vapor-liquid equilibrium of formaldehyde-and water-containing multicomponent mixtures.* AIChE Journal, 1986. **32**(6): p. 932-948.
 77. Schemme, S., et al., *Property Data Estimation for Hemiformals, Methylene Glycols and Polyoxymethylene Dimethyl Ethers and Process Optimization in Formaldehyde Synthesis.* Energies, 2020. **13**(13).
 78. Boyd, R.H., *Some Physical Properties of Polyoxymethylene Dimethyl Ethers.* Journal of Polymer Science, 1961. **50**(153): p. 133-&.
 79. Franz, A., et al., *Formaldehyde,* in *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry.*
 80. Pelaez, R., P. Marin, and S. Ordóñez, *Synthesis of formaldehyde from dimethyl ether on alumina-supported molybdenum oxide catalyst.* Applied Catalysis a-General, 2016. **527**: p. 137-145.
 81. Panzer, E. and G. Emig, *Verfahrensoptimierung der technischen Formaldehydsynthese am Silberkatalysator.* Lehrstuhl für technische Chemie I, Universität Erlangen-Nürnberg.
 82. Grutzner, T., et al., *Development of a new industrial process for trioxane production.* Chemical Engineering Science, 2007. **62**(18-20): p. 5613-5620.
-

83. Weidert, J.O., et al., *Development of an Integrated Reaction-Distillation Process for the Production of Methylal*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2017. **56**(2): p. 575-582.
84. Drunsel, J.O., *Entwicklung von Verfahren zur Herstellung von Methylal und Ethylal*. 2012: Tech. Univ., Laboratory of Engineering Thermodynamics.
85. Oestreich, D., et al., *Production of oxymethylene dimethyl ether (OME)-hydrocarbon fuel blends in a one-step synthesis/extraction procedure*. Fuel, 2018. **214**: p. 39-44.
86. Burger, J., E. Strofer, and H. Hasse, *Production process for diesel fuel components poly(oxymethylene) dimethyl ethers from methane-based products by hierarchical optimization with varying model depth*. Chemical Engineering Research & Design, 2013. **91**(12): p. 2648-2662.
87. Haltenort, P., et al., *Heterogeneously catalyzed synthesis of oxymethylene dimethyl ethers (OME) from dimethyl ether and trioxane*. Catalysis Communications, 2018. **109**: p. 80-84.
88. ASG, *Internes Dokument: Lieferspezifikation OME (Prüfbericht: 2602506-1, 04.04.2018)*. 2018, ASG Analytik-Service GmbH
89. Robert, E., et al., *WELL-TO-WHEELS Report version 4.a : JEC WELL-TO-WHEELS ANALYSIS*. 2014.
90. Gebald, C., et al., *Direct Air Capture Device*. 2017, United States: Climeworks AG. 27.
91. Robinus, M., et al., *Comparative Analysis of Infrastructures: Hydrogen Fueling and Electric Charging of Vehicles*. Schriften des Forschungszentrums Jülich Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment Vol. Band / Volume 408. 2018.
92. Brynolf, S., et al., *Electrofuels for the transport sector: A review of production costs*. Renewable & Sustainable Energy Reviews, 2018. **81**: p. 1887-1905.
93. Schemme, S., et al., *H₂-based synthetic fuels: A techno-economic comparison of alcohol, ether and hydrocarbon production*. International Journal of Hydrogen Energy, 2020. **45**(8): p. 5395-5414.
94. *BDEW-Strompreisanalyse Juli 2020*. 2020, BDEW Bundesverband der Energie- und Wasserwirtschaft e.V.: Berlin.
95. *Jährliche Entwicklung des Wechselkurses des Euro gegenüber dem US-Dollar von 1999 bis 2019 (in US-Dollar)*, D. Bundesbank and E. Zentralbank, Editors. 2020, Statista GmbH.
96. Sinnott, R.K. and G.P. Towler, *Chemical engineering design : principles, practice, and economics of plant and process design [E-Book]*. 2nd edition ed. 2012, Oxford ;; Butterworth-Heinemann. xvi, 1303 pages : illustrations.
97. Ryan, H.W., et al., *Forecasting Wind Energy Costs and Cost Drivers: The Views of the World's Leading Experts*. 2016.
98. Decker, M., et al., *Off-grid power-to-fuel systems for a market launch scenario - A techno-economic assessment*. Applied Energy, 2019. **250**: p. 1099-1109.
99. Milanzi, S., et al., *Technischer Stand und Flexibilität des Power-to-Gas-Verfahrens*. 2018, Technische Universität Berlin. p. 30.
100. Zheng, Y., et al., *A review of high temperature co-electrolysis of H₂O and CO₂ to produce sustainable fuels using solid oxide electrolysis cells (SOECs): advanced materials and technology*. Chemical Society Reviews, 2017. **46**(5): p. 1427-1463.
101. Saba, S.M., et al., *The investment costs of electrolysis - A comparison of cost studies from the past 30 years*. International Journal of Hydrogen Energy, 2018. **43**(3): p. 1209-1223.
102. Ho, M.T., G.W. Allinson, and D.E. Wiley, *Comparison of MEA capture cost for low CO₂ emissions sources in Australia*. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2011. **5**(1): p. 49-60.
103. Leeson, D., et al., *A Techno-economic analysis and systematic review of carbon capture and storage (CCS) applied to the iron and steel, cement, oil refining and pulp*

- and paper industries, as well as other high purity sources. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 2017. **61**: p. 71-84.
104. (MWV), M.e.V., *Jahresbericht 2019 - Neue Technologien für mehr Klimaschutz*. 2019: Berlin.
 105. Burger, J., *A novel process for the production of diesel fuel additives by hierarchical design*. 2012: University of Kaiserslautern.
 106. Bongartz, D., J. Burre, and A. Mitsos, *Production of Oxymethylene Dimethyl Ethers from Hydrogen and Carbon Dioxide-Part I: Modeling and Analysis for OME1*. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2019. **58**(12): p. 4881-4889.
 107. Burre, J., D. Bongartz, and A. Mitsos, *Production of Oxymethylene Dimethyl Ethers from Hydrogen and Carbon Dioxide-Part II: Modeling and Analysis for OME3-5*. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2019. **58**(14): p. 5567-5578.
 108. DIN, *ISO 14040:2006 = Environmental management - life cycle assessment - principles and framework*. 2009.
 109. DIN, *ISO 14044:2006 = Environmental management - life cycle assessment - requirements and guidelines*. 2009.
 110. Müller, L.J., et al., *A Guideline for Life Cycle Assessment of Carbon Capture and Utilization*. *Frontiers in Energy Research*, 2020. **8**(15).
 111. Sphera, *GaBi Software Suite Version GaBi 9.2.*, S.S. GmbH, Editor. 2020.
 112. Huijbregts, M.A.J., et al., *ReCiPe2016: a harmonised life cycle impact assessment method at midpoint and endpoint level*. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 2017. **22**(2): p. 138-147.
 113. Neumann, M., *E-Mail communication*. 4/2018 - 10/2020, VKA - RWTH Aachen University.
 114. Zübel, M.O., Tamara; Lehrheuer, Bastian; Pischinger, Stefan; Gaukel, Kai; Pelerin, Dominik; Härtl, Martin; Wachtmeister, Georg, *XME Diesel - (Bio) methyl ethers as alternative fuels in bivalent diesel combustion processes, in final report, funding id: 19U15007 A-D*, F.V. (FVV), Editor. 2020.
 115. Hank, C., et al., *Comparative well-to-wheel life cycle assessment of OME3–5 synfuel production via the power-to-liquid pathway*. *Sustainable Energy & Fuels*, 2019. **3**(11): p. 3219-3233.
 116. Commission, E. *TREMOVE A transport sector model for long term energy-economy-environment planning for EU*. Available from: <https://ec.europa.eu/environment/archives/air/models/tremove.htm>
 117. European Environment Agency, *The European Pollutant Release and Transfer Register (E-PRTR), Member States reporting under Article 7 of Regulation (EC) No 166/2006*.
 118. EnergieAgentur.NRW, *Netzwerk Brennstoffzelle und Wasserstoff Nordrhein-Westfalen*. 2016.
 119. Schüwer, D., et al., *CO2 reuse NRW: evaluating gas sources, demand and utilization for CO2 and H2 within the North Rhine-Westphalia area with respect to gas qualities; final report*. 2015, Wuppertal Inst. for Climate, Environment and Energy: Wuppertal.
 120. Eurochlor. *Chlorine Production Capacities per Country*. 2016; Available from: http://www.eurochlor.org/media/110998/capacities_1-1-2016-for_information_sheet.pdf.
 121. Open Power System Data, *Data Package Renewable power plants*. 2018.
 122. European Environment Agency (EEA), *The European Pollutant Release and Transfer Register (E-PRTR)*. 2017: Online.
 123. Eurostat, *ProdCom - Energy Statistics*. 2019.
 124. Hecking, H., et al., *The Energy Market in 2030 and 2050—The Contribution of Gas and Heat Infrastructure to Efficient Carbon Emission Reductions*. *EWI Research & Scenarios*: Berlin, Germany, 2018.

125. Pfenninger, S. and B. Pickering, *Calliope: a multi-scale energy systems modelling framework*. Journal of Open Source Software, 2018. **3**(29): p. 825.
126. Calliope, *Publications*.
127. Pfenninger, S., *Mathematical formulation — Calliope 0.6.4 documentation*.
128. Pfenninger, S. and I. Staffell, *Long-term patterns of European PV output using 30 years of validated hourly reanalysis and satellite data*. Energy, 2016. **114**: p. 1251-1265.
129. Pfenninger, S. and I. Staffell, *Renewables.ninja*. 2020.
130. Staffell, I. and S. Pfenninger, *Using bias-corrected reanalysis to simulate current and future wind power output*. Energy, 2016. **114**: p. 1224-1239.
131. David, J. and H. Herzog. *The cost of carbon capture*. 2000.
132. Pfenninger, S. and M. Köhne, *Model of the UK power system based on the Calliope framework* [: UK-Calliope model.](https://www.callio.pe/)
133. Makridis, *Hydrogen storage and compression*, in *Methane and Hydrogen for Energy Storage*, Cariveau and Ting, Editors. 2016, Institution of Engineering and Technology. p. 1-28.
134. Parks, G., *Hydrogen station compression, storage, and dispensing technical status and costs*. 2014: National Renewable Energy Laboratory.
135. Kharel, S. and B. Shabani, *Hydrogen as a Long-Term Large-Scale Energy Storage Solution to Support Renewables*. Energies, 2018. **11**(10): p. 2825.
136. Morgenthaler, S., et al., *Site-dependent levelized cost assessment for fully renewable Power-to-Methane systems*. Energy Conversion and Management, 2020. **223**: p. 113150.
137. Morgenthaler, S., W. Kuckshinrichs, and D. Witthaut, *Optimal system layout and locations for fully renewable high temperature co-electrolysis*. Applied Energy, 2020. **260**: p. 114218.
138. Open Power System Data, *Data package time series. Version 2019-06-05*. 2019.
139. Fasihi, M., O. Efimova, and C. Breyer, *Techno-economic assessment of CO2 direct air capture plants*. Journal of cleaner production, 2019. **224**: p. 957-980.
140. *TSAM Github Repository*. 2020, FZJ-IEK3-VSA.
141. Hoffmann, M., et al., *A Review on Time Series Aggregation Methods for Energy System Models*. Energies, 2020. **13**(3): p. 641.
142. Turton, R., et al., *Analysis, synthesis and design of chemical processes*. 2008: Pearson Education.
143. Robinus, M., et al., *Comparative analysis of infrastructures: hydrogen fueling and electric charging of vehicles*. Forschungszentrum Jülich: Jülich, Germany, 2018.
144. de Coninck, H., et al., *The acceptability of CO2 capture and storage (CCS) in Europe: An assessment of the key determining factors: Part 1. Scientific, technical and economic dimensions*. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2009. **3**(3): p. 333-343.
145. Rawlins, B.L., *Prioritizing stakeholders for public relations*. Institute for public relations, 2006: p. 1-14.
146. Wasserman, S. and K. Faust, *Social network analysis: Methods and applications*. 1994.
147. Samsun, R.C., et al., *Fuel cell systems with reforming of petroleum-based and synthetic-based diesel and kerosene fuels for APU applications*. International Journal of Hydrogen Energy, 2015. **40**(19): p. 6405-6421.
148. Samsun, R.C., et al., *HT-PEFC systems operating with diesel and kerosene for APU application*. Whcc 2012 Conference Proceedings - 19th World Hydrogen Energy Conference, 2012. **29**: p. 541-551.
149. Meissner, J., et al., *Highly integrated catalytic burner with laser-additive manufactured manifolds*. Reaction Chemistry & Engineering, 2017. **2**(4): p. 437-445.
150. Meissner, J., et al., *Start-Up and Load-Change Behavior of a Catalytic Burner for a Fuel-Cell-Based APU for Diesel Fuel*. Fuel Cells, 2015. **15**(1): p. 15-26.

151. Meissner, J., et al., *Catalytic burner with internal steam generation for a fuel-cell-based auxiliary power unit for middle distillates*. International Journal of Hydrogen Energy, 2014. **39**(8): p. 4131-4142.
152. BMU, *Entwurf: Anpassung der Ersten Allgemeinen Verwaltungsvorschrift zum Bundes-Immissionsschutzgesetz (Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft – TA Luft)*. 2018.
153. Scharf, F., *Strömungsmechanische Modellierung eines Brenngaserzeugungssystems [E-Book]*. Schriften des Forschungszentrums Jülich. Reihe Energie und Umwelt / energy and environment ;. Vol. 138. 2012, Jülich: Forschungszentrum, Zentralbibliothek. VI, 223 S.
154. Marlin, D.S., E. Sarron, and Ó. Sigurbjörnsson, *Process Advantages of Direct CO₂ to Methanol Synthesis*. Frontiers in Chemistry, 2018. **6**: p. 446.
155. MefCO₂, *Deliverable D2.1 - Operational laboratory-scale reactors*. 2018.
156. MefCO₂, *Deliverable D2.2 – Operational laboratory-scale reaction models*. 2018.
157. Wich, T., et al., *Carbon2Chem (R)-CCU as a Step Toward a Circular Economy*. Frontiers in Energy Research, 2020. **7**.
158. Wich, T., et al., *Carbon2Chem (R) - Technical Center in Duisburg*. Chemie Ingenieur Technik, 2018. **90**(10): p. 1369-1373.
159. Deerberg, G., M. Oles, and R. Schlogl, *The Project Carbon2Chem (R)*. Chemie Ingenieur Technik, 2018. **90**(10): p. 1365-1368.
160. Bozzano, G. and F. Manenti, *Efficient methanol synthesis: Perspectives, technologies and optimization strategies*. Progress in Energy and Combustion Science, 2016. **56**: p. 71-105.
161. Alvarez, A., et al., *Challenges in the Greener Production of Formates/Formic Acid, Methanol, and DME by Heterogeneously Catalyzed CO₂ Hydrogenation Processes*. Chemical Reviews, 2017. **117**(14): p. 9804-9838.
162. De Falco, M., M. Capocelli, and A. Basile, *Selective membrane application for the industrial one-step DME production process fed by CO₂ rich streams: Modeling and simulation*. International Journal of Hydrogen Energy, 2017. **42**(10): p. 6771-6786.
163. De Falco, M., M. Capocelli, and G. Centi, *Dimethyl ether production from CO₂ rich feedstocks in a one-step process: Thermodynamic evaluation and reactor simulation*. Chemical Engineering Journal, 2016. **294**: p. 400-409.
164. Ouda, M., et al., *Describing oxymethylene ether synthesis based on the application of non-stoichiometric Gibbs minimisation*. Reaction Chemistry & Engineering, 2018. **3**(3): p. 277-292.
165. Held, M., et al., *On the energetic efficiency of producing polyoxymethylene dimethyl ethers from CO₂ using electrical energy*. Energy & Environmental Science, 2019.
166. Held, M., et al., *Correction: On the energetic efficiency of producing polyoxymethylene dimethyl ethers from CO₂ using electrical energy*. Energy & Environmental Science, 2019. **12**(8): p. 2591-2592.
167. Schmitz, N., et al., *Separation of water from mixtures containing formaldehyde, water, methanol, methylal, and poly(oxymethylene) dimethyl ethers by pervaporation*. Journal of Membrane Science, 2018. **564**: p. 806-812.
168. Schmitz, N., et al., *Vapor-liquid equilibrium and distillation of mixtures containing formaldehyde and poly(oxymethylene) dimethyl ethers*. Chemical Engineering and Processing-Process Intensification, 2018. **131**: p. 116-124.
169. Breitzkreuz, C.F., et al., *Design of a Production Process for Poly(oxymethylene) Dimethyl Ethers from Dimethyl Ether and Trioxane*. Chemie Ingenieur Technik, 2018. **90**(10): p. 1489-1496.
170. Pelaez, R., P. Marin, and S. Ordonez, *Synthesis of poly(oxymethylene) dimethyl ethers from methylal and trioxane over acidic ion exchange resins: A kinetic study*. Chemical Engineering Journal, 2020. **396**.

171. Klocic, S., et al., *Investigations on an efficient and environmentally benign poly(oxyethylene) dimethyl ether (OME3-5) fuel synthesis*. Renewable Energy, 2020. **147**: p. 2151-2159.
172. Schnuelle, C., et al., *From Niche to Market-An Agent-Based Modeling Approach for the Economic Uptake of Electro-Fuels (Power-to-Fuel) in the German Energy System*. Energies, 2020. **13**(20).
173. Bellotti, D., et al., *Techno-economic analysis for the integration of a power to fuel system with a CCS coal power plant*. Journal of Co2 Utilization, 2019. **33**: p. 262-272.
174. Thonemann, N., *Environmental impacts of CO2-based chemical production: A systematic literature review and meta-analysis*. Applied Energy, 2020. **263**: p. 114599.
175. Artz, J., et al., *Sustainable Conversion of Carbon Dioxide: An Integrated Review of Catalysis and Life Cycle Assessment*. Chemical Reviews, 2018. **118**(2): p. 434-504.
176. Porteron, S. and E.d. Bruijne, *Identification and analysis of promising carbon capture and utilisation technologies, including their regulatory aspects*. 2019, European Commission.
177. Ausfelder, F. and H. Dura, *Optionen für ein nachhaltiges Energiesystem mit Power-to-X Technologien*. 2019, Kopernikus P2X.
178. Liu, C.M., et al., *A life cycle assessment of greenhouse gas emissions from direct air capture and Fischer-Tropsch fuel production*. Sustainable Energy & Fuels, 2020. **4**(6): p. 3129-3142.
179. Stoffstromsysteme, I.g.-I.f.Z.-u. MENA-Fuels - Roadmap zur Erzeugung nachhaltiger synthetischer Kraftstoffe im MENA-Raum zur Defossilisierung des Verkehrs in Deutschland. 2021; Available from: <http://www.izes.de/de/projekte/mena-fuels>.
180. e.V.; D.G.f.C.T.u.B. NAMOSYN - Nachhaltige Mobilität durch synthetische Kraftstoffe. 2021; Available from: <http://namosyn.de>.
181. Wulf, C., P. Zapp, and A. Schreiber, *Review of Power-to-X Demonstration Projects in Europe*. Frontiers in Energy Research, 2020. **8**(191).
182. Patricio, J., et al., *Region prioritization for the development of carbon capture and utilization technologies*. Journal of CO2 Utilization, 2017. **17**: p. 50-59.
183. Psarras, P.C., et al., *Carbon Capture and Utilization in the Industrial Sector*. Environmental Science & Technology, 2017. **51**(19): p. 11440-11449.
184. Markusson, N., et al., *A socio-technical framework for assessing the viability of carbon capture and storage technology*. Technological Forecasting and Social Change, 2012. **79**(5): p. 903-918.
185. Bäckstrand, K., J. Meadowcroft, and M. Oppenheimer, *The politics and policy of carbon capture and storage: Framing an emergent technology*. Global Environmental Change, 2011. **21**(2): p. 275-281.
186. Nataly Echevarria Huaman, R. and T. Xiu Jun, *Energy related CO2 emissions and the progress on CCS projects: A review*. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2014. **31**: p. 368-385.
187. Li, Q., et al., *A National Survey of Public Awareness of the Environmental Impact and Management of CCUS Technology in China*. Energy Procedia, 2017. **114**: p. 7237-7244.
188. Jiang, K. and P. Ashworth, *The development of Carbon Capture Utilization and Storage (CCUS) research in China: A bibliometric perspective*. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2021. **138**: p. 110521.
189. Stephens, J.C., et al., *Characterizing the international carbon capture and storage community*. Global Environmental Change, 2011. **21**(2): p. 379-390.
190. Jones, C.R., et al., *The Social Acceptance of Carbon Dioxide Utilisation: A Review and Research Agenda*. Frontiers in Energy Research, 2017. **5**(11).
191. Jones, C.R., B. Olfe-Kräutlein, and D. Kaklamanou, *Lay perceptions of Carbon Dioxide Utilisation technologies in the United Kingdom and Germany: An exploratory qualitative interview study*. Energy Research & Social Science, 2017. **34**: p. 283-293.

192. Perdan, S., C.R. Jones, and A. Azapagic, *Public awareness and acceptance of carbon capture and utilisation in the UK*. Sustainable Production and Consumption, 2017. **10**: p. 74-84.
193. van Heek, J., K. Arning, and M. Ziefle, *Reduce, reuse, recycle: Acceptance of CO₂-utilization for plastic products*. Energy Policy, 2017. **105**: p. 53-66.
194. Olfe-Kräutlein, B., et al., *CO₂ as an Asset?*, in *IASS Fact Sheet*. 2014, IASS.
195. Arning, K., J. van Heek, and M. Ziefle, *Acceptance profiles for a carbon-derived foam mattress. Exploring and segmenting consumer perceptions of a carbon capture and utilization product*. Journal of Cleaner Production, 2018. **188**: p. 171-184.
196. Arning, K., et al., *Blending Acceptance as Additional Evaluation Parameter into Carbon Capture and Utilization Life-Cycle Analyses*. 2018. 34-43.
197. Arning, K., et al., *More green or less black ? How benefit perceptions of CO₂ reductions vs. fossil resource savings shape the acceptance of CO₂-based fuels and their conversion technology*. Energy and Climate Change, 2021. **2**: p. 100025.
198. Linzenich, A., et al., *What fuels the adoption of alternative fuels? Examining preferences of German car drivers for fuel innovations*. Applied Energy, 2019. **249**: p. 222-236.
199. Moser, P., et al., *Das Projekt ALIGN-CCUS - Ein Beitrag zum evolutiven Transformationsprozess der Energie- und Rohstoffversorgung durch Recycling von Kohlenstoff*. VGB Powertech, 2020(1/2): p. 43-49.
200. Moser, P., et al. *Demonstrating the CCU-chain and sector coupling as part of ALIGN-CCUS - Dimethyl ether from CO₂ as chemical energy storage, fuel and feedstock for industries*. in *14th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, GHGT-14*. 2018. Melbourne, Australia.
201. Mikunda, T., et al. *Targeted CCUS R&D Activities in Industrial Clusters*. in *14th Greenhouse Gas Control Technologies Conference 2018*. Melbourne.

Band / Volume 572

Developing an integrated value-based institutional framework for analyzing nexus governance challenges – the case study of Germany

C. Märker (2022), 290 pp

ISBN: 978-3-95806-617-5

Band / Volume 573

Ecological sanitation via thermophilic co-composting of humanure and biochar as an approach to climate-smart agriculture

D. Castro Herrera (2022), XVIII, 127 pp

ISBN: 978-3-95806-622-9

Band / Volume 574

Towards 3D crosshole GPR full-waveform inversion

A. Mozaffari (2022), viii, 122 pp

ISBN: 978-3-95806-623-6

Band / Volume 575

Investigations of the atmospheric OH, HO₂ and RO₂ radical chemical budgets and their impact on tropospheric ozone formation in a rural area in West-Germany in the JULIAC 2019 campaign

C. Cho (2022), 182 pp

ISBN: 978-3-95806-625-0

Band / Volume 576

Thermochemische Beständigkeit von Carbonat-Keramik-Membranen für die CO₂-Abtrennung in Wassergas-Shift-Reaktoren

U. Gude (2022), X, 176, LXIII pp

ISBN: 978-3-95806-626-7

Band / Volume 577

Neue Ziele auf alten Wegen?

Strategien für eine treibhausgasneutrale Energieversorgung bis zum Jahr 2045

D. Stolten, P. Markewitz, T. Schöb, F. Kullmann, S. Risch, T. Groß, M. Hoffmann, D. Franzmann, T. Triesch, S. Kraus, R. Maier, B. Gillessen, H. Heinrichs, N. Pflugradt, T. Grube, J. Linssen, L. Kotzur (2022), VI, 81 pp

ISBN: 978-3-95806-627-4

Band / Volume 578

Improving stationary and mobile cosmic ray neutron soil moisture measurements

Assessment of the cosmic ray neutron uncertainty and the potential of the thermal neutron signal

J. C. Jakobi (2022), xxiii, 137 pp

ISBN: 978-3-95806-628-1

Band / Volume 579

**Application-Specific Calibration of Condensation Particle Counters
under Low Pressure Conditions**

O. B. F. Bischof (2022), ix, 137 pp

ISBN: 978-3-95806-629-8

Band / Volume 580

**Konzepte und Potenziale von Demonstrationsanlagen für die Produktion
von erneuerbarem synthetischen Flugzeugtreibstoff als Beitrag zur
Transformation der Reviere in NRW – Abschlussbericht**

S. Weiske, F. Schorn, J. L. Breuer, L. Becka, N. Beltermann, N. Wegener,
R. C. Samsun, P. Moser, S. Schmidt, C. Götte, E. Rietmann, U. Balfanz, A.
Spieckermann, D. Beckmann, J. Edler-Krupp, F. Steffen und R. Peters
(2022), 167 pp

ISBN: 978-3-95806-630-4

Band / Volume 581

Schlussbericht

**Accelerating Low-carbon Industrial Growth through
CCUS (ALIGN-CCUS)**

S. Weiske, S. Schemme, R. C. Samsun, R. Peters, S. Troy, S. Morgenthaler,
D. Schumann, P. Zapp (2022), 216 pp

ISBN: 978-3-95806-632-8

Weitere *Schriften des Verlags im Forschungszentrum Jülich* unter
<http://wwwzb1.fz-juelich.de/verlagextern1/index.asp>

Energie & Umwelt / Energy & Environment
Band / Volume 581
ISBN 978-3-95806-632-8