

Press release

DECHEMA Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V.

Dr. Christine Dillmann

11/16/2004

<http://idw-online.de/en/news90382>

Personnel announcements, Research results
Biology, Chemistry, Information technology, Mechanical engineering
transregional, national

Vom Molekularen Prozeß zur Chemischen Technik

DECHEMA-Preis 2004 für Prof. Dr. rer.nat. habil. Olaf Deutschmann, Universität Karlsruhe (TH)

Der DECHEMA-Preis 2004 der Max-Buchner-Forschungstiftung geht in diesem Jahr an Professor Olaf Deutschmann, Universität Karlsruhe (TH), für seine bahnbrechenden Arbeiten auf dem Gebiet der fluiddynamischen Modellierung komplexer reaktiver Systeme auf der Basis detaillierter physikalisch begründeter Ansätze.

Den Begriff "Katalysator" verbindet Otto Normalverbraucher mit einem Gerät unter seinem Fahrzeug, das dessen Schadstoffausstoß verringert. Obwohl heute der Großteil der Produkte der chemischen Industrie mit Hilfe von Katalysatoren hergestellt wird, steht der Autoabgaskatalysator nicht zu Unrecht als Synonym für katalytische Umwandlungsprozesse. Er hat sich millionenfach bewährt, stellt aber auch eines der komplexesten chemischen Reaktionssysteme dar. Die Komplexität bezieht sich insbesondere auf die sich kontinuierlich ändernden Einströmbedingungen. Die Zusammensetzung und Temperatur des vom Motor kommenden Abgases hängen unmittelbar davon ab, ob das Fahrzeug gerade gestartet wurde, an einer Ampel im Leerlauf steht oder auf der Autobahn mit 130 km/h fährt. Der Autoabgaskatalysator soll aber unter allen Bedingungen den Ausstoß von Stickoxiden, Kohlenmonoxid und Kohlenwasserstoffen möglichst vollständig unterdrücken. Um dieses Ziel zu erreichen, werden eine Vielzahl von Faktoren wie Form, Material und Struktur des Katalysatorträgers, Katalysatorzusammensetzung und -masse, Zusatzstoffe, Anströmung oder Wärmeisolierung variiert.

Das Bestreben von Deutschmann und seiner Arbeitsgruppe an der Universität Karlsruhe ist es, Modelle zu entwickeln, die zum Beispiel den Einfluß aller Parameter auf die Schadstoffumsetzung berücksichtigen können. Der Weg dazu führt über eine möglichst detaillierte Beschreibung der im Abgaskatalysator ablaufenden physikalischen und chemischen Einzelprozesse. Sie sollen dabei so beschrieben werden, wie sie molekular ablaufen. Auf der Basis dieser detaillierten Modelle werden Computerprogramme entwickelt, die zum Beispiel den Schadstoffausstoß eines Abgaskatalysators unter variierenden Einströmbedingungen und Parametern vorausberechnen können. Damit läßt sich der Aufwand kostenintensiver experimenteller Forschung und Entwicklung am technischen System erheblich reduzieren.

Die von Deutschmann vorangetriebene Methodik der Verwendung detaillierter, auf dem molekularen Geschehen basierender Modelle zur Beschreibung des Gesamtverhaltens technischer Systeme hat in jüngster Zeit in zahlreiche weitere Bereiche Einzug gehalten. Besonders intensiv beschäftigt sich die Karlsruher Gruppe auch mit der Nutzung von Erdgas als chemischem Grundstoff. Durch katalytische Partialoxidation läßt sich Erdgas in Synthesegas und Olefine innerhalb weniger Millisekunden und ohne äußere Energiezufuhr umwandeln. Aus Synthesegas kann zum Beispiel Methanol oder synthetischer Diesel gewonnen werden. Die katalytische Partialoxidation wurde auch zur Wasserstofferzeugung aus Erdgas, Alkoholen sowie Benzin und Diesel erfolgreich angewandt. Die Reaktoren sind sehr kompakt, so daß deren Verwendung als Wasserstoffquelle durch Reformierung von Benzin oder Diesel in Fahrzeugen denkbar ist. Mit Wasserstoff kann on-board mittels Brennstoffzellen Elektrizität erzeugt, die Schadstoffbildung im Motor verringert und der Ausstoß von Stickoxiden katalytisch reduziert werden.

Die Partialoxidation der teilweise hoch-explosiven Reaktionsgemische durch die so genannte Hochtemperaturkatalyse erfolgt bei zirka 1000°C. Zur technischen Realisierung, insbesondere aus Sicherheitsaspekten, ist ein grundlegendes Verständnis des Reaktorverhaltens vonnöten. Auch hier können nur Modelle, die auf dem molekularen Geschehen aufbauen, vertrauenswürdige Abschätzungen liefern. Dabei sind auch die in der fluiden Phase stattfindenden chemischen Reaktionen adäquat zu berücksichtigen.

Die großen Herausforderungen bei diesem wissensbasierten Ansatz zum Design und zur Optimierung von chemischen Anlagen bestehen neben der Entwicklung effizienter Computerprogramme insbesondere in der Aufklärung der molekular ablaufenden Vorgänge. Für die Gruppe von Professor Deutschmann sind daher sowohl eigene experimentelle Untersuchungen als auch die intensive Zusammenarbeit mit Forschungsgruppen im In- und Ausland essentiell. Vom Deutschen Akademischen Austauschdienst und der amerikanischen National Science Foundation sowie der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) unterstützte Austausch- und Stipendienprogramme insbesondere mit den USA, die durch die DFG an den Universitäten Heidelberg bzw. Karlsruhe geförderten Sonderforschungsbereiche 359 und 551 und eine Vielzahl industrie-geförderter Projekte haben hier beispielhaft zum notwendigen Erfahrungsaustausch und Wissenszuwachs beigetragen.

Beruflicher Werdegang:

Prof. Dr. Olaf Deutschmann (Jahrgang 1965) hat an der TU Magdeburg und der Humboldt-Universität Berlin Physik studiert. 1996 hat er bei Professor Jürgen Warnatz an der Fakultät Chemie der Universität Heidelberg mit der Dissertation "Modellierung von Reaktionen an Oberflächen und deren Kopplung mit chemisch reagierenden Strömungen" promoviert. Während eines anschließenden anderthalbjährigen Postdoc-Aufenthalts in den USA, an der University of Minnesota und dem Los Alamos National Lab, befaßte er sich mit der Umwandlung von Erdgas in nützliche chemische Grundstoffe durch Hochtemperaturkatalyse. Nach seiner Rückkehr an die Universität Heidelberg, wo er sich mit der Wechselwirkung von Chemie und Transport in katalytischen Reaktoren beschäftigte, habilitierte er sich 2001 im Fach Physikalische Chemie. Seit 2003 ist er Professor für Chemische Technik an der Universität Karlsruhe (TH). Am dortigen Institut für Technische Chemie und Polymerchemie bearbeitet seine Gruppe derzeit Themen aus den Bereichen heterogene Katalyse, chemische Gasphasenabscheidung sowie Modellierung und Simulation reaktiver Strömungen.

Der DECHEMA-Preis der Max-Buchner-Forschungsstiftung wird seit 1951 jährlich vergeben. Damit werden herausragende Forschungsarbeiten aus den Bereichen Technische Chemie, Verfahrenstechnik, Biotechnologie und Chemische Apparatechnik gewürdigt. Dabei werden besonders Arbeiten jüngerer Forscher berücksichtigt, die von grundsätzlicher Bedeutung sind und eine enge Verflechtung von Forschung und praktischer Anwendung zeigen. Dieser Preis ist mit 20.000 Euro dotiert.



DECHEMA-Preisträger 2004: Prof. Olaf Deutschmann, Universität Karlsruhe (TH)