HTE AG

Katalysator im Heuhaufen

Hochdurchsatzchemie beschleunigt Suche.

Von Norbert Aschenbrenner

Davon träumen Unternehmer auch heute noch: Anfang des vorigen Jahrhunderts gelang dem Chemiker Alwin Mittasch (1860–1953) die optimale Rezeptur eines Eisen-Katalysators für die erste großtechnische Synthese von Ammoniak aus Stickstoff und Wasserstoff; die ist immer noch ein wichtiges Standbein des Auftraggebers Badische Anilin-& Soda-Fabrik, heute BASF. Katalysatoren beschleunigen chemische Prozesse, indem sie einen Reaktionspfad anbieten, der durch Zwischenschritte energetisch günstiger ist als der direkte Weg. Der Katalysator geht dabei vorübergehend eine Verbindung mit einem Reaktionspartner ein, steht aber am Ende der Gesamtreaktion wieder zur Verfügung.

Oft sind nur geringe Mengen dieser speziellen Substanzen erforderlich, um eine Synthese schnell und kostengünstig durchzuführen, aber diese Menge ist mitunter entscheidend. Dementsprechend ist die Suche nach maßgeschneiderten Katalysatoren ein wichtiger Punkt bei der Entwicklung oder Optimierung chemischer Prozesse. Nahezu alle Elemente des Periodensystems und deren Kombinationen stehen dabei zur Verfügung. Zunehmend beauftragen Ölkonzerne sowie Unternehmen für Fein-, Spezial- und Grundchemikalien kleinere Hightech-Firmen wie die Heidelberger HTE AG mit der Entwicklung neuer Katalysatoren oder der Optimierung von Prozessen.

Automaten testen Verbindungen

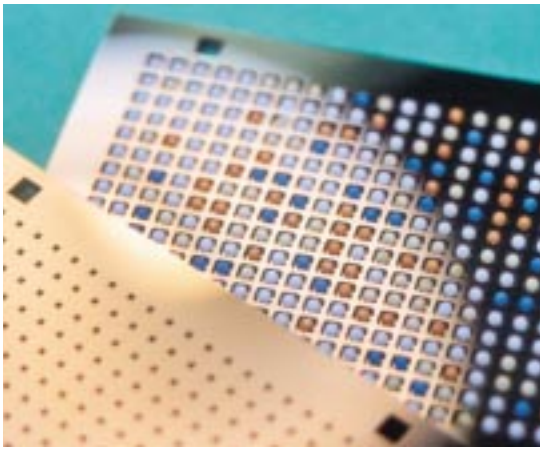
Insbesondere die so genannte Hochdurchsatzforschung (*high throughput experimentation*, HTE) beziehungsweise die Kombinatorische Chemie hilft den Forschern, sehr schnell umfangreiche Bibliotheken chemischer Verbindungen anzulegen. Pipettierroboter oder Automaten mischen definierte Mengen an Grundstoffen, das Ergebnis sind bis zu zehntausend Kombinationen gleichzeitig, die im Parallelbetrieb auf ihre Wirksamkeit getestet werden. Während Alwin Mittasch vielleicht 200 Verbindungen pro Versuchsanlage und Jahr prüfen konnte, bewältigt das Heidelberger Unternehmen diese Zahl an einem Tag.

Ein weiterer Vorteil ist laut Vorstandssprecher Dirk Demuth: »Mit Kombinatorik können wir auch exotische Verbindungen testen, die bei der herkömmlichen Forschung wohl unter den Tisch fallen würden.« Katalysatoren erzeugen die HTE-Wissenschaftler unter anderem mit ihrem zum Patent angemeldeten *split and pool*-Verfahren: Die Forscher teilen einige tausend Aluminiumoxid-Kügelchen mit einem Durchmesser von etwa einem Millimeter in fünf gleiche Portionen. Jeden Teil tränken sie mit einer anderen Salzlösung beispielsweise der Metalle Kobalt, Molybdän, Eisen, Mangan und Vanadium. Die HTE-Forscher vereinen alle Kügelchen, teilen sie erneut in Portionen auf und tränken sie wieder in den Lösungen – insgesamt fünf Mal. Die nun auf der Oberfläche entstandenen Metallsalze unterscheiden sich statistisch verteilt in ihrer Zusammensetzung. Abschließend werden sie noch oxidiert, dann sind die Kugeln bereit für den Test auf katalytische Aktivität.

Zur schnellen Untersuchung können in einem Silizium-Wafer bis zu 384 Kügelchen während einer Reaktion beobachtet werden. Die rechteckigen Wafer haben isolierte Hohlräume, die jeweils eines davon aufnehmen. Durch Kanäle strömen Gase oder Flüssigkeiten. Über einen winzigen Einlass kommt jedes Kügelchen in Kontakt mit den Ausgangsstoffen und bewirkt eine Reaktion – oder auch

Materialproben verschiedener Katalysatoren. Die HTE-Forscher pressen ihre Proben in verschiedene Formen – je nach Reaktortyp und Reaktion, für die sie vorgesehen sind.

BEIDE FOTOS: HTE



In einem Mikroreaktor liegen Katalysatorkügelchen zufällig verteilt nebeneinander. Im Parallelbetrieb wird jedes getestet, ob es bei einer bestimmten Reaktion den Umsatz erhöht. Erweist es sich als wirksam, ermitteln die HTE-Forscher die exakte Zusammensetzung.

Wertvolle Antreiber

Ein Katalysator ist ein Stoff, der eine mögliche Reaktion hervorruft, ihre Geschwindigkeit verändert oder sie in eine bestimmte Richtung lenken kann, der jedoch unverändert aus der Reaktion hervorgeht. So lautet die nüchterne Definition von Stoffen, ohne die in der chemischen Industrie nichts laufen würde: Mit Katalysatoren – meist metallhaltigen Verbindungen – werden heute neunzig Prozent der chemischen Produkte hergestellt. Der Weltmarkt für Katalysatoren betrug 2001 rund 10 Milliarden Dollar, 2007 sollen es knapp 13 Milliarden Dollar sein. Der Wert der Produkte übersteigt dabei den Wert der Katalysatoren um ein Vielfaches. Allein die deutschen Chemieunternehmen setzen pro Jahr rund 130 Milliarden Euro um. Das größte Einsatzgebiet von Katalysatoren ist der Umweltsektor. Ob Pkw, Lastwagen oder Industrieanlage, mit katalytischen Verfahren werden Schadstoffe wie Kohlenmonoxid, Stickoxide oder Schwefeloxide zu harmlosen Substanzen umgewandelt. Auch die Erdölindustrie ist stark von Katalysatoren abhängig. Ohne diese würde es die modernen Kunststoffe nicht geben; nur die Vielfalt an Katalysatoren ermöglicht es den Entwicklern, immer neue Polymere herzustellen.

nicht. Ein Roboter nimmt über eine Sonde automatisch Proben aus den Hohlräumen. Daher wissen die Chemiker, welcher Katalysator an welcher Position auf dem Wafer wie gut funktioniert. Nur Erfolg versprechende Kandidaten werden dann hinsichtlich der Zusammensetzung ihrer Metallmischung untersucht.

Es gilt stets, die optimale Kombination aus Ausbeute und Selektivität zu erzielen, wobei neben der chemischen Zusammensetzung auch Faktoren wie Temperatur- und Druckverlauf eine entscheidende Rolle spielen. Daraus resultieren enorme Datenmengen, die neuronale Netze untersuchen, um die günstigste Kombination für den kompletten Prozess zu ermitteln. Für einen ihrer Kunden testeten die HTE-Forscher in einem Jahr rund 15 000 Verbindungen in 150 000 Versuchen mit verschiedenen Varianten von Ausgangsstoffen, Temperaturen und Drucken. Im Endeffekt verbesserte das Ergebnis die Ausbeute des Kunden von 5 auf rund 45 Prozent.

Ein anderer Typ von Reaktoren, in dem die Katalysatoren als Kugeln, Pellets oder in anderer Form eingesetzt werden, kommt den Verhältnissen technischer Großanlagen näher als die Silizium-Wafer. Denn das Übertragen einer Entwicklung aus dem Labor auf die Produktionsmaschinen kostet Chemieunternehmen viel Zeit und schmälert damit indirekt den Umsatz: Oft dauert es acht bis zwölf Jahre, bis ein neuer Produktionsprozess eingerichtet ist. Die HTE-Technik soll dementsprechend nicht nur Kosten in der Forschung und für Pilotanlagen sparen, sondern auch die Markteinführung von Produkten beschleunigen. Verschiedene Aufträge wurden erfolgreich abgeschlossen, einige davon brachten sogar Patentanmeldungen.

Neben der Auftragsforschung verfolgt HTE seit seiner Gründung im Jahr 1999 auch eigene Projekte. Am weitesten gediehen ist ein Katalysator, der Stickoxide aus Abgasen entfernt. Die Autoindustrie braucht in den nächsten Jahren ein solches System, das auch bei Turbodieseln funktioniert. Denn die Einspritztechnik reduziert zwar den Treibstoffverbrauch, doch höhere Verbrennungstemperaturen, Schwefel im Kraftstoff und immer mehr Sauerstoff im mageren Kraftstoffgemisch setzen dem bekannten »Kat« zu. Deshalb erfüllen derzeitige Motoren die Abgasnorm Euro V noch nicht, die Ende des Jahrzehnts gelten soll. Ein HTE-Katalysator, der auch unter mageren Abgasbedingungen Stickoxide zu Stickstoff reduziert, ist derzeit noch nicht thermisch stabil genug. Das Heidelberger Unternehmen will das Problem mit einer veränderten Zusammensetzung des Materials lösen und denkt bereits an weitere Einsatzgebiete. Von der Heizung privater Haushalte bis zum Kraftwerk – bessere und preiswertere Katalysatoren gegen die Umweltgifte sind in der Energietechnik sehr gefragt. ◁

Norbert Aschenbrenner ist promovierter Chemiker und arbeitet als Wissenschaftsjournalist in München.

Anzeige