



forschen.
vernetzen.
anwenden.

Innovationsreport 2026

Industrielle Gemeinschaftsforschung

IGF-Forschungsvorhaben 01IF22826N / 22826 N

Optimierung des Prozessschritts der Desorption bei trockenen CO₂-Abtrennverfahren mit aminfunktionalisierten Adsorbentien

Laufzeit:

01.04.2023 – 31.12.2025

Beteiligte Forschungsstelle(n):

Institut für Umwelt & Energie, Technik & Analytik e.V. (IUTA)
Forschungsabteilung Gasprozesstechnik & Energieverfahrenstechnik

Schlussbericht vom 23.06.2026

zum IGF-Vorhaben 01IF22826N

Thema

Optimierung des Prozessschritts der Desorption bei trockenen CO₂-Abtrennverfahren mit amin-funktionalisierten Adsorbentien (Desorptionsoptimierung)

Berichtszeitraum

01.04.2023 bis 31.12.2025

Forschungsvereinigung

Institut für Umwelt & Energie, Technik & Analytik e.V. (IUTA)
Bliersheimer Straße 58 - 60
47229 Duisburg

Forschungseinrichtung(en)

Institut für Umwelt & Energie, Technik & Analytik e.V. (IUTA)
Bliersheimer Straße 58 - 60
47229 Duisburg

Platz für ein Logo

Inhaltsverzeichnis

1	Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse	3
1.1	Arbeitspaket 1: Auslegung des erweiterten Versuchstands	3
1.2	Arbeitspaket 2: Entwicklung optimierter Wärmeübertragerkonfigurationen.....	5
1.3	Arbeitspaket 3: Umbau des Versuchstands	9
1.4	Arbeitspaket 4: Adsorptionsuntersuchungen am Versuchsstand.....	12
1.5	Arbeitspaket 5: Desorptionsuntersuchungen am Versuchsstand.....	16
1.6	Arbeitspaket 6: Simulation des Adsorptions- und Desorptionsprozesses im Festbett.....	24
1.7	Arbeitspaket 7: Evaluation des neu entwickelten Verfahrens am Teststand	32
1.8	Arbeitspaket 8: Wirtschaftlichkeitsbetrachtung	39
2	Verwendung der Zuwendung.....	47
3	Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit	48
4	Darstellung des wissenschaftlich-technischen und wirtschaftlichen Nutzens der erzielten Ergebnisse insbesondere für KMU sowie ihres innovativen Beitrags und ihrer industriellen Anwendungsmöglichkeiten	49
5	Wissenstransfer in die Wirtschaft	51
6	Plan zum Ergebnistransfer in die Wirtschaft.....	53
6.1	Durchgeführte Transfermaßnahmen (vom Projektstart bis zum Projektende).....	53
6.2	Geplante Transfermaßnahmen (nach Projektende)	54
7	Literaturverzeichnis	54
8	Anhang.....	56

1 Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Ziel dieses Forschungsvorhabens war es, durch die Weiterentwicklung des Prozessschritts der Desorption bei trockenen CO₂-Abtrennverfahren mit aminfunktionalisierten Adsorbentien eine einfache und effiziente Abscheidetechnologie zur Dekarbonisierung von Abgas- und Produktströmen bereitzustellen. Als Grundlage diente das kommerziell verfügbare Ionentauscherharz Lewatit® VP OC 1065, welches in einem erweiterten Festbettversuchsaufbau unter Variation der Betriebsparameter detailliert untersucht wurde. Die verfahrenstechnische Optimierung der Desorption verfolgte das Ziel, eine bestmögliche Kombination aus thermischer Desorption, Druckerniedrigung und Verdrängungsdesorption in einem gekoppelten PTSA-Verfahren zu etablieren. Experimentelle Untersuchungen, die Entwicklung optimierter Wärmeübertragerkonfigurationen sowie detaillierte numerische Prozesssimulationen wurden gezielt aufeinander abgestimmt eingesetzt, um dieses Ziel zu erreichen.

Da eine hohe Wirtschaftlichkeit für die Akzeptanz und die industrielle Anwendung neuer Dekarbonisierungstechnologien ausschlaggebend ist, erfolgte die Auslegung des Systems unter Berücksichtigung der realen Randbedingungen mittelständischer Unternehmen mit signifikanten CO₂-Emissionen. Insbesondere die apparative Optimierung der Wärmeeinbringung in die Festbettschüttung war hierbei von besonderer Bedeutung, da sie maßgeblich dazu beitragen sollte, den Energieverbrauch für die Regeneration gegenüber klassischen flüssigen Aminwäschen deutlich zu senken. Zur Gewährleistung der Praxistauglichkeit wurde die optimierte Prozessführung zudem mit realem Abgas aus einem Heizkessel-Modul in alternierenden Ad- und Desorptionszyklen evaluiert. Der technologische Erfolg wurde anhand der erzielten CO₂-Kapazität, der Kinetik, des Energieverbrauchs und der zyklischen Stabilität des Adsorptionsmittels beurteilt.

1.1 Arbeitspaket 1: Auslegung des erweiterten Versuchstands

- Durchgeführte Arbeiten
 - Stoff-, Mengen- und Energiebilanzen zur hydraulischen Anlagenauslegung,
 - Abgleich der vorhandenen Ausrüstung (MFC, Sicherheits- und Stellventile, Beheizungssysteme, Druckregelung, Vakuumisierung, Analyseequipment etc.) mit den gestellten experimentellen Anforderungen,
 - Integration eines Gasbefeuchters sowie von Feuchtigkeitssensoren in den Ein- und Auslassstrom zur Erzeugung realistischer Gaszusammensetzungen beim Ad- und Desorptionsprozess,
 - Nachrüstung eines Dampfgenerators und Einspritzsystems zur Dampfunterstützung bei der Regenerierung,
 - Nachrüstung eines Kondensators hinter dem Kolonnenkopf.

- Erzielte Ergebnisse

Zu Projektbeginn erfolgte zunächst die verfahrenstechnische Auslegung des Umbaus und der Erweiterung des im IUTA-Technikum vorhandenen Teststands zur Anpassung an die speziellen Anforderungen bei der Untersuchung des aminfunktionalisierten Adsorbens unter praxisähnlichen Bedingungen. Abbildung 1 zeigt das Fließschema des zum Projektbeginn geplanten Adsorptionsteststands. Die Anlage wurde um drei Mass Flow Controller (MFC) für N₂, CO₂ und O₂ bzw. synthetische Luft erweitert, so dass alle praxisrelevanten Gasmischungen mit variablen Anteilen an N₂, CO₂ und O₂ aus 50 l Druckgasflaschen dosiert werden können. Nach Zusammenführung der Gasströme in einer Mischkammer kann das Gasgemisch in einem Sättiger auf den

gewünschten Taupunkt gekühlt und mit Wasserdampf gesättigt werden (z.B. 12°C für Adsorption bei 23°C und 50% relative Feuchte - rF).

Zur Desorption mit Stickstoff wird der N₂-Flow ebenfalls über MFC (180-9.000 NI/h) eingestellt. Alternativ kann auch synthetische Luft über einen entsprechenden MFC (1-800 NI/h) dosiert werden. Über den nachfolgenden Gaserhitzer lässt sich die Temperatur des in den Reaktor eingeleiteten N₂- oder Luft-Stroms regeln. Zur Befeuchtung des Gasstroms kann mittels eines Flüssigkeitsdurchflussmessers (MFC Liquiflow 0-1.000 Ng/h) zudem eine definierte Wassermenge, die in einem Dampferzeuger verdampft wird, hinzu dosiert werden. Alternativ besteht auch die Möglichkeit der Desorption mit reinem Wasserdampf. Die zum Reaktor führenden Rohrleitungen sind mit Heizbändern temperiert und erlauben optional eine weitergehende Konditionierung des feuchten Gases bzw. des Dampfes. Über einen Demister erfolgt ggf. die Abscheidung von Wassertröpfchen.

Der Ad-/Desorber besteht aus einem Edelstahlbehälter mit einem Innen-Ø von ca. 50 mm und einer Gesamthöhe von ca. 320 mm, mit jeweils getrennten Zu-/Ableitungen für die Adsorption und die Desorption. Die Standardschütthöhe beträgt ca. 300 mm, sodass eine ausreichende Menge des aminfunktionalisierten Adsorbens sowie ggf. auch von Einbauten zur Erhöhung der Wärmeleitfähigkeit eingebracht werden können. Am Reaktor ist zudem eine Heizmanschette zur optionalen Beheizung der Adsorbensschüttung angebracht. Um die Temperaturentwicklung im Adsorberfestbett verfolgen zu können, wurden unmittelbar vor und nach sowie an drei Stellen innerhalb der Schüttung Temperatursensoren vorgesehen.

Sowohl vor als auch hinter dem Ad-/Desorber erfassen Feuchtesensoren die Gasfeuchte im Bereich 10 bis 90 %rF und 0 bis +50 °C Gastemperatur. Hinter dem Desorber ist ein wassergekühlter Rohrbündelwärmeübertrager vorgesehen. Ihm wird zur weiteren Abgaskühlung ein ebenfalls wassergekühlter Glaskühler nachgeschaltet. Das Kühlwasser wird über ein Kältethermostat bereitgestellt. Im Glaskühler erfolgt die Kondensatabscheidung. Im Gasausgang kann zusätzlich eine Silicagel-Filterkartusche zur Kontrolle der vollständigen Wasserabscheidung installiert werden.

Um die vakuumgestützte Desorption (Vacuum Swing Adsorption – VSA bzw. Temperature Vacuum Swing Adsorption - TVSA, jeweils auch mit Dampfunterstützung) zu untersuchen, kann die Anlage in der Desorptionsphase im Unterdruck betrieben werden. Dazu ist am Ausgang des Teststands eine einstufige Drehschieberpumpe (Arbeitsbereich ca. 0-10 Nm³/h) vorgesehen.

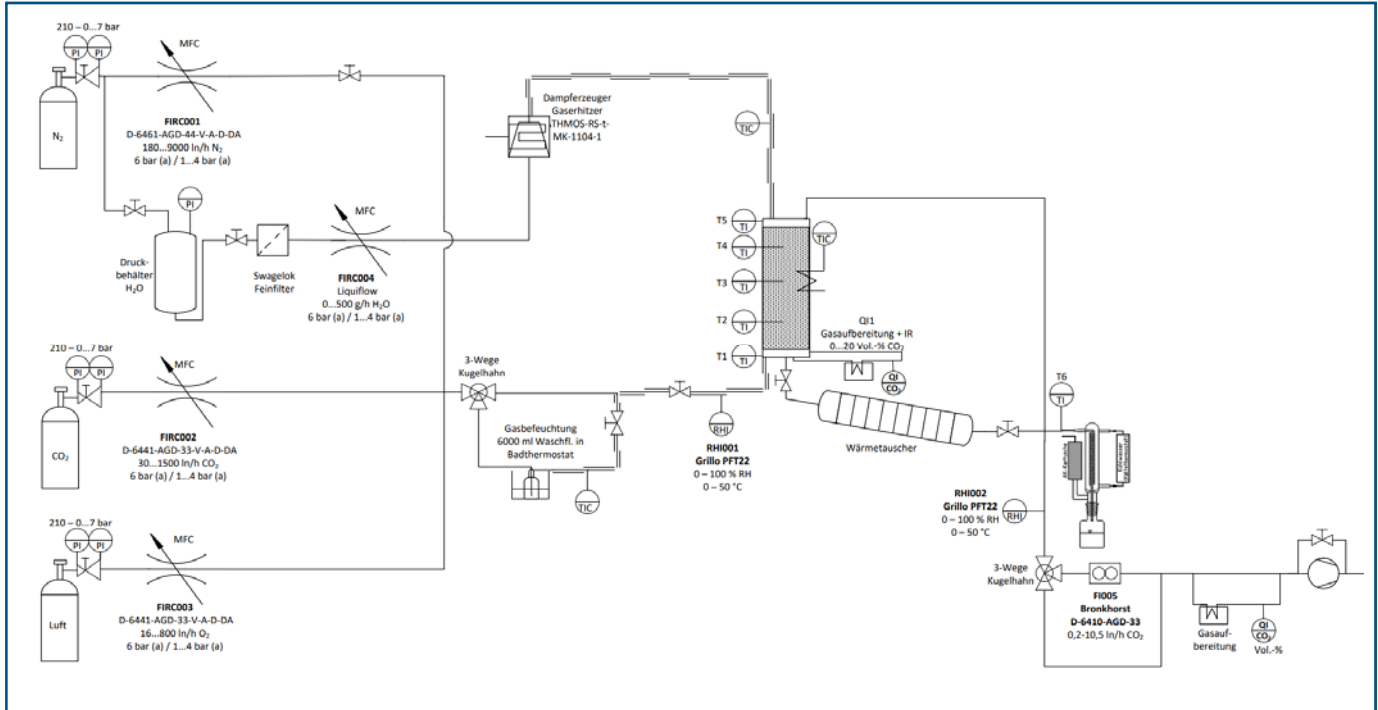


Abbildung 1: Funktionsschema des Teststands

Das Gasgemisch wird nach Durchströmen des Probenrohrs mit den zu testenden aminfunktionalisierten Adsorbentien der Gasanalyse zugeleitet. Diese besteht aus einer Gasaußbereitung und zwei Online NDIR-Gasanalysatoren (Messbereiche: 0...100 Vol.-% CO₂ und 0...10.000 ppm CO₂).

1.2 Arbeitspaket 2: Entwicklung optimierter Wärmeübertragerkonfigurationen

- Durchgeführte Arbeiten
 - Experimentelle Wärmeübergangsuntersuchungen im Labormaßstab und am Teststand,
 - Modifikation von Bettstrukturen und Füllgraden zur Optimierung der Festbett-Wärmeleitfähigkeit,
 - Erprobung thermisch leitfähiger Einbauten wie Kupfervlies und offenporigem Kupferschaum,
 - Tests mit direkter, indirekter und kombinierter Beheizung zur thermischen Leistungsbewertung,
 - Konzeptentwicklung zur Beschichtung wärmeleitender Metallstrukturen mit Speichermaterialien,
 - Evaluierung von Trägermaterialien und Haftvermittlern für funktionalisierte Metallschäume.

■ Erzielte Ergebnisse

Im Rahmen des zweiten Arbeitspakets stand die Entwicklung und Evaluierung optimierter Wärmeübertragerkonfigurationen im Fokus, um eine effizientere Wärmeein- und -auskopplung im Sorbensbett zu realisieren. Hintergrund dieser Untersuchungen ist die ausgeprägte thermische Trägheit bei der CO₂-Desorption in den verwendeten aminfunktionalisierten Sorbentien. Eine ineffiziente Wärmeeinbringung in das Festbett führt prozessbedingt zu einer unvollständigen Regeneration der Adsorber oder resultiert, da die zulässige Maximaltemperatur des Sorbens begrenzt ist, in einer unverhältnismäßig langen Desorptionsdauer. Ziel des

Arbeitspakets war es daher, unterschiedliche Konzepte zur direkten und indirekten Wärmeübertragung systematisch zu bewerten und miteinander zu vergleichen.

Zur Beantwortung dieser Fragestellungen wurden umfangreiche experimentelle Untersuchungen zum Wärmeübergang sowohl im Labormaßstab als auch unter praxisnahen Bedingungen am Teststand durchgeführt. Im Zentrum der Versuche stand die Erprobung verschiedener Einbauten, die die Wärmeleitfähigkeit innerhalb des Festbetts signifikant verbessern sollten. Hierzu wurden in Reaktoren mit kreisförmigen und quadratischen Querschnitten unterschiedliche Bettstrukturen und Füllgrade analysiert und mit thermisch leitfähigen Einbauvarianten – insbesondere Kupfervlies und offenporigem Kupferschaum – modifiziert.



Abbildung 2: Reaktoren mit kreisförmigen und quadratischen Querschnitten und thermisch leitfähigen Reaktoreinbauten

Die Testreihen wurden systematisch mit direkter, indirekter sowie kombinierter Beheizung durchgeführt. Im Rahmen der Auswertung wurden die thermische Leistungsfähigkeit, die Homogenität der Temperaturverteilung sowie der Einfluss der spezifischen Kolonnenkonfiguration detailliert verglichen.

Abbildung 3 zeigt exemplarisch die Ergebnisse eines Versuchs, bei dem die Wirkung von wärmeleitfähigen Einbauten, in diesem Fall offenporige Kupferschäume, auf das Temperaturverhalten und den CO₂-Durchbruch bei der CO₂-Adsorption untersucht wurde. Die Versuchsdurchführung erfolgte bei einem konstanten Volumenstrom von 1000 NI/h und einer CO₂-Konzentration von 5 Vol.-%. In der Grafik sind die Ergebnisse für zwei Szenarien dargestellt: Die durchgezogenen Linien zeigen den Referenzversuch ohne Einbauten, wohingegen die gestrichelten Linien den Verlauf mit eingebrachten Kupferschäumen repräsentieren. Die Temperaturverläufe sind in der Reihenfolge blau (untere Messstelle), braun (mittlere Messstelle) und grün (obere Messstelle) im Strömungsverlauf der Sorbensschüttung dargestellt. Es ist zu erkennen, dass ohne Einbauten insbesondere im oberen Bereich der Kolonne vergleichsweise hohe Temperaturspitzen auftreten. Mit den wärmeleitfähigen Einbauten hingegen fällt der Temperaturanstieg langsamer aus. Es bilden sich breitere Temperaturplateaus, die Spitzen sind deutlich abgeflacht. Das deutet auf eine verbesserte Wärmeverteilung und eine effektivere Abfuhr der Sorptionswärme hin. Bei den in rot dargestellten CO₂-Konzentration ist zu erkennen, dass der CO₂-Durchbruch ohne Einbauten bereits nach wenigen Minuten erfolgt, da die Beladungskapazität rasch erschöpft ist. Mit den wärmeleitfähigen Einbauten ist der Durchbruch deutlich verzögert, was darauf hinweist, dass das Adsorberbett effektiver genutzt wird, bevor CO₂ im Abgas nachweisbar ist.

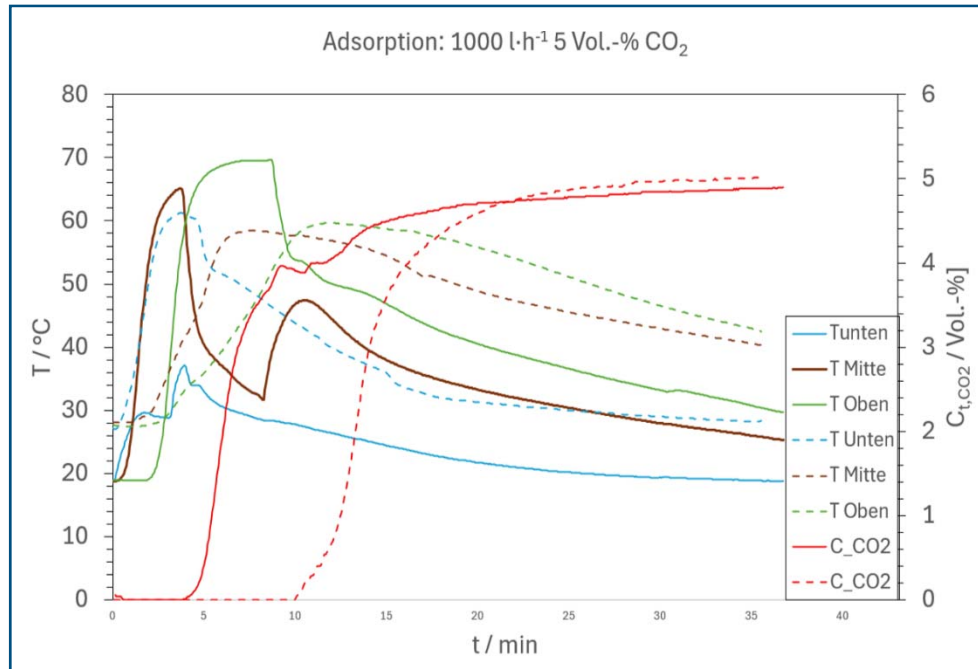


Abbildung 3: Adsorptionstests ohne/mit Wärmeübertragungs-Einbauten (Volllinie: Schüttung, Strichlinie: Metallschaum-Einbauten)

Ein exemplarisches Ergebnis eines Desorptionsversuchs ist in Abbildung 4 dargestellt. Es handelt sich um eine TVCSA-Desorption mit einem Strippgasstrom von 1000 l/h Stickstoff bei 120 °C und einem Betriebsdruck von 0,6 bar(a). Untersucht wurde erneut der Einfluss zusätzlicher Wärmeübertragungseinbauten im Vergleich zu einer klassischen Schüttung ohne Einbauten.

Im Diagramm sind abermals die Temperatur- und CO₂-Verläufe dargestellt, und zwar sowohl für die reine Schüttung (Volllinien) als auch für die Variante mit eingebrachten wärmeleitenden Strukturen (gestrichelte Linien). Es ist zu erkennen, dass sich beim Versuch mit Einbauten ein früherer Temperaturanstieg und eine deutlich bessere Temperaturverteilung über die Bettlänge ergibt. Hierbei ist zu beachten, dass bei der Desorption die Anströmrichtung im Reaktor von oben nach unten, also entgegengesetzt zur Anströmungsrichtung bei der Adsorption erfolgt.

Die wärmeleitfähigen Einbauten bewirken, dass früher höhere Desorptionstemperaturen erreicht werden. Wie man an den rot gekennzeichneten Kurvenverläufen erkennen kann, spiegelt sich dies in einem stärkeren und früheren CO₂-Austrag wider.

Die Einbauten sorgen somit für eine effizientere Wärmeübertragung ins Adsorbens, wodurch die Desorption beschleunigt und die Zykluszeiten insgesamt deutlich verkürzt werden konnten. Gerade bei sorbensschonenden Desorptionstemperaturen ist dies ein entscheidender Hebel für eine energieeffiziente und zykluszeitoptimierte CO₂-Abtrennung.

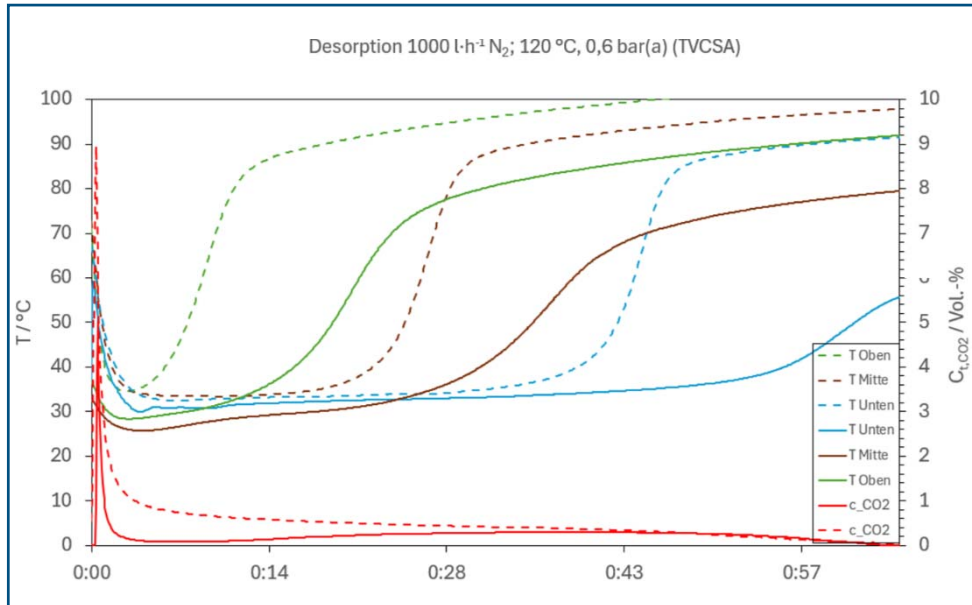


Abbildung 4: Desorptionstests ohne/mit Wärmeübertragungs-Einbauten (Volllinie: Schüttung, Strichlinie: Metallschaum-Einbauten)

Die Ergebnisse der Desorptions- als auch der Adsorptionsversuche belegen, dass die Wärmeübertragung der entscheidende Schlüsselparameter für die Gesamteffizienz ist, da sie maßgeblich die erreichbaren Zykluszeiten bestimmt.

Basierend auf den gewonnenen Erkenntnissen zur Limitierung des konventionellen Schüttungskonzepts und der Beschleunigung der Zykluszeiten durch das Einbringen wärmeleitender Einbauten, wurde zum Abschluss des Arbeitspakets ein zukunftsweisender Lösungsansatz entwickelt und in ersten Vorversuchen evaluiert. Die Innovation besteht darin, die Wärmeleitstrukturen nicht mehr nur als Fremdkörper in die Schüttung einzubringen, sondern den Metallschaum selbst als funktionalisiertes Adsorbens zu nutzen. Ziel ist es, gut leitende Metallstrukturen (z. B. Kupfer, Aluminium oder Chrom-Nickel) unter Einsatz von Haftvermittlern direkt mit dem Speichermaterial (wie Lewatit, Purolite oder PEI) zu beschichten. Erste Voruntersuchungen (siehe Abbildung 5) bestätigen das hohe Potenzial dieses Konzepts. Bei der Beschichtung eines Aluminium-Meshes mit Lupamin konnten bereits 36 Gew.-% des Sorbens-Materials stabil auf die Struktur aufgebracht werden. Dieser Ansatz vereint eine maximierte Oberfläche für die CO₂-Abscheidung mit einer hocheffizienten, direkten Wärmeleitung unmittelbar am Reaktionsort und bildet damit eine tragfähige Grundlage für weiterführende Untersuchungen. Diese sollen in dem IGF-Folgevorhaben „DAC-MetFoam - Funktionalisierte Metallschäume als thermisch optimierte Trägerstrukturen für Adsorptionsprozesse zur CO₂-Abscheidung aus Luft“ ab dem 01.04.2026 durchgeführt werden.

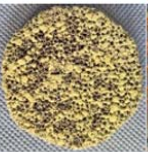
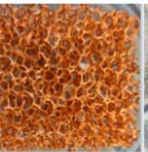
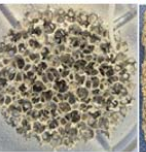
	Probe 1	Probe 2	Probe 3	Probe 4	Probe 5	Probe 6
						
Porengröße	10 ppi	40 ppi	10 ppi	10 ppi	10 ppi	1mm-Mesh
Substrat	Cr-Ni	Al	Cu	Cr-Ni	Cu	Al
Haftmittel	Cu-Spray	Cu-Spray	Cellulose	Cellulose	Sprühkleber	Lupamin
Beschichtung	Lewatitmehl	Lewatitmehl	Lewatitmehl	Lewatitmehl	Lewatit	Lewatit
Lewatit-Aufnahme	19 Gew.-%	19 Gew.-%	9 Gew.-%	14 Gew.-%	29 Gew.-%	36 Gew.-%

Abbildung 5: Voruntersuchungen zur Entwicklung funktionalisierter Metallschäume für die CO₂-Abscheidung aus Luft (DAC)

1.3 Arbeitspaket 3: Umbau des Versuchstands

- Durchgeführte Arbeiten
 - Umbau und Erweiterung des bestehenden Versuchsstands, Einbindung von Gasbefeuchter, Dampfgenerator sowie Feuchtesensoren,
 - Integration der neuen Reaktoren in die Versuchsanlage,
 - Nachrüstung des Kondensators hinter dem Kolonnenkopf,
 - Einbeziehung neuer Aggregate und Sensoren in die Mess- und Regeltechnik,
 - Inbetriebnahme und Erprobung des Versuchsstands.
- Erzielte Ergebnisse

Im Anschluss an die verfahrenstechnische Auslegung und die Entwicklung der Wärmeübertragerkonzepte erfolgte der umfangreiche Umbau des bestehenden Versuchsstands. Ziel war die Schaffung einer flexiblen, modularen Plattform für Untersuchungen im TSA- und TVSA-Betrieb (Temperature / Vacuum Swing Adsorption), die optional auch mit direkter Dampfunterstützung (sTSA, sTVSA) betrieben werden kann. Abbildung 6 zeigt die vollständig umgebaute und betriebsbereite Versuchsanlage.

Für die experimentellen Untersuchungen wurden zwei neue Kolonnengehäuse gefertigt, die wechselweise und bei Bedarf auch mit den in AP 2 evaluierten Einbauten (wie Kupfervlies und Metallschaum) in die Anlage integriert werden können. Die Adsorber werden freistehend positioniert und über speziell an die jeweilige Reaktorgeometrie angepasste Heizmanschetten temperiert. Dies ermöglicht eine variable Handhabung und schnelle Versuchswechsel.

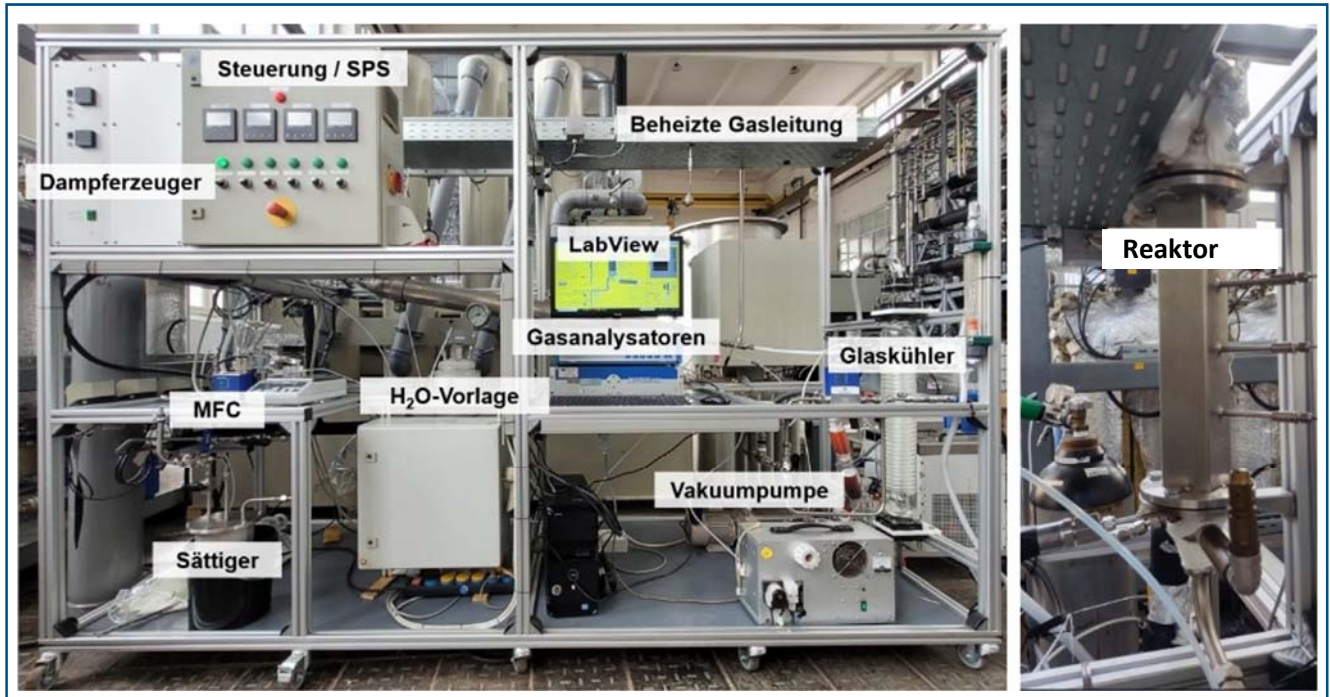


Abbildung 6: Foto des Teststands (links: Frontansicht, rechts: Blick auf den eingebauten Reaktor mit quadratischem Querschnitt)

Ein zentraler und technisch anspruchsvoller Aspekt des Umbaus war die Implementierung der Dampfdosierung. Der im Projektantrag vorgesehene Dampfgenerator (Typ Giconmes NGV-1615) erwies sich im Detail-Engineering als ungeeignet, da seine erzeugte Dampfmenge zu hoch und die Modulationsfähigkeit für den Technikumsmaßstab unzureichend war. Da kommerzielle Alternativen für hochpräzise Labor-Dampferzeuger das geplante Budget erheblich überstiegen (Kostenbeispiel der Firma ADROP: ca. 14.900 € exkl. Dosierung), wurde stattdessen ein im Institut vorhandener ADROP-Dampferzeuger (Arbeitsbereich 200 g/h bis 4 kg/h) instandgesetzt und in die Anlage integriert. Die Wasserversorgung erfolgt hierbei aus einer H₂O-Vorlage, die mittels eines Liquiflow-MFC präzise dosiert wird. Die komplexe Systemintegration dieses Moduls sowie erhebliche globale Lieferkettenprobleme bei weiteren Bauteilen (Sensoren, Reaktoren, Kühlaggregate) führten allerdings zu einer unplanmäßigen Projektverzögerung von ca. drei Monaten bei der Fertigstellung.

Die Bereitstellung der Prozessgase (Stickstoff und CO₂) wird über drei separate Mass Flow Controller (MFC) geregelt. Die Gase werden in einer Mischkammer zusammengeführt und zur Vermeidung von Kondensation über beheizte Stahlleitungen zum Reaktor geleitet. Zur Erzeugung definierter Luftfeuchtigkeiten im Feed-Strom wurde ein Gasbefeuchter integriert. Dieser bestand ursprünglich aus einem Stahlbehälter, wurde jedoch im Zuge der Inbetriebnahme zu einer 5-Liter-Glaswaschflasche mit P1-Fritte umgebaut, die in einem Labor-Kältethermostat platziert ist. Zusätzlich wurde die Gaseinlaufstrecke vor dem Reaktor mit einem leistungsstärkeren Heizband ausgestattet, um die erforderlichen Gaseintrittstemperaturen verlässlich sicherzustellen.

Für die Desorptionsphasen im TVSA-Modus wurde die Anlage um eine Drehschieber-Vakuumpumpe erweitert. Zur Rückkühlung von Gasströmen sowie zur Kondensatabtrennung wurden zudem ein Glaskühler zur Gaskonditionierung, ein Rohrbündelwärmetauscher, eine Kühlfalle sowie ein zentraler Kondensator hinter dem Kolonnenkopf nachgerüstet. Ein Umlaufkühler mit Kälte-Umwälzthermostat liefert die hierfür benötigte Kälteleistung.

Um die Bilanzen exakt schließen zu können, wurde die Mess- und Analysetechnik signifikant aufgerüstet. Die Gasanalytik umfasst zwei NDIR-Sensoren zur CO₂-Messung, die sowohl den Vol.-%-Bereich als auch – für DAC-Fragestellungen (Direct Air Capture) relevant – den unteren ppm-Bereich abdecken. Zur detaillierten thermischen Charakterisierung wurden zusätzliche Thermoelemente im Reaktorbett platziert. Darüber hinaus wurden Drucksensoren an Pumpe und Reaktor sowie ein Trommelgaszähler am Gasauslass installiert. Die anfänglich verbauten Feuchtesensoren wurden im Projektverlauf aufgrund unzureichender Genauigkeit durch hochpräzise Industriestandard-Modelle des Herstellers Mela Galltec ersetzt.

Sämtliche neuen Aggregate, Sensoren und Stellventile wurden mechanisch und steuerungstechnisch in die bestehende SPS-Infrastruktur der Anlage eingebunden. Die Prozessleittechnik und Visualisierung erfolgen über eine speziell programmierte LabVIEW-Bedienoberfläche (siehe Abbildung 7), die eine automatisierte Steuerung, Überwachung und Auswertung aller Prozessparameter in Echtzeit erlaubt.

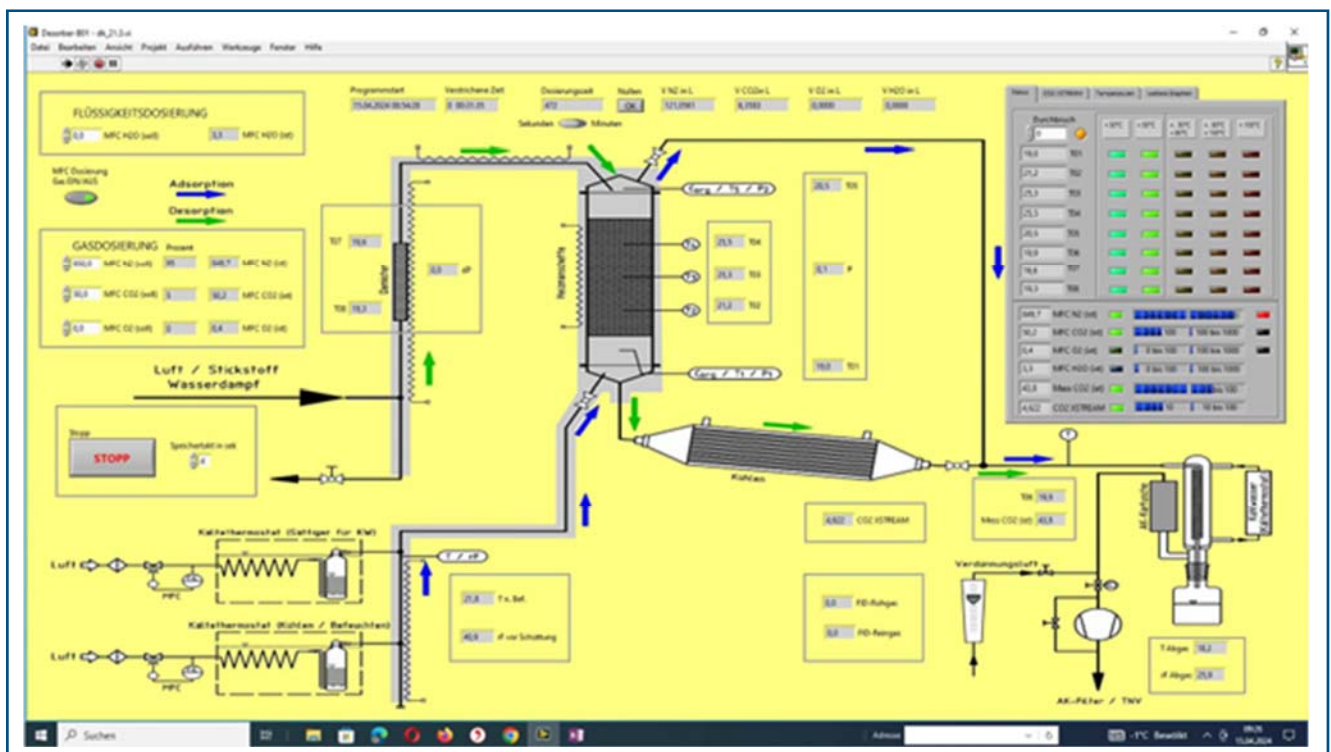


Abbildung 7: Screenshot der grafischen labview-Bedienoberfläche

Der Hauptumbau wurde 2023 abgeschlossen. Ausfälle im weiteren Versuchsbetrieb machten jedoch noch kleinere Instandsetzungsmaßnahmen erforderlich. Hierzu zählten der Ersatz der Gasaufbereitungseinheit (infolge eines irreparablen Defekts der Gasfördereinheit), der Austausch einer defekten Heizmanschette sowie die Erneuerung mehrerer Temperatursensoren zur Sicherstellung der Messgenauigkeit. Mit Abschluss dieser Arbeiten steht ein vollständig modularer und flexibel anpassbarer Prüfstand zur Verfügung, der sämtliche experimentellen Anforderungen erfüllt.

1.4 Arbeitspaket 4: Adsorptionsuntersuchungen am Versuchsstand

- Durchgeführte Arbeiten
 - Bestimmung von Gleichgewichtskonzentrationen in Abhängigkeit von Temperatur und CO_2 - bzw. H_2O -Partialdruck,
 - Systematische Durchführung von Durchbruchversuchen am Teststand zur Ermittlung der CO_2 -Beladungskapazitäten,
 - Untersuchung des Einflusses verschiedener Prozessparameter (Gaszusammensetzung, Volumenstrom, Eintrittstemperatur, relative Feuchte) auf die Kinetik der Adsorption,
 - Gravimetrische Bestimmung der CO_2 -Beladung und thermodynamische Modellierung mittels Toth-Isothermen,
 - Quantitativer Abgleich experimenteller Festbettkapazitäten mit idealisierten TGA-Literaturwerten (Parity Plots) zur Bestimmung von Skalierungsfaktoren,
 - Schaffung einer verlässlichen experimentellen Datenbasis für die Anlagen-Auslegung und die spätere Wirtschaftlichkeitsbetrachtung.
- Erzielte Ergebnisse

Im Rahmen des vierten Arbeitspakets wurde das Adsorptionsverhalten des aminfunktionalisierten Sorbens (Lewatit® VP OC 1065) unter realitätsnahen Betriebsbedingungen am Versuchsstand eingehend charakterisiert. Da sich Konzentrations- und Beladungsprofile entlang einer dynamisch durchströmten Festbettkolonne messtechnisch nur schwer direkt erfassen lassen, erfolgte die Prozessanalyse primär über die Vermessung von Durchbruchkurven der CO_2 -Konzentration am Kolonnenausgang.

Um eine fundierte und auf den Technikumsmaßstab übertragbare Datenbasis zu schaffen, wurde eine umfangreiche Versuchsmatrix abgearbeitet (siehe Abbildung 8). Diese umfasste die gezielte Variation der Gas Eintrittstemperatur (20 bis 50 °C), des Gasvolumenstroms (500 und 1000 l/h) und der relativen Gasfeuchte (0 bis 100 % rF). Die eingestellten CO_2 -Konzentrationen reichten von 420 ppm zur Abbildung von Direct-Air-Capture-Szenarien (DAC) bis hin zu 15 Vol.-% für typische industrielle Abgasströme aus Prozessen der Zement- oder Stahlindustrie.

Temperatur / °C	rF / %	Durchsatz / l _n ·h ⁻¹	CO ₂ -Konz. / Vol.-%
25	0 / 100	500 / 1000	2 / 5 / 10 / 15
40	0	500 / 1000	2 / 5 / 10 / 15
50	100	500 / 1000	2 / 5 / 10 / 15
25	Ca. 60 DAC-Simulation	Ca. 400	420 ppm

Abbildung 8: Versuchsmatrix der Adsorptionsuntersuchungen am Technikumsversuchsstand (Parameterübersicht)

Die systematische Auswertung der Durchbruchkurven und der im Reaktorbett gemessenen Temperaturprofile lieferte detaillierte Einblicke in die maßgeblichen Einflussfaktoren des Adsorptionsprozesses (siehe Abbildung 9): Eine Erhöhung des Volumenstroms von 500 auf 1.000 l/h führte zu einem deutlich früheren und steileren CO₂-Durchbruch, da die verkürzte Kontaktzeit des Gases im Adsorber die Ausnutzung der Sorptionskapazität signifikant verschlechterte. Da die CO₂-Adsorption an Aminen stark exotherm verläuft, entstehen in der wandernden Massentransferzone ausgeprägte Temperaturspitzen. Höhere Gaseintrittstemperaturen verringern das treibende thermodynamische Gefälle und führen zu geringeren Gleichgewichtsbeladungen. Bei hohen CO₂-Lasten (z. B. 15 Vol.-%) intensiviert sich die Freisetzung der Reaktionswärme erheblich, was lokale Überhitzungen erzeugt, die die weitere Adsorption hemmen und die Sättigung des Festbetts beschleunigen.

Im Gegensatz zu vielen anderen Sorbentien profitiert das eingesetzte Aminharz Lewatit® VP OC 1065 von feuchten Bedingungen. Unter trockenen Bedingungen reagieren zwei Amingruppen mit einem CO₂-Molekül zum Carbamat (2:1-Stöchiometrie), wohingegen in Anwesenheit von Wasser Bicarbonat in einer günstigeren 1:1-Stöchiometrie gebildet wird. Die experimentellen Untersuchungen bestätigten diesen Effekt in Form messbarer Kapazitätssteigerungen bei steigender relativer Feuchte des Adsorptivgases.

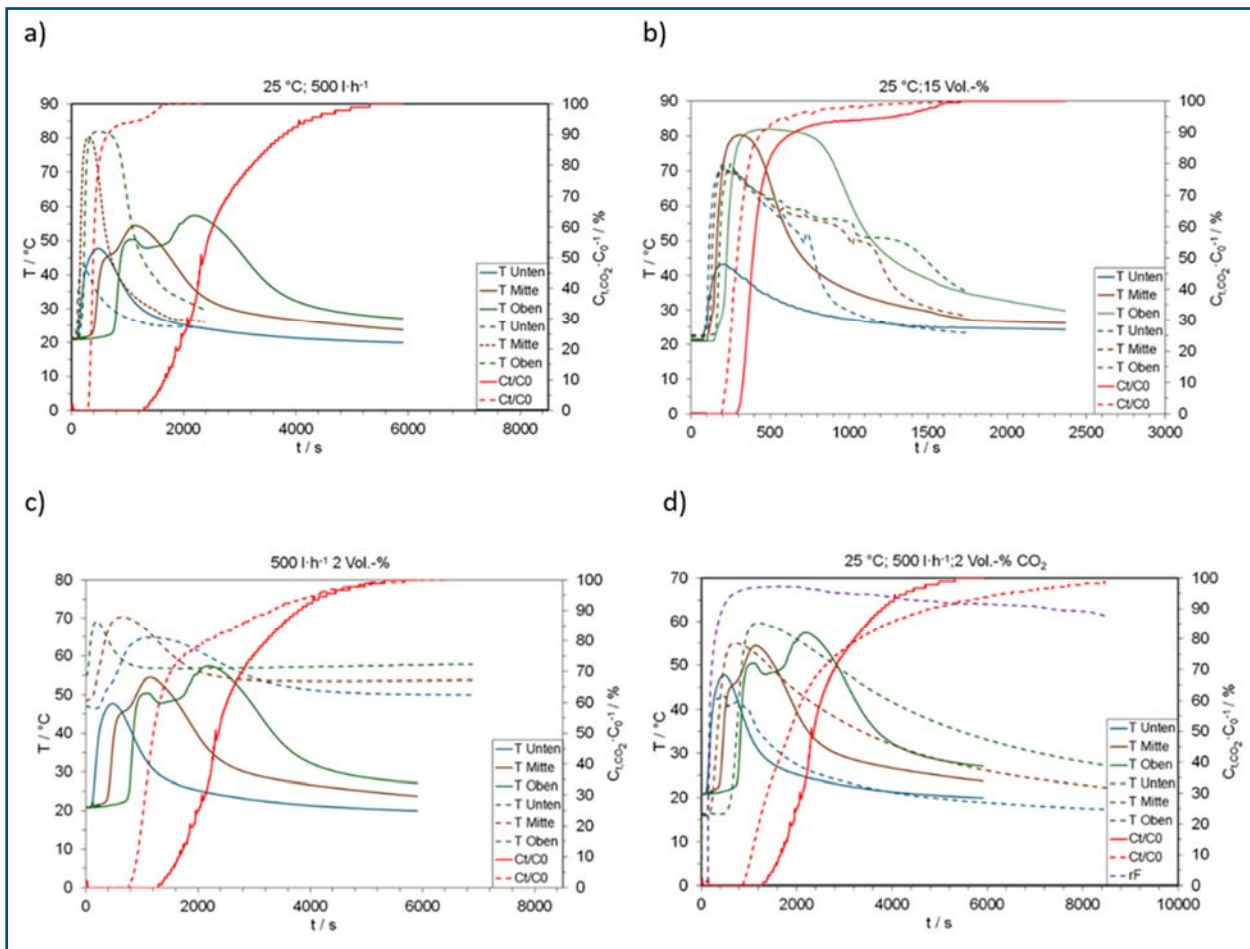


Abbildung 9: Einfluss ausgewählter Betriebsparameter auf das Adsorptionsverhalten im Festbett. Dargestellt sind Temperaturprofile und CO₂-Durchbruchskurven bei Variation folgender Betriebsparameter:

Teilabbildung	Parameter	Minimum	Maximum
(a)	CO ₂ -Konzentration	2 Vol.-%	15 Vol.-%
(b)	Volumenstrom	500 l/h	1000 l/h
(c)	Gaseintrittstemperatur	25 °C	50 °C
(d)	Gasfeuchtigkeit	0 % rF (trocken)	100 % rF (gesättigt)

Zur Bestimmung der Gleichgewichtsbeladung wird die Adsorbensprobe in der Kolonne so lange mit der vor-eingestellten Gasmischung durchströmt, bis die CO₂-Ausgangskonzentration der Eingangskonzentration entspricht, d. h., bis das Festbett vollständig gesättigt ist. Anschließend wird die befüllte Kolonne aus der Versuchsanordnung entnommen und gewogen; die Massenbilanz gegenüber dem Startgewicht ergibt die erzielte Gleichgewichtsbeladung. Eine rechnerische Plausibilitätsprüfung erfolgt durch Integration der Differenz zwischen Ein- und Ausgangskonzentration über die Messzeit unter Berücksichtigung des eingestellten Volumenstroms.

Abbildung 10 zeigt die gemessenen Adsorptionsisothermen der Festbettschüttung bei drei Temperaturstufen (25 °C, 40 °C, 50 °C) und zwei Volumenströmen (500 und 1.000 l/h). Die Isothermen beschreiben die Gleichgewichtsbeladung des Adsorbens in Abhängigkeit von der CO₂-Konzentration in der Gasphase bei konstanter Temperatur. Wie erwartet weist die niedrigste Temperaturstufe (25 °C) die höchste Beladung auf; mit steigender Temperatur sinkt diese – typisch für den exothermen Charakter der Aminadsorption. Der Einfluss des Gasdurchsatzes ist ebenfalls erkennbar: Bei höherem Volumenstrom (1.000 l/h) fällt die Beladung tendenziell geringer aus als bei 500 l/h, was auf eine unvollständige Gleichgewichtseinstellung infolge verkürzter Kontaktzeiten hindeutet.

Die durchgezogenen Linien in Abbildung 10 stellen Toth-Isothermen dar – ein etabliertes Modell zur Beschreibung von Gleichgewichtsadsorption auf heterogenen Oberflächen. Die Modellkurven bilden die gemessenen Beladungsverläufe in der Tendenz korrekt ab, verlaufen jedoch nicht exakt durch alle Messpunkte. Die verbleibenden Abweichungen sind auf Realeffekte im Festbett zurückzuführen, darunter nicht-isotherme Bedingungen, inhomogene Packungsstrukturen und Strähnenbildung.

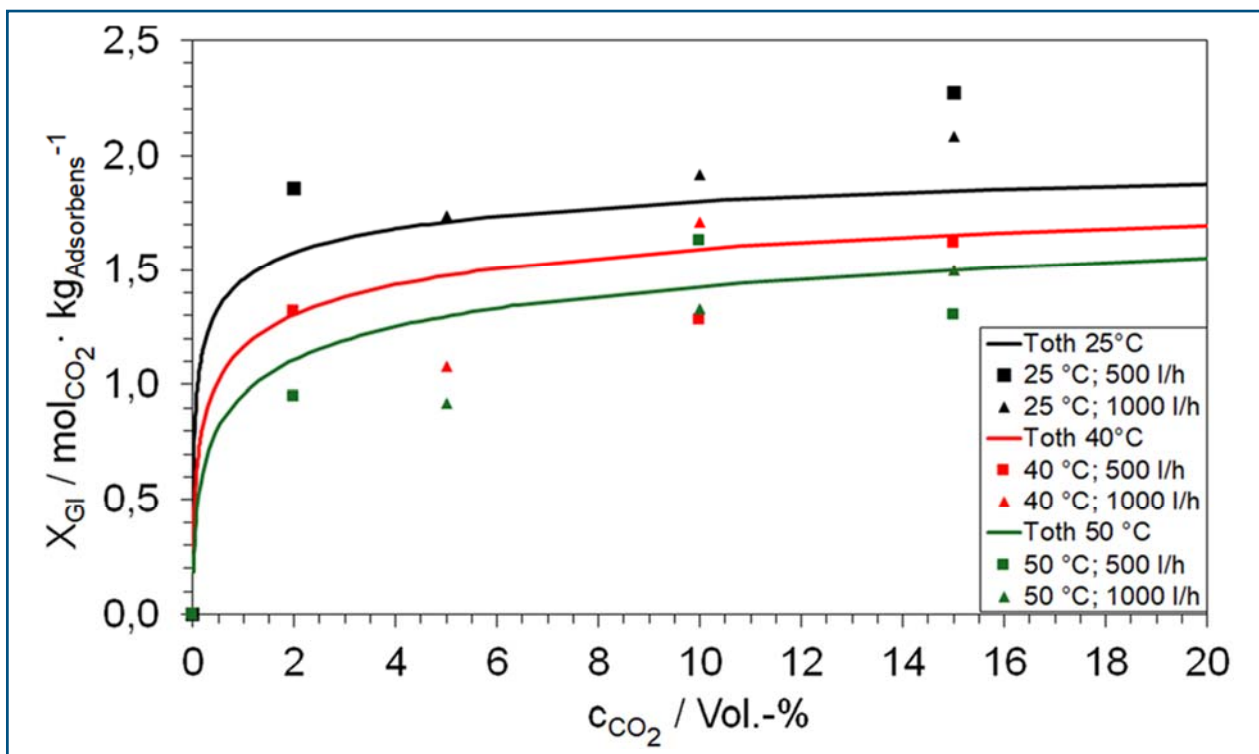


Abbildung 10: Adsorptionsisothermen der Festbettschüttung (Lewatit® VP OC 1065) bei 25, 40 und 50 °C sowie Volumenströmen von 500 und 1.000 l/h mit Toth-Modellkurven

Der Abgleich der aus den Isothermen abgeleiteten Gleichgewichtsbeladungen mit idealisierten TGA-Literaturwerten in Form von Parity Plots (siehe Abbildung 11) zeigte, dass die im Festbett gemessenen Beladungen systematisch unterhalb der in TGA-Versuchen bestimmten Maximalwerte lagen. Diese Minderleistung ist auf typische Skalierungseffekte zurückzuführen, die in reinen Laborversuchen nicht auftreten. Dazu gehören strömungsmechanische Inhomogenitäten wie Strähnenbildung und Randgängigkeit, prozesslimitierende Temperaturspitzen infolge unzureichender Wärmeabfuhr sowie materialspezifische Effekte wie Agglomeration nach wiederholter Dampfbeaufschlagung.

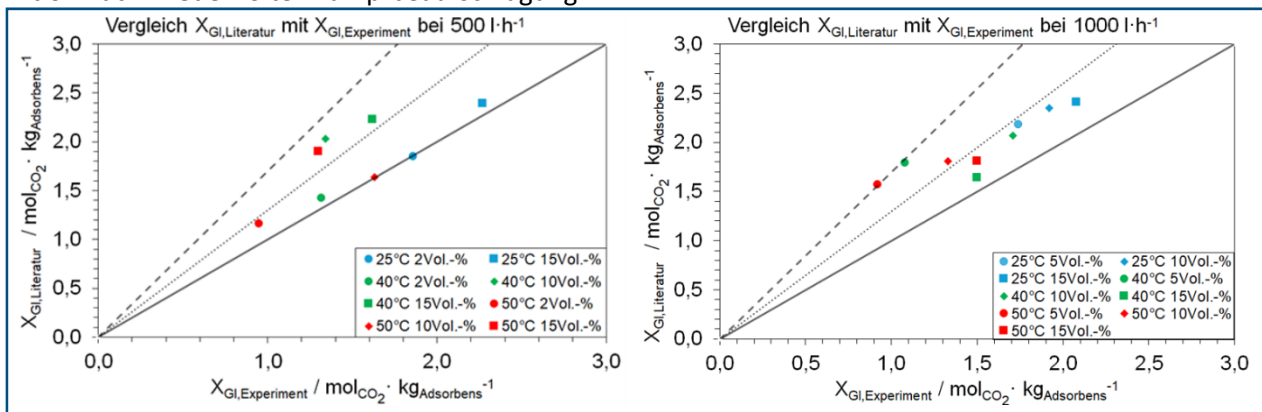


Abbildung 11: Parity Plot – Vergleich experimenteller Festbettbeladungen mit TGA-Literaturwerten (Lewatit® VP OC 1065)

Um dem identifizierten Hauptlimitierungsfaktor – der unzureichenden Abfuhr der Sorptionswärme – entgegenzuwirken, wurden abschließend Testreihen mit offenporigem Kupferschaum als wärmeleitfähigem Festbetteinbau durchgeführt. Der Kupferschaum bewirkte eine wesentlich homogenere Wärmeverteilung im Festbett. Die Temperaturspitzen in der Massentransferzone flachten sich deutlich ab, und der CO₂-Durchbruch wurde erheblich verzögert (vgl. Ausführungen in Kapitel 1.2 und Abbildung 3). Infolgedessen konnte das Adsorbensvolumen vor Kapazitätserschöpfung signifikant besser ausgenutzt werden.

Zusammenfassend wurde in Arbeitspaket 4 eine belastbare experimentelle Datenbasis für verschiedene Industrieszenarien erarbeitet. Die detaillierte Quantifizierung der Realeffekte und die Erkenntnis, dass das thermische Management des Festbetts absolut kritisch für hohe und reproduzierbare Beladungen ist, bilden die fundierte Grundlage für die Auslegung der zyklischen Langzeittests in AP 7 sowie die abschließende Wirtschaftlichkeitsbetrachtung in AP 8.

1.5 Arbeitspaket 5: Desorptionsuntersuchungen am Versuchsstand

- Durchgeführte Arbeiten
 - o Systematischer Vergleich verschiedener CO₂-Regenerierungsverfahren (TSA, TVSA, TVCSA, sTSA, sTVCSA und sTVSA),
 - o Variation von Desorptionsparametern (Temperatur, Systemdruck, Dampf- und Strippgasdurchsatz, Desorptionszeit) zur Identifikation optimaler Regenerationsbedingungen,
 - o Axial aufgelöste Erfassung der Temperaturverteilung im Festbett über drei Messpositionen sowie Online-Messung der CO₂-Konzentration im Reaktorabgas,
 - o Bewertung der CO₂-Rückgewinnung und der Regenerationsdynamik für jedes Verfahren,
 - o Bewertung des Einflusses wärmeleitfähiger Einbauten auf Wärmeeintrag, Temperaturhomogenität und Desorptionsgeschwindigkeit,

- o Mechanistische Interpretation des CO₂-Freisetzungsverhaltens unter Berücksichtigung unterschiedlicher Bindungsformen (physikalisch adsorbiertes CO₂, Carbamat, Bicarbonat),
- o Untersuchung eines alternativen Regenerationskonzepts mit heißem CO₂-Produktgas zur Erzeugung von hochreinem CO₂ ohne Fremdstoffe,
- o Untersuchung der chemischen Stabilität des aminfunktionalisierten Sorbens unter Desorptionsbedingungen und Bewertung von Degradationsmechanismen,
- o Erarbeitung einer belastbaren experimentellen Datenbasis für die Auslegung der zyklischen Langzeittests (AP 7) und die Wirtschaftlichkeitsbetrachtung (AP 8).

■ Erzielte Ergebnisse

Im Anschluss an die Untersuchung des Adsorptionsverhaltens in Arbeitspaket 4 stand in Arbeitspaket 5 die systematische Bewertung verschiedener Strategien zur Regeneration des beladenen Adsorbens im Mittelpunkt. Ziel war es, datenbasiert zu entscheiden, welches Regenerationsverfahren für das eingesetzte Ionentauscherharz Lewatit® VP OC 1065 den günstigsten Kompromiss aus CO₂-Rückgewinnung, Zykluszeit und Energieeintrag bietet und welche materialtechnischen Grenzen dabei beachtet werden müssen.

Verfahren	Temperatur [°C]	Systemdruck [bar(a)]	Dampf- / N ₂ -Durchsatz [g·h ⁻¹] / [l·h ⁻¹]
TSA	120 / 130	0,95	-
TVSA	120	0,3	-
TVCSA	120	0,3 / 0,6 / 0,9	N ₂ : 250 / 500 / 1000
sTVCSA	120 / 130	0,4 / 0,9	H ₂ O: 400 / N ₂ : 200
sTSA	120 / 130	0,95	H ₂ O: 300 / 650 / 1000
sTVSA	120 / 130	0,95	H ₂ O: 300 / 650 / 1000

Abbildung 12: Übersicht der am Versuchsstand untersuchten CO₂-Regenerierungsverfahren mit den jeweils variierten Betriebsparametern (Temperatur, Systemdruck, Dampf-/N₂-Durchsatz)

Zur Beantwortung dieser Fragestellungen wurde am Versuchsstand die gesamte verfahrenstechnische Bandbreite etablierter Regenerationsstrategien umgesetzt. Neben der rein thermischen Desorption (TSA) wurden dampfunterstützte (sTSA), vakuumunterstützte (TVSA) sowie kombinierte Verfahren mit Strippgas (TVCSA) bzw. Vakuum und Dampf (sTVSA) betrachtet. Die Wärme wurde dabei entweder indirekt über die Mantelheizung, direkt über das Trägergas oder kombiniert eingebracht. Variiert wurden insbesondere das Temperaturniveau der Heizphase, der Enddruck bei vakuumgestützter Regeneration, die eingesetzte Dampf- bzw. Strippgasmenge sowie die Dauer der Regenerationsphase. Abbildung 12 fasst die untersuchten Verfahrensvarianten und die zugehörigen Parametervariationen zusammen.

Rein thermische Regeneration (TSA)

Die Untersuchungen begannen mit der Bewertung der reinen TSA-Desorption als Referenzverfahren. Hierzu wurde das CO₂-beladene Festbett über einen Zeitraum von 24 Stunden ausschließlich über die Mantelheizung bei einer Solltemperatur von 120 °C und einem Betriebsdruck von 0,95 bar(a) regeneriert. Die realisierte Betttemperatur erreichte dabei maximal etwa 100 °C (siehe Abbildung 13).

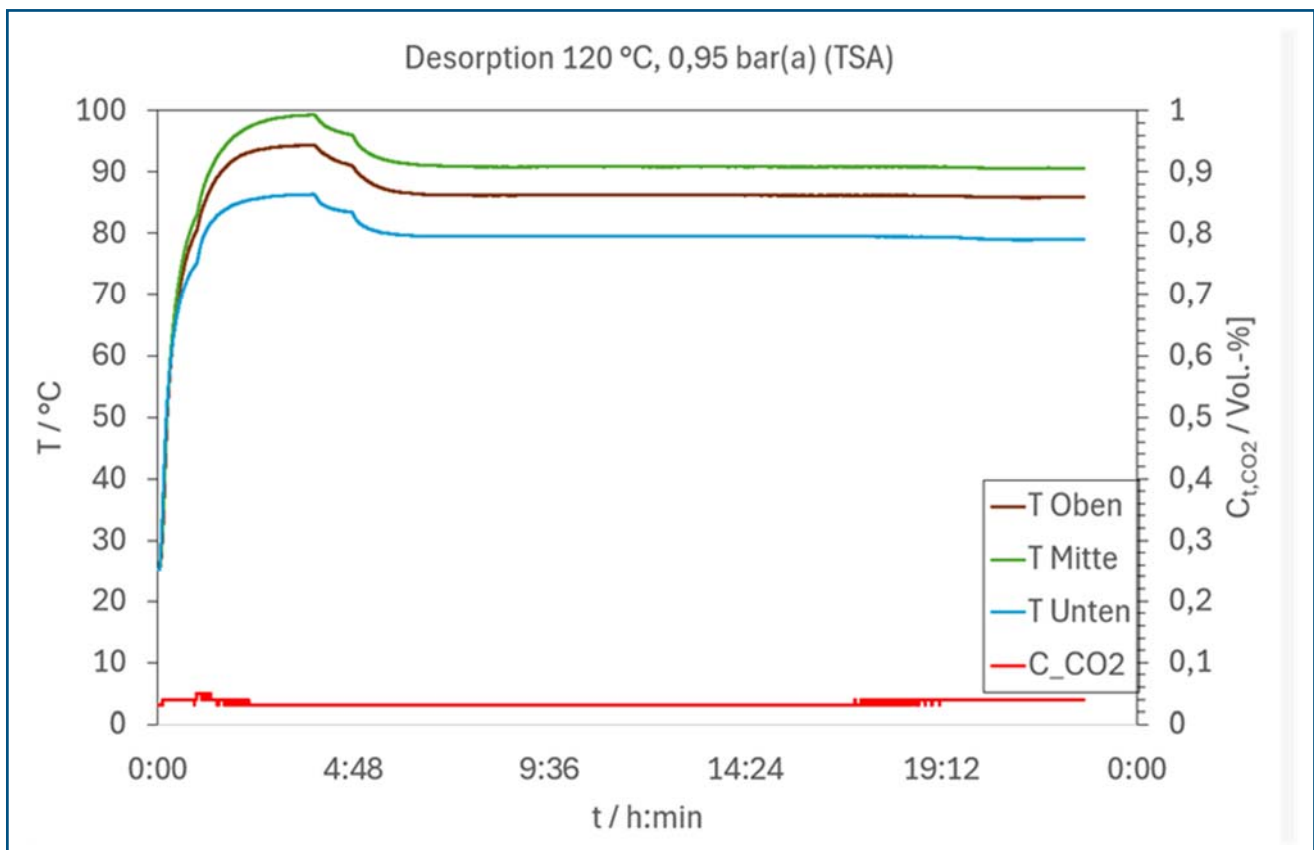


Abbildung 13: TSA-Desorption bei max. 100 °C Betttemperatur (Mantelheizung 120 °C, Systemdruck 0,95 bar(a)).

Trotz dieser ausreichend erscheinenden Erwärmung blieb die CO₂-Freisetzung nahezu vernachlässigbar. Über den gesamten Versuchszeitraum lag die am Gasauslass detektierte CO₂-Konzentration unter 0,01 Vol.-%. Die gravimetrische Auswertung ergab, dass lediglich 1,62 g der ursprünglich 16,75 g adsorbierten CO₂-Masse desorbiert wurden, was einem Desorptionsgrad von nur 9,7 % entspricht. Dieses Ergebnis zeigt, dass eine reine Temperaturerhöhung über die Mantelheizung für die Regeneration des Lewatit® VP OC 1065 ungeeignet ist. Hauptursache ist das Fehlen einer Konvektionstriebkraft (kein Spülgas, nur geringer Unterdruck), die das desorbierte CO₂ kontinuierlich aus dem Bett abführt. Ohne diesen Abtransport baut sich ein lokales CO₂-Gleichgewicht auf, das die Desorption unabhängig von der Temperaturhöhe hemmt.

Vakuumgestützte Regeneration (TVSA)

Wird die nach der TSA-Phase nur unvollständig regenerierte Probe unmittelbar im Anschluss einem Unterdruck von 0,3 bar(a) ausgesetzt, ändert sich das Bild grundlegend. Direkt nach Absenkung des Drucks wird am Gasauslass ein ausgeprägter CO₂-Peak detektiert, der anschließend über etwa zwei Stunden exponentiell abfällt. Das Temperaturprofil im Bett zeigt initial einen leichten Rückgang, der sich mit der einsetzenden Verdampfungskühlung und der endothermen Desorptionsreaktion erklären lässt; insbesondere im oberen Bettbereich steigt die Temperatur anschließend langsam wieder an (siehe Abbildung 14). Bilanzell konnten über die gesamte Regenerationsphase etwa 97 % der ursprünglich aufgenommenen CO₂-Menge (16,75 g) freigesetzt werden. Die Kombination aus Temperaturerhöhung und Druckabsenkung ist somit grundsätzlich in der Lage, das Adsorbens nahezu vollständig zu regenerieren. Als wesentlicher Nachteil erweist sich jedoch die vergleichsweise langsame Kinetik, die durch den bei reduziertem Druck eingeschränkten Wärme- und Stofftransport bedingt ist und zu langen Zykluszeiten führt.

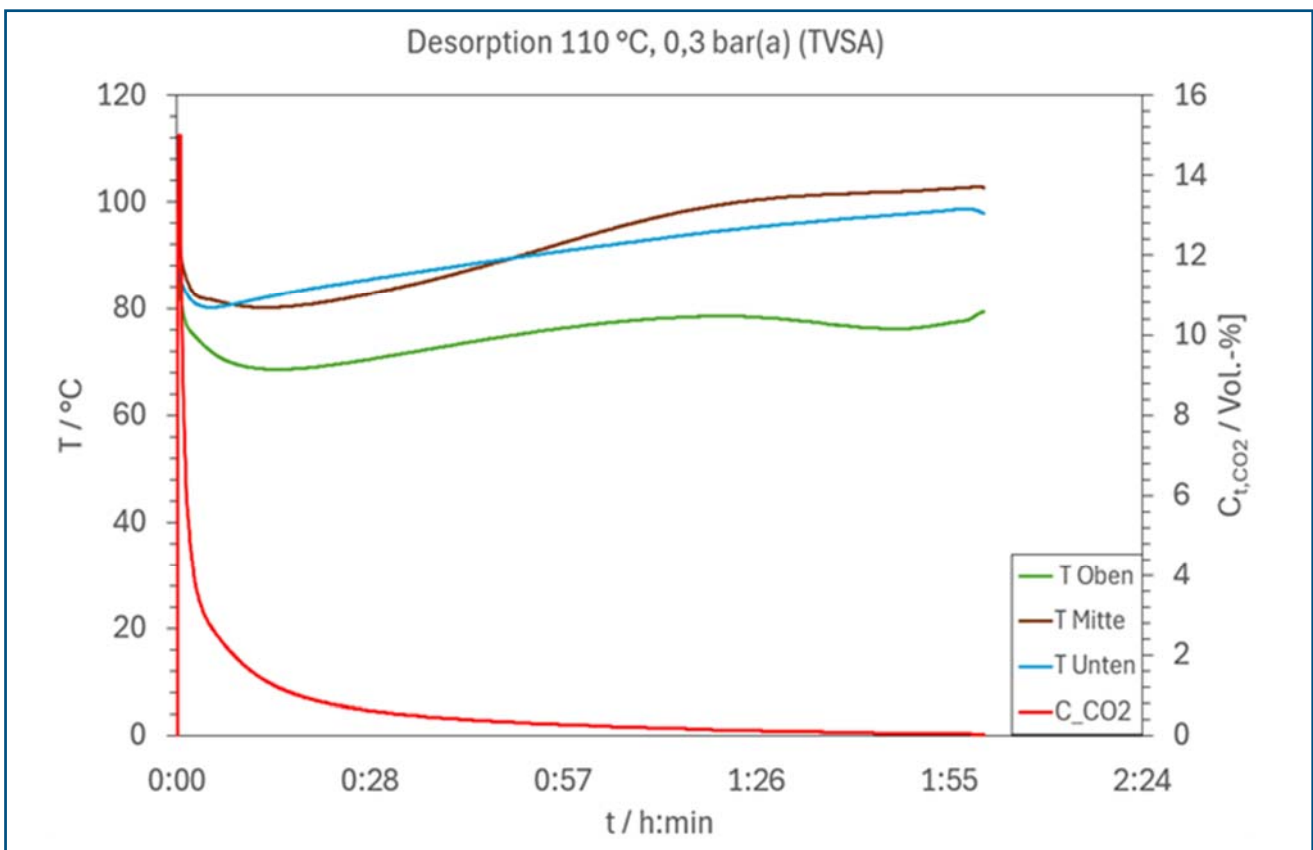


Abbildung 14: TVSA-Desorption nach vorangegangener TSA-Phase (Betriebsdruck 0,3 bar(a), Starttemperatur ~100 °C).

Dampfunterstützte Verfahren (sTSA und sTVSA)

Deutlich günstigere Ergebnisse hinsichtlich Geschwindigkeit und Vollständigkeit der Regeneration wurden durch den direkten Einsatz von Wasserdampf erzielt. In Analogie zur Analyse des Adsorptionsverhaltens in AP 4 erfolgte auch bei der Desorption eine gezielte Betrachtung der Einflussgrößen anhand ihrer Extremwerte. Durch die isolierte Variation einzelner Parameter konnten deren jeweilige Auswirkungen auf das Desorptionsverhalten systematisch untersucht und bewertet werden. Für die dampfunterstützten Verfahren zeigt Abbildung 15 exemplarisch die Variation der Dampfmenge (300 und 1000 g/h) sowie der Verdampfungstemperatur (120 und 130 °C) jeweils sowohl im sTSA-Verfahren (bei 0,95 bar(a)) als auch im sTVSA-Verfahren (bei 0,3 bar(a)).

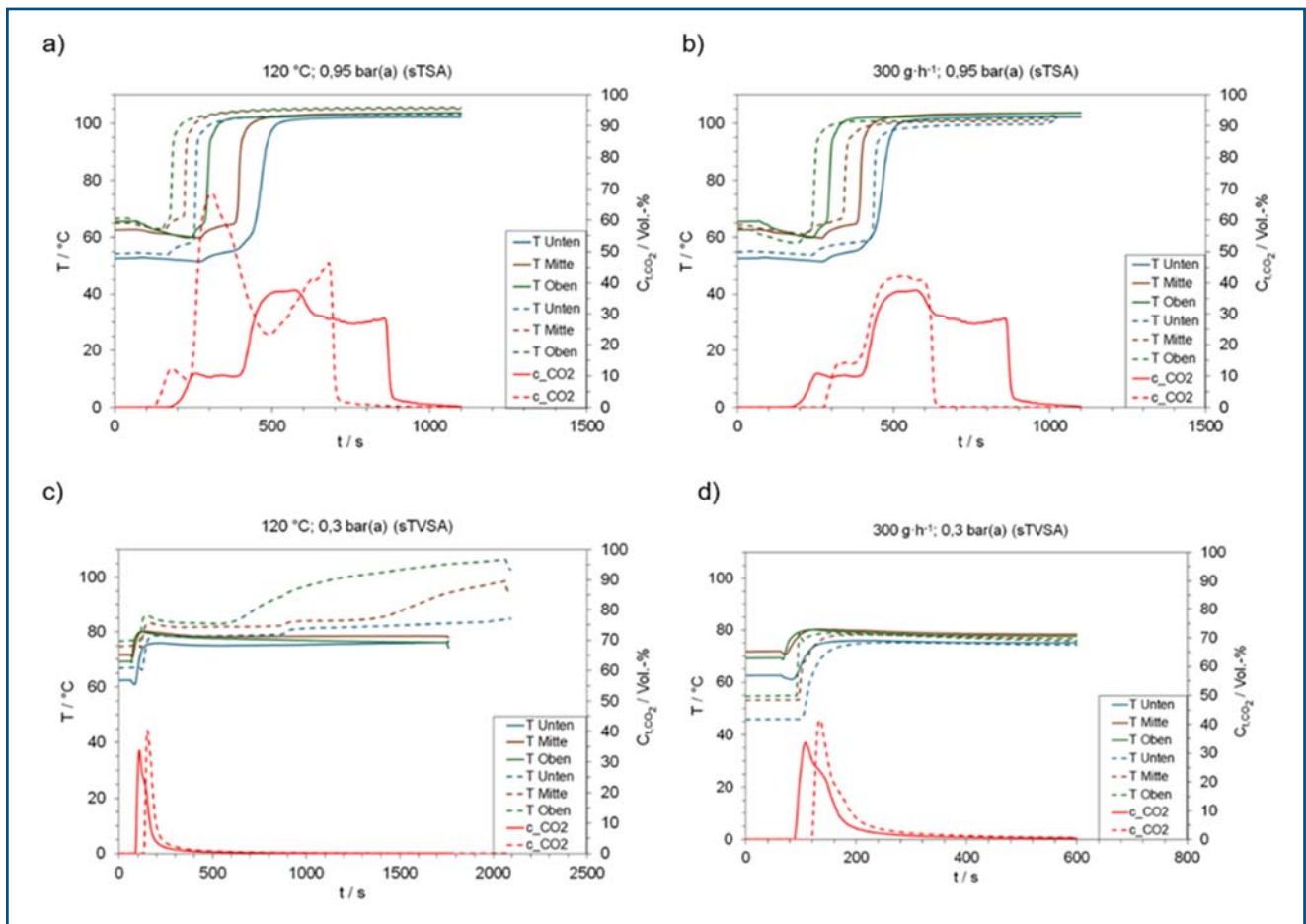


Abbildung 15: Einfluss ausgewählter Betriebsparameter auf das Desorptionsverhalten im Festbett. Dargestellt sind Temperaturprofile und die am Gasauslass detektierten CO₂-Konzentrationsverläufe bei Variation folgender Betriebsparameter:

Teilabbildung	Parameter	Minimum	Maximum
(a)	Dampfmenge (sTSA)	300 g/h	1000 g/h
(b)	Verdampfungstemperatur (sTSA)	120 °C	130 °C
(c)	Dampfmenge (sTVSA)	300 g/h	1000 g/h
(d)	Verdampfungstemperatur (sTVSA)	120 °C	130 °C

Hinweis: Die durchgezogenen Linien in den Diagrammen kennzeichnen die jeweils minimalen Einstellungen, die gestrichelten Linien die maximalen Einstellungen der Parameter.

Bei einer Dampfmenge von 1 000 g/h wird das Festbett in allen drei Messebenen schnell und weitgehend homogen auf Zieltemperatur gebracht. Die CO₂-Konzentration im Abgas steigt frühzeitig auf einen ausgeprägten Peak von nahezu 90 Vol.-% und fällt nach vollständiger Desorption rasch wieder ab. Bei der geringeren Dampfmenge von 300 g/h erwärmt sich insbesondere der untere Bettbereich deutlich verzögert, die Spitzenkonzentration fällt niedriger aus und der CO₂-Austrag verteilt sich über eine deutlich breitere Zeitspanne. Die höhere Dampfmenge bewirkt somit zweierlei: Einerseits wird über die Kondensationsenthalpie des Dampfs mehr Energie direkt an das Adsorbenskorn übertragen, andererseits verdrängt der Dampf das gebundene CO₂ wirksamer von den aktiven Sorptionszentren (Steam-Stripping-Effekt).

Bemerkenswert war die wellenartige Form der CO₂-Freisetzung, die insbesondere bei den sTSA-Verfahren beobachtet wurde. Dieses Verhalten ist auf eine Überlagerung mehrerer physikalisch-chemischer Effekte zurückzuführen. Zum einen bewirkt die ungleichmäßige Erwärmung des Betts bei geringem Dampfangebot eine räumlich gestaffelte Freisetzung entlang der Kolonnenhöhe. Zum anderen liegt das CO₂ bei Lewatit® VP OC

1065 in unterschiedlichen Bindungsformen vor. Neben physikalisch adsorbiertem CO₂, das bereits bei geringer Erwärmung freigesetzt wird, existieren chemisch gebundene Formen als Carbamat (unter trockenen Bedingungen über eine 2:1-Stöchiometrie gebildet) und als Bicarbonat (unter feuchten Bedingungen in 1:1-Stöchiometrie). Da diese Bindungsformen unterschiedliche Dissoziationstemperaturen aufweisen, erfolgt die Desorption in mehreren Phasen, was die wellenförmigen Konzentrationsverläufe erklärt. Zusätzlich kann bei schlechter Wärmeverteilung Dampfkondensat in kühlen Bettbereichen entstehen, das vorübergehend Poren blockiert und später durch erneute Verdampfung schubweise CO₂ freisetzt.

Eine weitere Steigerung der Desorptionsleistung wird durch die Kombination von Dampfeintrag und Vakuum im sTVSA-Verfahren erzielt (siehe Abbildung 15 (c) und (d)). Bei einer Verdampfungstemperatur von 120 °C und einem Systemdruck von 0,3 bar(a) vergrößert die zusätzliche Absenkung des CO₂-Partialdrucks die treibende Kraft der Desorption, was in kürzeren Regenerationsphasen und einem früher einsetzenden, ausgeprägten CO₂-Peak resultiert. Aufgrund der materialtechnischen Einschränkungen des Adsorbens wurde die Verdampfungstemperatur lediglich zwischen 120 und 130 °C variiert. Im Rahmen dieses engen Temperaturfensters zeigte sich erwartungsgemäß nur ein untergeordneter Einfluss der Dampftemperatur; wesentlich stärker wirken sich Systemdruck und Dampfmenge aus. Insgesamt erwies sich das sTVSA-Verfahren mit einer Dampfmenge von 1 000 g/h, einer Verdampfungstemperatur von 130 °C und abgesenktem Systemdruck (siehe Abbildung 15 (d)) als besonders leistungsfähig. Hier gelingt eine nahezu vollständige Regeneration des Adsorbens bei gleichzeitig kurzen Zykluszeiten.

Einfluss wärmeleitfähiger Einbauten

Ergänzend zu den verfahrenstechnischen Varianten, wurde der in Arbeitspaket 2 eingeführte Ansatz einer verbesserten Wärmeeinbringung über offenporige Kupferstrukturen auch bei den Desorptionsversuchen untersucht. Wie die bereits in Abbildung 4 dargestellten TVCSA-Ergebnisse zeigen, führt der Einsatz wärmeleitfähiger Einbauten zu einem früher einsetzenden Temperaturanstieg, zu einer homogenen axialen Temperaturverteilung und damit zu einer schnelleren und gleichmäßigeren CO₂-Freisetzung. Die Kombination aus dampfunterstützter Regeneration und wärmeleitfähigen Einbauten stellt damit die hinsichtlich Zykluszeit und Energieeffizienz günstigste Betriebsweise dar.

Alternatives Regenerationskonzept: Desorption mit heißem CO₂

Abschließend wurde mit der Regeneration des Sorbens mittels heißen CO₂-Produktgases ein verfahrenstechnisch besonders interessanter Ansatz untersucht. Die zugrundeliegende Idee besteht darin, vollständig auf Fremdstoffe wie Stickstoff oder Wasserdampf zu verzichten und stattdessen das zuvor abgetrennte CO₂ in erhitzter Form als Regenerationsmedium einzusetzen. Bei erfolgreicher Umsetzung ließe sich hierdurch ein hochreiner CO₂-Produktstrom erzeugen, der aufwendige Nachtrennstufen insbesondere zur Wasserabscheidung überflüssig macht.

Dieser Vorteil wird jedoch durch eine ungünstige Thermodynamik erkauft. Bei reiner CO₂-Atmosphäre ist der CO₂-Partialdruck am Sorbens maximal, sodass die Gleichgewichtsbeladung nur über eine entsprechende Temperaturerhöhung abgesenkt werden kann. In der Literatur (Alessi et al.) werden zur Nutzung der resultierenden Arbeitskapazität Temperaturen bis in den Bereich von 200 °C diskutiert. Neuere Untersuchungen zum Ionentauscherharz Lewatit® VP OC 1065 haben aber gezeigt, dass dieses Temperaturniveau zu einer irreversiblen Schädigung des Adsorbens führt. Bereits ab etwa 120 °C setzt in trockener CO₂-Atmosphäre die

sogenannte Urea-Formation ein. Hierbei reagieren benachbarte Amin-Gruppen irreversibel zu Harnstoffbrücken und stehen für eine weitere CO₂-Aufnahme nicht mehr zur Verfügung, was die zyklische Stabilität des Adsorbens dauerhaft schädigen würde.

Um die thermodynamische Triebkraft dennoch zu erhöhen, ohne die kritische Materialgrenze zu überschreiten, wurde der CO₂-Partialdruck verfahrensseitig abgesenkt. Hierzu wurden sowohl der Volumenstrom des heißen Spülgases (250 l/h und 500 l/h) als auch der Systemdruck (nahezu Umgebungsdruck bzw. 0,4 bar(a)) variiert.

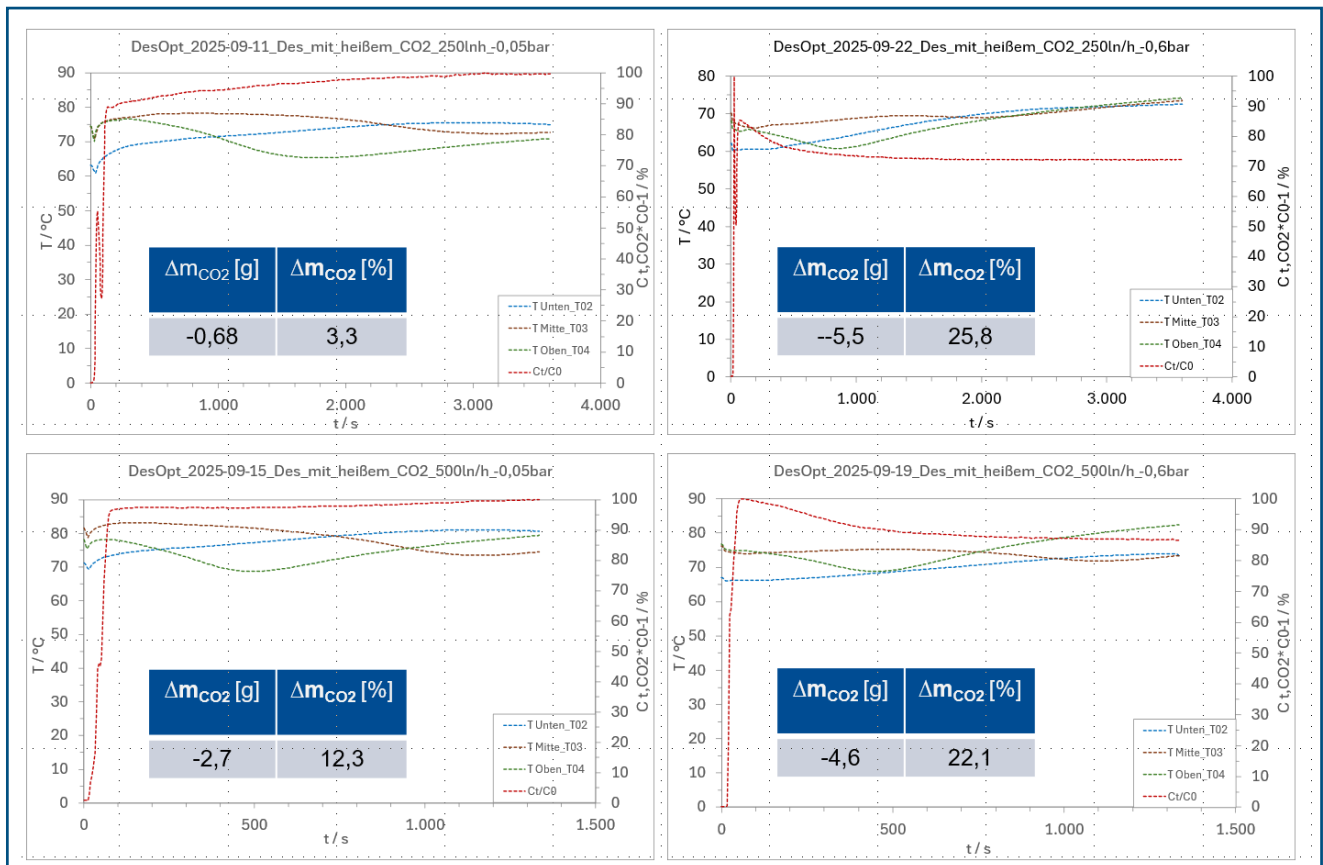


Abbildung 16: Desorption mit heißem CO₂-Produktgas bei 120 °C – Einfluss von Spülgasvolumenstrom (250 und 500 l/h) sowie Systemdruck (nahezu Umgebungsdruck bzw. 0,4 bar(a)) auf den erzielbaren Desorptionsgrad

Die in Abbildung 16 dargestellten Versuchsergebnisse zeigen, dass die Desorption mit heißem CO₂-Produktgas unter den durch das Adsorbens vorgegebenen Temperaturgrenzen nur eingeschränkt funktioniert. Bei nahezu Umgebungsdruck werden unabhängig vom eingestellten Spülgasvolumenstrom lediglich Desorptionsgrade zwischen etwa 3 und 12 % erreicht – ein verfahrenstechnisch nicht nutzbarer Bereich. Erst die Kombination mit einem Unterdruck von 0,4 bar(a) hebt die Desorptionsleistung signifikant auf Werte zwischen ca. 22 und 26 % an. Der Vergleich der vier Versuchspunkte verdeutlicht zudem, dass der Systemdruck den dominierenden Stellhebel darstellt, während der Spülgasvolumenstrom im untersuchten Bereich nur einen untergeordneten Einfluss auf den Desorptionsgrad besitzt.

Auch unter Vakuumunterstützung bleibt die erreichbare Regeneration deutlich hinter den mit den dampfunterstützten Verfahren (sTSA, sTVSA) erzielten Desorptionsgraden von nahezu 100 % zurück. Eine weitere Steigerung der Desorptionsleistung über eine Erhöhung der Desorptionstemperatur scheidet aufgrund der ab 120 °C einsetzenden Urea-Formation und der damit verbundenen irreversiblen Schädigung des Adsorbens aus. Vor diesem Hintergrund wurde das Konzept einer Regeneration mit heißem CO₂-Produktgas im Rahmen

dieses Vorhabens nicht weiterverfolgt. Der grundsätzliche verfahrenstechnische Vorteil – die Erzeugung eines hochreinen CO₂-Produktstroms ohne Fremdstoffe – bleibt jedoch attraktiv und könnte in zukünftigen Arbeiten mit thermisch stabileren Sorbensmaterialien, deren Anwendungsbereich nicht durch die Urea-Bildung limitiert wird, erneut aufgegriffen werden.

Gesamtbewertung

Die Untersuchungen in Arbeitspaket 5 belegen, dass das thermische Management der Regeneration den zentralen Stellhebel für einen effizienten zyklischen Betrieb darstellt. Eine rein thermische Regeneration über die Mantelheizung (TSA) ist für aminfunktionalisierte Adsorbentien der betrachteten Klasse ungeeignet, da die geringe Wärmeleitfähigkeit der Schüttung im zulässigen Temperaturbereich keine nennenswerte CO₂-Freisetzung ermöglicht. Auch die rein dampfunterstützte Variante bei Adsorptionsdruckniveau (sTSA) zeigte unter den hohen Systemdrücken ein unstetiges, durch unregelmäßige CO₂-Impulse gekennzeichnetes Freisetzungsverhalten, das auf eine unvollständige bzw. verzögerte Desorption bei zu geringen Triebkräften hindeutet.

Die besten Ergebnisse hinsichtlich CO₂-Rückgewinnung bei moderatem Energieeinsatz wurden mit der Steam-assisted Temperature Vacuum Swing Adsorption (sTVSA) erzielt. Bei einer Verdampfungstemperatur von 130 °C, einer Dampfmenge von 1 000 g/h und einem abgesenkten Systemdruck konnte eine nahezu vollständige Regeneration des Adsorbens bei kurzen Zykluszeiten erreicht werden. Entscheidend hierfür ist die hohe Kondensationsenthalpie des Wasserdampfs, die eine schnelle und gleichmäßige Erwärmung des Festbetts und damit eine signifikant verbesserte CO₂-Freisetzung bewirkt. Auch das TVCSA-Verfahren, das Temperaturwechsel, Druckabsenkung sowie Trägergas- bzw. Konzentrationswechsel kombiniert, erwies sich gegenüber den reinen TSA- und TVSA-Verfahren als überlegen und ermöglichte einen reduzierten Energieverbrauch bei gleichzeitig schnelleren Zykluszeiten. Eine zusätzliche signifikante Steigerung der Effizienz wurde durch den Einsatz wärmeleitfähiger Einbauten im Festbett erreicht. Offenporige Kupferstrukturen und Metallschäume bewirkten einen früher einsetzenden und schnelleren Temperaturanstieg, eine deutlich homogenere axiale Temperaturverteilung sowie höhere lokale Desorptionstemperaturen und damit eine entsprechend beschleunigte CO₂-Freisetzung. Die Kombination aus dampfunterstützter Regeneration und wärmeleitfähigen Einbauten stellt somit die hinsichtlich Zykluszeit und Energieeffizienz günstigste Betriebsweise dar.

Demgegenüber wird die alternative Regeneration mit heißem CO₂-Produktgas durch die thermische Stabilitätsgrenze des Sorbens (Urea-Formation ab ca. 120 °C) limitiert. Selbst unter Vakuumunterstützung konnten lediglich Desorptionsgrade zwischen 22 und 26 % erreicht werden, sodass dieser Ansatz unter den zulässigen Betriebsbedingungen keine wirtschaftlich tragfähige Freisetzungsleistung erzielt. Der grundsätzliche verfahrenstechnische Vorteil einer Erzeugung eines hochreinen CO₂-Produktstroms ohne Fremdstoffe bleibt jedoch attraktiv und könnte mit thermisch stabileren Sorbensmaterialien in zukünftigen Arbeiten erneut aufgegriffen werden. Die in Arbeitspaket 5 erarbeitete Datenbasis bildet die Grundlage sowohl für die numerische Prozesssimulation in Arbeitspaket 6 als auch für die Langzeitevaluierung und die Wirtschaftlichkeitsbetrachtung in den Arbeitspaketen 7 und 8.

1.6 Arbeitspaket 6: Simulation des Adsorptions- und Desorptionsprozesses im Festbett

- Durchgeführte Arbeiten
 - Aufbau eines eindimensionalen, isothermen Festbett-Adsorbermodells in Aspen Adsorption® mit Hinterlegung der Reaktor-, Adsorbens- und Stoffdaten,
 - Formulierung der Massen- und Energiebilanzen für Gas- und Feststoffphase nach dem Linear-Driving-Force-Ansatz (LDF) sowie Diskretisierung der Schüttung in äquidistante Kontrollvolumina,
 - Anpassung der Toth-Isotherme an die in AP 4 ermittelten Gleichgewichtsdaten mittels nichtlinearer Regression,
 - Bestimmung des effektiven Stoffdurchgangskoeffizienten k_{eff} : Erstabschätzung über eine Sherwood-Korrelation und anschließende iterative Anpassung an die experimentellen Durchbruchkurven aus AP 4,
 - Modellvalidierung durch vergleichende Simulation und Gegenüberstellung mit den Experimenten unter Variation von CO_2 -Konzentration, Volumenstrom und Gaseintrittstemperatur,
 - Identifikation der Modellgrenzen (axiale Dispersion, Porendiffusion, Wärmefreisetzung, Strömungsinhomogenitäten) und Ableitung des Erweiterungsbedarfs,
 - Begründung der Beschränkung auf den Adsorptionsteil und Übergabe des Modellgerüsts an das Folgevorhaben DAC-MetFoam.
- Erzielte Ergebnisse

Das im Antrag formulierte Ziel von Arbeitspaket 6 bestand darin, sowohl die Adsorptions- als auch die Desorptionsphase des Prozesses auf Basis eines vorhandenen Simulationswerkzeugs abzubilden, das Modell mit den experimentellen Ergebnissen aus AP 4 und AP 5 abzugleichen und daraus Skalierungsregeln für unterschiedliche Prozessgasströme und CO_2 -Konzentrationen abzuleiten. Im tatsächlichen Projektverlauf konnte aufgrund der unten ausführlich begründeten Komplexitäten ausschließlich der Adsorptionsteil belastbar simuliert und mit den experimentellen Daten verglichen werden. Der Desorptionsteil wurde modelltechnisch vorbereitet, jedoch nicht final umgesetzt; seine Implementierung soll im IGF-Folgevorhaben „DAC-MetFoam“ erfolgen.

Modellaufbau und Annahmen

Als Simulationsplattform wurde die Flowsheet-Software Aspen Adsorption® eingesetzt, in der ein eindimensionales Festbettmodell als Ausgangspunkt diente. Zur numerischen Lösung der Erhaltungsgleichungen wurde die Schüttung entlang der Reaktorhöhe in äquidistante Kontrollvolumina diskretisiert, in denen die Bilanzgleichungen für die Gas- und die Feststoffphase ortsdiskret und zeitkontinuierlich formuliert sind (siehe Abbildung 17). Die Unterteilung der Festbettschüttung in einzelne Bilanzräume ermöglicht es, räumliche und zeitliche Ableitungen durch eine geeignete Diskretisierungsmethode zu approximieren.

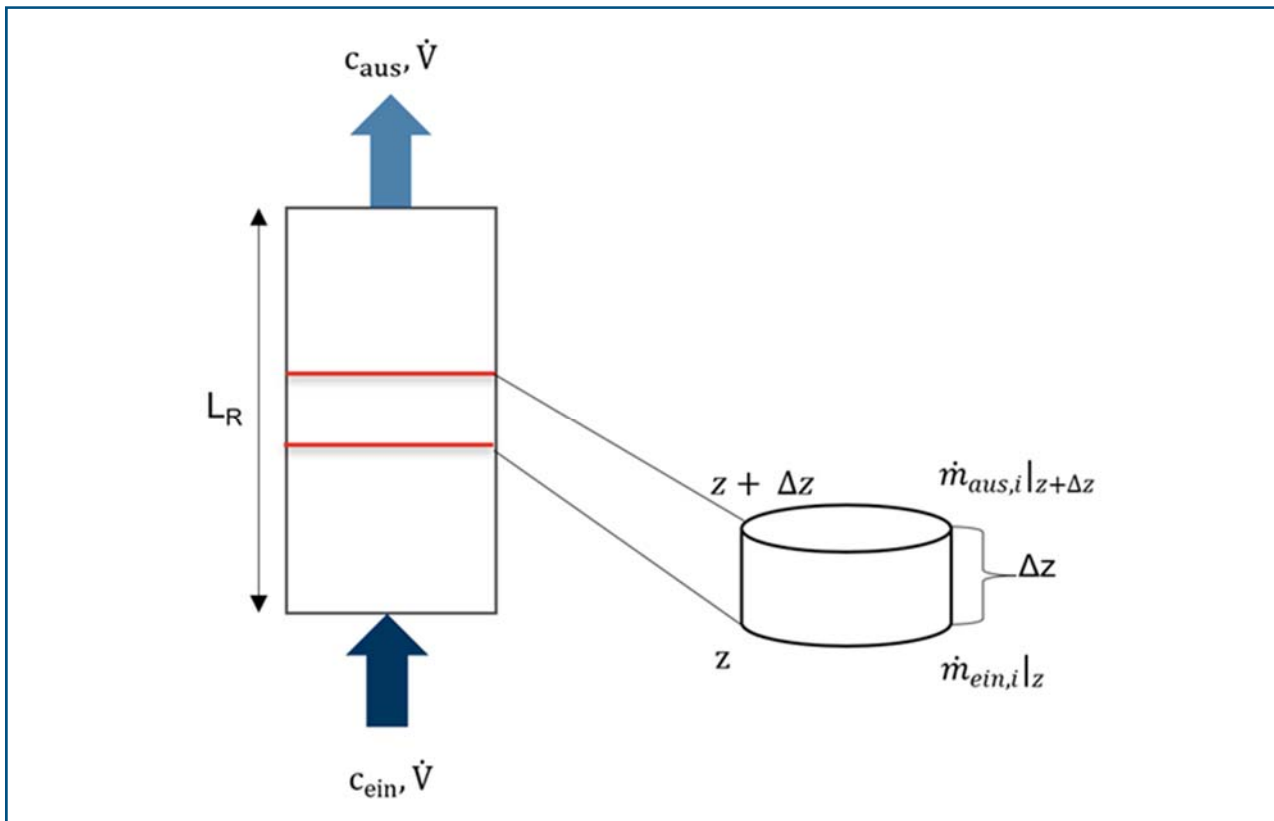


Abbildung 17: Bilanzraum für die Modellierung des Adsorptionsprozesses

Das in Aspen Adsorption umgesetzte Flowsheet besteht aus einer Feed-Quelle (Gas-Mischung aus N_2 und CO_2), dem eindimensionalen Festbettadsorber als zentralem Block sowie einer Abgas-Senke, an der die zeitabhängige CO_2 -Konzentration als Durchbruchskurve abgegriffen wird (siehe Abbildung 18(b)). Das Modell bildet damit die in AP 3 aufgebaute Reaktorgeometrie (Höhe $H_b = 0,313$ m, Durchmesser $D_b = 0,0497$ m, siehe Abbildung 18(a)) und die Schüttungseigenschaften des eingesetzten Lewatit® VP OC 1065 (Schüttdichte $\rho_{Bulk} = 630$ kg/m³, Lückenvolumen $\epsilon_i = 0,6$, Partikelhohlraum $\epsilon_p = 0,23$, Partikelradius $R_p = 3,44 \cdot 10^{-4}$ m) maßstäblich ab.

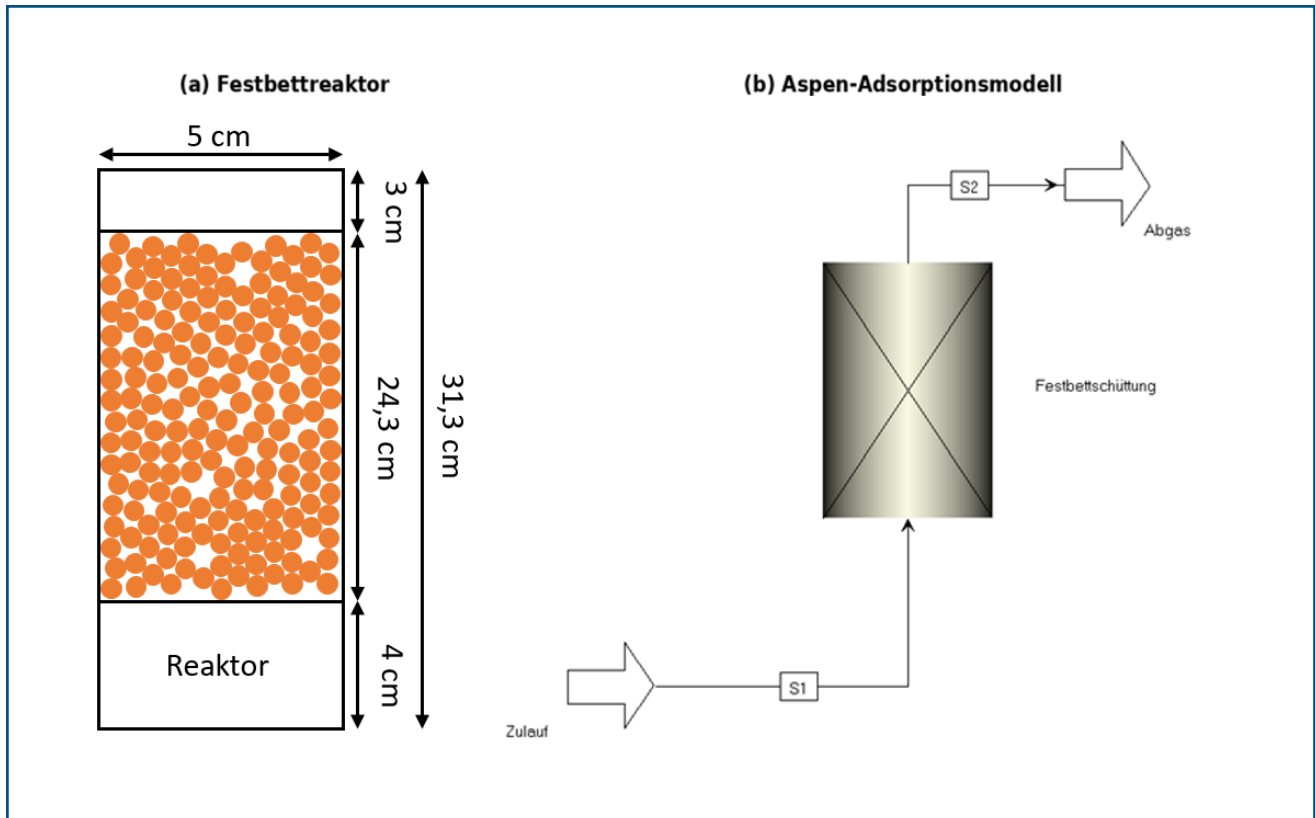


Abbildung 18: (a) Schematische Darstellung des verwendeten Festbettreaktors mit Lewatit® VP OC 1065-Schüttung (Höhe der Schüttung 24,3 cm, Durchmesser 5 cm, Gesamthöhe 31,3 cm); (b) zugehöriges vereinfachtes, eindimensionales Aspen-Adsorptionsmodell mit Zulauf, Festbettschüttung und Abgas [1]

Adsorptionsgleichgewicht – Toth-Isotherme

Das Adsorptionsgleichgewicht wurde über die Toth-Isothermengleichung beschrieben, die sich in der Literatur zur Beschreibung der CO₂-Adsorption auf Lewatit etabliert hat und sowohl bei niedrigen als auch bei hohen Partialdrücken realistische Beladungen liefert. In Aspen Adsorption ist die Toth-Isotherme in einer parametrisierten Form mit den softwareinternen Parametern IP1, IP2 und IP3 hinterlegt; diese Parameter sind formal von der klassischen Literatur-Darstellung abweichend, beschreiben aber inhaltlich denselben Zusammenhang.

Der Modellierung liegen folgende Annahmen zugrunde: idealisierte Pfropfenströmung im Festbett, nicht-adsorbierendes Trägergas (N₂), kugelförmige Adsorbenspartikel, vernachlässigbare radiale Gradienten in Temperatur und Konzentration, konstante Stoffdaten der fluiden und der festen Phase sowie eine inkompressible Gasphase. Sämtliche Stofftransport- und Reaktionsvorgänge an der Partikeloberfläche werden über einen Linear-Driving-Force-Ansatz (LDF) zu einem effektiven Stoffdurchgangskoeffizienten k_{eff} zusammengefasst, wobei die Differenz der aktuellen Beladung zur Gleichgewichtsbeladung ($X_{Gl} - X$) als treibende Kraft für die zeitlich abhängige Beladung ($\frac{\partial X}{\partial t}$) dient. [2], [3], [4], [5]

Die Massenbilanz der Gasphase berücksichtigt konvektiven und axial-dispersiven Transport sowie den Phasenübergang an die Feststoffoberfläche. Die Bilanz der Feststoffphase enthält ausschließlich den Massenaustauschterm zwischen Gas und Adsorbens. Eine vollständige Energiebilanz wurde formal für Gas- und Feststoffphase formuliert, im Rahmen dieses Vorhabens jedoch zu Null gesetzt. Es wurde bewusst eine isotherme Modellierungsstrategie gewählt, um die Gleichgewichtsbeschreibung und die Stofftransportkinetik zunächst unabhängig von den thermischen Effekten validieren zu können, bevor in Folgeprojekten die

exotherme Wärmefreisetzung der Adsorption sowie die thermische Triebkraft der Desorption gekoppelt einbezogen werden.

Die Modellparameter der klassischen Toth-Form (q_{s0} , b_0 , ΔH , t_0 , α , χ) wurden mittels nichtlinearer Regression nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate an die in AP 4 experimentell ermittelten Gleichgewichtsbeladungen angepasst. Als Startwerte dienten Literaturparameter (Driessen et al. [6]), die anschließend manuell variiert und visuell sowie rechnerisch validiert wurden. Die ermittelten Parameter wurden für die in der Simulation verwendeten Temperaturen 25 °C und 50 °C in die softwareinternen Aspen-Parameter IP1–IP3 überführt und sind gemeinsam mit den weiteren Eingabegrößen der Festbettschüttung – Reaktor-geometrie, Adsorbenseigenschaften und den iterativ angepassten Massentransferkoeffizienten – in Tabelle 1 zusammengefasst. Die zentralen Modelldefinitionen des Aspen-Blocks „Festbettschüttung“ einschließlich der gewählten Diskretisierungsmethode, des Filmmodells und der getroffenen Bilanzannahmen sind ergänzend in Tabelle 2 dokumentiert.

Tabelle 1: Spezifikationen der Festbettschüttung in Aspen Adsorption (Geometrie, Adsorbenseigenschaften, Massentransferkoeffizienten und Aspen-Isothermenparameter (nach [1]))

Parameter	Einheit	Wert	Beschreibung
H_b	m	0,313	Höhe des Adsorbers
D_b	m	0,0497	Durchmesser des Adsorbers
ρ_{Bulk}	$kg \cdot m^{-3}$	630	Schüttdichte
ϵ_i	$m^3 \cdot m^{-3}$	0,6	Lückenvolumen der Schüttung
ϵ_p	$m^3 \cdot m^{-3}$	0,23	Hohlraumvolumen der Partikel
R_p	m	$3,44 \cdot 10^{-4}$	Partikelradius
MTC (25 °C, 500 l/h, 2 Vol.-% CO ₂)	s^{-1}	$1,0 \cdot 10^{-3}$	Massentransferkoeffizient (iterativ angepasst)
MTC (25 °C, 500 l/h, 15 Vol.-% CO ₂)	s^{-1}	$6,716 \cdot 10^{-3}$	Massentransferkoeffizient (iterativ angepasst)
MTC (25 °C, 1 000 l/h, 15 Vol.-% CO ₂)	s^{-1}	$6,717 \cdot 10^{-3}$	Massentransferkoeffizient (iterativ angepasst)
IP _{1, CO₂} , 25 °C	–	272,6	Aspen-Isothermenparameter 1, 25 °C
IP _{2, CO₂} , 25 °C	–	0,28	Aspen-Isothermenparameter 2, 25 °C
IP _{3, CO₂} , 25 °C	–	118 523,7	Aspen-Isothermenparameter 3, 25 °C
IP _{1, CO₂} , 50 °C	–	16,43	Aspen-Isothermenparameter 1, 50 °C
IP _{2, CO₂} , 50 °C	–	0,29	Aspen-Isothermenparameter 2, 50 °C
IP _{3, CO₂} , 50 °C	–	7 143,70	Aspen-Isothermenparameter 3, 50 °C

Tabelle 2: Modelldefinitionen des Aspen-Blocks „Festbettschüttung“ – zentrale Annahmen zur numerischen Lösung sowie zur Stoff-, Impuls- und Energiebilanz ((nach [1]))

Bereich	Modelldefinition	Spezifikation/Auswahl
Allgemein	Diskretisierungsmethode	UDS1
	Anzahl Knotenpunkte (axial)	60
Massen-/Impulsbilanz	Annahme zur Massenbilanz	Reine Konvektion
	Annahme zur Impulsbilanz	Konstanter Druck und Geschwindigkeit
Stofftransportkinetik	Annahme zum Filmmodell	Fest
	Kinetik-Modell	Effektiver Widerstand (Lumped Resistance)
	Form des effektiven Widerstands	Linear (LDF)
	Form des MTC	Konstant
Adsorptionsgleichgewicht	Isothermenmodell	Toth
	Abhängigkeit der Isotherme	Partialdruck
Energiebilanz	Annahme	Isotherm
Reaktion	Vorhandene Reaktionen	Keine

Die mit diesem Parameterset berechneten Isothermen geben den qualitativen Verlauf der gemessenen Gleichgewichtsbeladungen über der CO₂-Konzentration korrekt wieder: Mit steigendem CO₂-Partialdruck nimmt die Beladung zu, mit steigender Temperatur ab (siehe auch Abbildung 10 in AP4).

Stofftransportkinetik – Sherwood-Korrelation

Der effektive Stoffdurchgangskoeffizient k_{eff} wurde über die Sherwood-Korrelation $Sh = 2 + 1,1 \cdot Sc^{(1/3)} \cdot Re^{(0,6)}$ abgeschätzt, die in der Literatur bereits erfolgreich für DAC-Anwendungen mit aminfunktionalisierten Sorbentien eingesetzt wurde.[7] Die Schmidt- und Reynolds-Zahlen (Sc und Re) wurden auf Basis der Reaktorgeometrie (Querschnittsfläche $A = 1,94 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$, gemittelter Partikeldurchmesser $d_P = 6,88 \cdot 10^{-4} \text{ m}$), der Leerrohrgeschwindigkeit ($v_s = 0,072 \text{ m/s}$ bei 500 l/h bzw. 0,143 m/s bei 1.000 l/h), der temperaturabhängigen kinematischen Viskositäten von CO₂ und N₂ sowie des nach Fuller, Schettler und Giddings [8] berechneten binären Diffusionskoeffizienten D_m bestimmt.[9]

Da die berechneten k_{eff} -Werte ein erstes physikalisches Niveau definieren, anschließend jedoch von den realen Stofftransportbedingungen im Technikumsmaßstab beeinflusst werden, wurden die Massentransferkoeffizienten in Aspen Adsorption für die einzelnen Betriebspunkte iterativ angepasst, bis die Form der simulierten Durchbruchskurve mit den experimentellen Verläufen aus AP 4 die bestmögliche Übereinstimmung zeigte. Die finalen Werte liegen je nach Betriebspunkt zwischen $1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ (25 °C, 500 l/h, 2 Vol.-% CO₂) und $6,72 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ (25 °C, 500 bzw. 1.000 l/h, 15 Vol.-% CO₂). Für den Betriebspunkt bei 50 °C, 500 l/h und 15 Vol.-% CO₂ konnte der bei 25 °C, 500 l/h und 15 Vol.-% CO₂ ermittelte MTC unverändert übernommen werden, da er auch dort eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment ergab. Diese Beobachtung bestätigt, dass die Sherwood-Korrelation den Massentransfer in der untersuchten Konfiguration mit ausreichender Genauigkeit beschreibt. Vorbereitend zur Anpassung wurde eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt, in der die

Toth-Isothermenparameter und der Massentransferkoeffizient k_{eff} systematisch variiert und mit dem Experiment verglichen wurden (siehe Abbildung 19). Während die Variation der Isothermenparameter primär die Lage der Durchbruchfront verschiebt, beeinflusst k_{eff} vorrangig die Steilheit des Konzentrationsanstiegs.

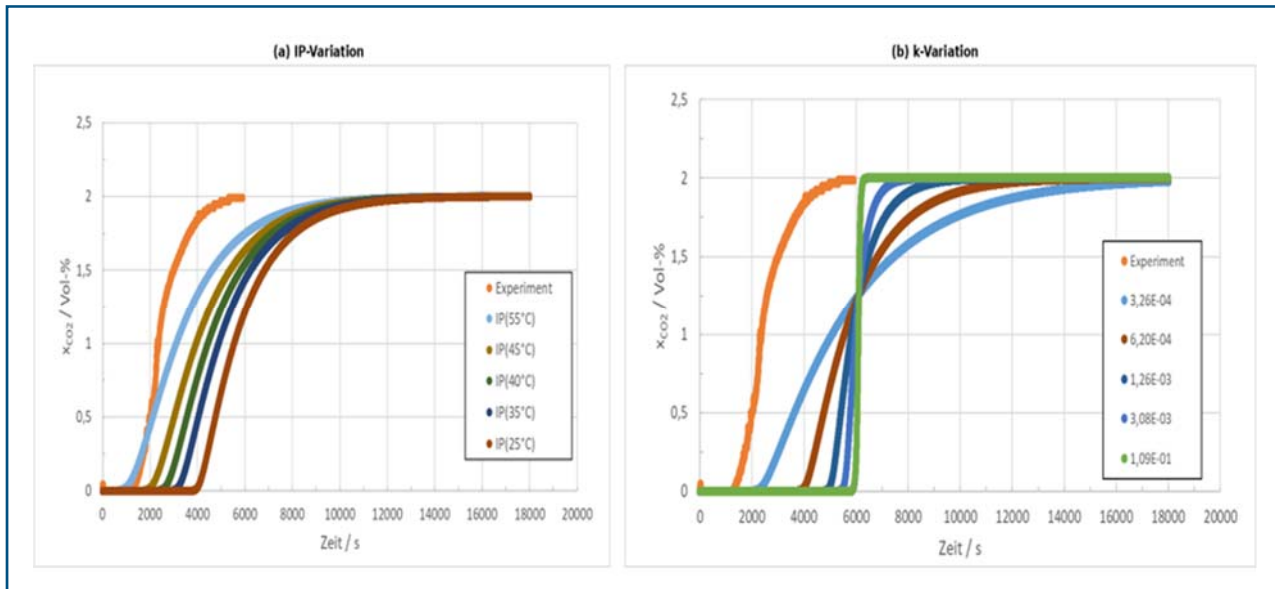


Abbildung 19: Sensitivität der simulierten Durchbruchskurve gegenüber (a) den Toth-Isothermenparametern (IP-Variation für 25–55 °C) und (b) dem Massentransferkoeffizienten k (Variation $3,26 \cdot 10^{-4}$ bis $1,09 \cdot 10^{-1} \text{ s}^{-1}$) im Vergleich zum Experiment; Versuchsbedingungen: 500 l/h, 2 Vol.-% CO₂, 25 °C, trocken, Lewatit® VP OC 1065

Vergleich von Simulation und Experiment

Mit dem so parametrisierten Modell wurden die Durchbruchkurven für die wesentlichen Variationen aus AP 4 simuliert und den experimentellen Daten gegenübergestellt (siehe

Abbildung 20). Variiert wurden gezielt die CO₂-Konzentration (2 Vol.-% und 15 Vol.-%), der Volumenstrom (500 l/h und 1.000 l/h) sowie die Gaseintrittstemperatur (25 °C und 50 °C). Die Volllinien repräsentieren jeweils die niedrigere, die gestrichelten Linien die höhere Einstellung des variierten Parameters; rote Linien stehen für die Simulation, schwarze Linien für die experimentellen Verläufe.

Über alle drei Parametervariationen hinweg bildet das Modell die qualitativen Trends physikalisch korrekt ab. Eine Erhöhung der CO₂-Konzentration, des Volumenstroms oder der Gaseintrittstemperatur führt sowohl in der Simulation als auch im Experiment zu einem früheren Durchbruch und zu einer steileren Übergangsflanke. Auch die Steigungen im Übergangsbereich werden in allen Fällen gut wiedergegeben, was auf eine grundsätzlich korrekte Beschreibung der Toth-Isotherme und der Massentransferkinetik hinweist.

Im Detail zeigen sich allerdings systematische Unterschiede zwischen Modell und Experiment: Die simulierten Durchbruchkurven verlaufen idealisierter (glatter, gleichmäßiger Anstieg), und der Durchbruchzeitpunkt liegt – insbesondere bei niedriger CO₂-Konzentration (2 Vol.-%) – deutlich später als im Experiment. Bei 15 Vol.-% wird der steile Anstieg vom Modell sehr gut erfasst, bei 2 Vol.-% verläuft die simulierte Kurve dagegen flacher und mit einem deutlich verzögerten Durchbruch (~4.000 s gegenüber deutlich früheren experimentellen Werten). Bei der Variation des Volumenstroms bzw. der Gaseintrittstemperatur stimmen Simulation und Experiment in der Tendenz überein, das Modell bildet allerdings nicht die im Experiment beobachtete stärkere Krümmung kurz vor Erreichen des Gleichgewichtsbereichs, lokale Asymmetrien und Verzögerungseffekte ab.

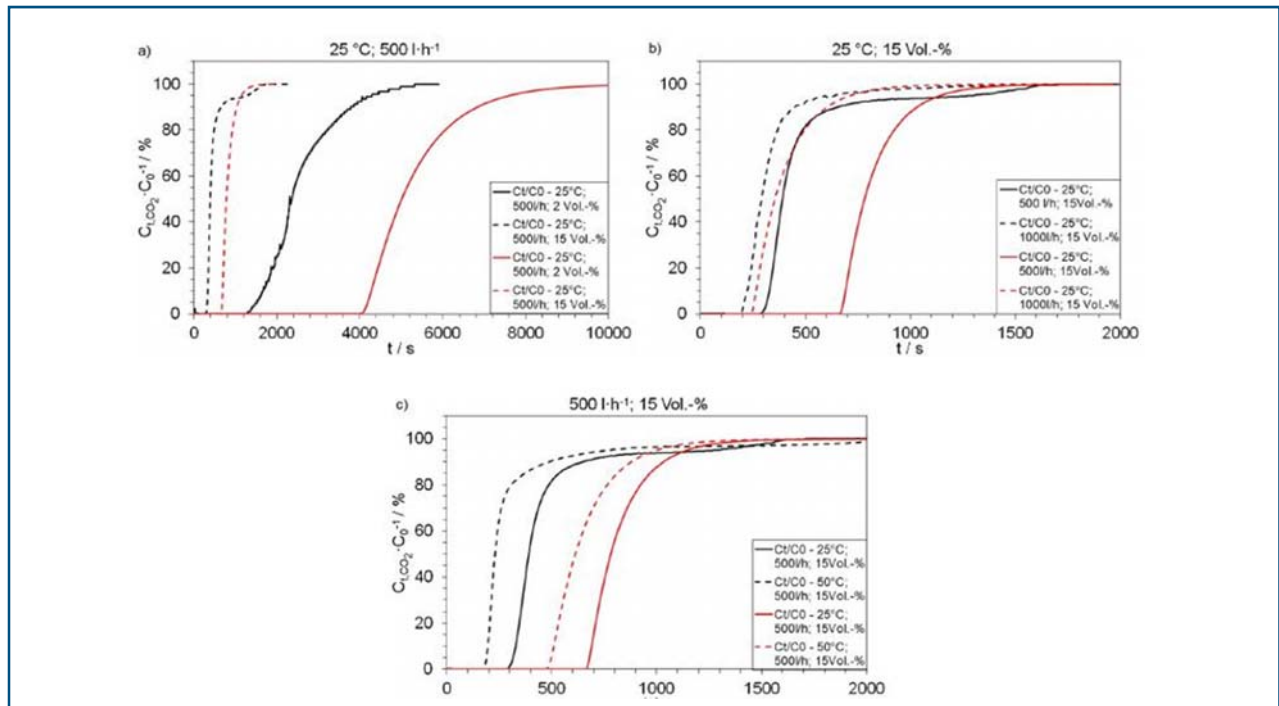


Abbildung 20: Vergleich experimenteller (schwarz) und simulierter (rot) CO_2 -Durchbruchkurven (nach Yildizli, 2025) – (a) bei 25 °C und 500 l/h für zwei CO_2 -Konzentrationen (2 Vol.-%, durchgezogen, und 15 Vol.-%, gestrichelt), (b) bei 25 °C und 15 Vol.-% CO_2 für zwei Volumenströme (500 l/h, durchgezogen, und 1.000 l/h, gestrichelt), (c) bei 500 l/h und 15 Vol.-% CO_2 für zwei Temperaturen (25 °C, durchgezogen, und 50 °C, gestrichelt)

Diese systematischen Abweichungen sind auf Realeffekte zurückzuführen, die bei isothermer Modellierung methodisch nicht erfasst werden können. Die in der Massentransferzone freigesetzte exotherme Adsorptionswärme und die daraus resultierenden lokalen Temperaturspitzen, die die Beladung temperaturabhängig reduzieren, axiale Dispersion und Verbreiterung der Konzentrationsfront, ungleichmäßige Strömungsverhältnisse mit Strähnenbildung und Randgängigkeit, schwankende Schüttdichte sowie Mikro- und Makroporendiffusion innerhalb der Adsorbenspellets. Hinzu kommen druckabhängige Verschiebungen der Adsorptionsaffinität durch Druckverluste in der Schüttung sowie nach Dampfregeneration auftretende Agglomerationseffekte.

Bewertung der isothermen Modellierungsstrategie

Trotz dieser Einschränkungen war die isotherme Modellierung ein notwendiger und sinnvoller erster Schritt. Sie reduziert die Modellkomplexität bewusst auf die Stoffmengenbilanz und das Adsorptionsgleichgewicht und vermeidet damit die Notwendigkeit, weitere unsichere Größen (Adsorptionseenthalpie, Wärmeübergangskoeffizienten, Wandwärmekapazitäten) abschätzen zu müssen. Sie ermöglicht eine gezielte Validierung der gefitteten Toth-Isotherme über einen weiten Betriebsbereich, eine zuverlässige Abschätzung der Massentransferkoeffizienten unter unterschiedlichen Betriebsbedingungen und ein numerisch deutlich stabileres und schneller konvergierendes Gleichungssystem als bei einer voll gekoppelten thermo-fluidodynamischen Simulation. Die isotherme Stufe stellt damit das tragfähige Fundament für eine spätere adiabate, energiebilanzierte Modellerweiterung dar.

Begründung der Beschränkung auf den Adsorptionsteil

Im Antragstext war neben der Adsorption auch die simulationsseitige Bearbeitung der Desorption sowie die Ableitung von Skalierungsregeln vorgesehen. Im Verlauf des Vorhabens stellte sich heraus, dass eine seriöse, mit den experimentellen Daten aus AP 5 abgleichbare Desorptionssimulation im Rahmen der bewilligten Projektlaufzeit nicht abschließbar war. Hierfür sind in mehreren Ebenen liegende, sachliche Gründe verantwortlich, die jeweils einen erheblichen zusätzlichen Modellierungs- und Validierungsaufwand bedingen:

Erstens unterscheidet sich die Desorption vom Adsorptionsteilschritt grundsätzlich darin, dass nicht eine Bilanzgröße (CO_2), sondern in den hier untersuchten effizientesten Verfahrensvarianten (sTSA, sTVSA) zwingend ein Mehrkomponentensystem aus CO_2 , Wasserdampf und Stickstoff abgebildet werden muss. Wasserdampf wirkt dabei nicht nur als Wärmeträger über seine hohe Kondensationsenthalpie, sondern auch chemisch als Verdrängungsadsorptiv mit eigener, sehr hoher Adsorptionsaffinität an Lewatit. Die im Adsorptionsteil bewährte Einkomponenten-Toth-Isotherme ist hierfür prinzipiell unzureichend; benötigt werden konkurrierende Mehrkomponenten-Isothermen sowie zusätzliche Stoffübergangsparameter für H_2O , deren experimentelle Bestimmung im Projekt nicht im erforderlichen Umfang möglich war.

Zweitens ist die Desorption unter den projektrelevanten Verfahren (TVSA, sTSA, sTVSA) ein gekoppelt thermisch-fluiddynamischer Vorgang, dessen physikalische Beschreibung ohne vollständige Energiebilanz nicht möglich ist. Im Gegensatz zur isotherm validierbaren Adsorption sind sowohl Triebkraft (Temperatur, Partialdruck) als auch limitierender Schritt (Wärmeeintrag in die Schüttung) hier ausschließlich thermisch bestimmt. Die in AP 5 experimentell quantifizierte zentrale Rolle wärmeleitender Einbauten und der Kondensationsenthalpie des Wasserdampfs lässt sich daher nur mit einer vollständig gekoppelten Massen-Wärme-Simulation einschließlich Wandkapazitäten, Wärmeübergangswiderständen und Phasenwechseln abbilden. Die zugehörigen Stoffdaten und Wärmeübergangskorrelationen für die im Projekt entwickelten Reaktorkonfigurationen mit Kupfervlies- bzw. Metallschaum-Einbauten waren erst zum Projektende experimentell verfügbar und konnten nicht mehr in vollem Umfang in das Modell überführt werden.

Drittens ist der Reaktionsmechanismus der Desorption an aminfunktionalisierten Sorbentien wesentlich komplexer als der der Adsorption. Wie in AP 5 mechanistisch diskutiert, müssen physikalisch adsorbiertes CO_2 , Carbamat (2:1-Stöchiometrie unter trockenen Bedingungen) und Bicarbonat (1:1-Stöchiometrie unter feuchten Bedingungen) als parallele Bindungsformen mit unterschiedlichen Bindungsenergien und Freisetzungstemperaturen unterschieden werden. Eine konsistente Implementierung dieser Mehrfach-Reaktionspfade in Aspen Adsorption erfordert eine eigenständige Reaktionskinetik, deren Parameter nur durch eine zusätzliche umfangreiche Versuchsreihe zur thermischen Stabilität und zum Reaktionsverhalten ermittelt werden können – einschließlich der ab ca. 120 °C einsetzenden Urea-Bildung, die als irreversible Materialgrenze in das Modell eingehen muss.

Viertens schränkten die in AP 3 bis AP 5 bereits dokumentierten unplanmäßigen Projektverzögerungen (Defekte am Dampferzeuger, Lieferengpässe bei Sensorik und Reaktoren, Austausch der Feuchtesensoren) die für die Desorptionssimulation erforderliche, sehr breite und qualitativ hochwertige experimentelle Datenbasis zeitlich erheblich ein. Die für die Validierung notwendigen mehrfach reproduzierten Desorptionssmessungen mit unterschiedlichen Dampfmengen, Drücken und Heizstrategien standen erst gegen Projektende in der erforderlichen Konsistenz zur Verfügung und konnten nicht mehr vollständig zur Modellanpassung herangezogen werden.

Aus diesen Gründen wurde – in Abstimmung mit den projektbegleitenden Diskussionen – entschieden, die simulationsseitigen Ressourcen des Vorhabens auf eine belastbare, valide Adsorptionssimulation zu konzentrieren. Diese liefert ein verifiziertes Fundament (Geometrie, Stoffsystem, Toth-Isotherme, MTC-Korrelation, numerisches Konvergenzverhalten), auf dem die Mehrkomponenten- und Energie-Erweiterungen für die Desorption in einem angemessenen, eigenständigen Folgevorhaben sachgerecht verfolgt werden können. Die im vorliegenden Vorhaben aufgebaute Modellstruktur, die identifizierten Skalierungseffekte aus AP 4 sowie die in AP 5 erarbeitete Datenbasis zu den Regenerationsverfahren sollen dort konsequent fortgeführt werden.

Zusammenfassende Bewertung

Mit Arbeitspaket 6 wurde ein eindimensionales, isothermes Aspen-Adsorption-Modell der Lewatit-Festbett-schüttung aufgesetzt, mit den experimentellen Gleichgewichts- und Durchbruchdaten aus AP 4 abgeglichen und über die wesentlichen Betriebsparameter (CO_2 -Konzentration, Volumenstrom, Temperatur) qualitativ validiert. Die Toth-Isotherme beschreibt das Adsorptionsgleichgewicht über den gesamten untersuchten Bereich konsistent, die Sherwood-Korrelation liefert physikalisch plausible Massentransferkoeffizienten. Die simulierten Durchbruchkurven geben die experimentell beobachteten Trends der Variation aller drei Schlüsselparameter korrekt wieder, weichen jedoch in Detailmerkmalen (Asymmetrie, Krümmung kurz vor dem Gleichgewicht, lokale Unregelmäßigkeiten) erwartungsgemäß ab. Die identifizierten Limitierungen (axiale Dispersion, Mikro-/Makroporendiffusion, isotherme Annahme) und die daraus abgeleiteten Erweiterungsschritte sind klar dokumentiert.

Die im Antrag vorgesehene simulationsseitige Bearbeitung des Desorptionsteils sowie die Ableitung verallgemeinerter Skalierungsregeln war im Rahmen des Vorhabens aufgrund der Mehrkomponenten- und Mehrphasen-Charakteristik der Desorption, der zwingend erforderlichen voll gekoppelten Energiebilanz, der parallelen Bindungsformen (Carbamat/Bicarbonat) und der projektbedingten Verzögerungen nicht abschließbar. Eine Fortführung soll im IGF-Folgevorhaben DAC-MetFoam auf der hier geschaffenen Modellgrundlage erfolgen. Die in AP 6 etablierte Adsorptionssimulation ist damit zugleich Ergebnis dieses Vorhabens und tragfähige Brücke zur vorgesehenen Vollmodellierung des PTSA-Verfahrens.

1.7 Arbeitspaket 7: Evaluation des neu entwickelten Verfahrens am Teststand

- Durchgeführte Arbeiten
 - o Inbetriebnahme der Versuchsanlage im quasi-kontinuierlichen Zyklusbetrieb mit alternierenden Adsorptions- und Regenerationsphasen,
 - o Ersatz der ursprünglich vorgesehenen BHKW-Teilstromentnahme durch Anbindung an einen Gas-Brennwertkessel (Buderus, ca. 9,3 Vol.-% CO_2),
 - o Übertragung der in AP 4 und AP 5 ermittelten optimierten Betriebsparameter auf den Realabgasbetrieb,
 - o Umsetzung einer hybriden Regenerationsstrategie aus 3 min Dampf-Desorption und 7 min Trocknung/Nachdesorption mit heißem Stickstoff (100 °C, 0,6 bar(a)),
 - o Durchführung mehrerer aufeinanderfolgender Ad-/Desorptionszyklen zur Identifikation des Cyclic Steady State,
 - o Online-Erfassung der CO_2 -Konzentration und axial aufgelöste Messung der Festbett-Temperaturen während aller Zyklusphasen,

- o Gravimetrische Massenbilanzierung der CO₂-Aufnahme und -Freisetzung je Zyklus,
 - o Mechanistische Interpretation des Zyklenverhaltens unter Berücksichtigung von Restbeladung, Restfeuchte und Bindungsstöchiometrie (Carbamat/Bicarbonat),
 - o Langzeitbeobachtung der Gleichgewichtsbeladung zweier Lewatit-Chargen zur Bewertung der Adsorbens-Stabilität.
- Erzielte Ergebnisse

In Arbeitspaket 7 wurde das auf den Erkenntnissen der vorangegangenen Arbeitspakete basierende, optimierte PTSA-Verfahren an der vollständig instrumentierten Versuchsanlage des IUTA-Technikums unter praxisnahen Bedingungen erprobt. Ziel war es, die zuvor in isolierten Halbzyklen charakterisierten Verfahrensbausteine — dampfunterstützte Regeneration bei abgesenktem Systemdruck, anschließende Trocknung mit heißem Stickstoff und nachfolgende Adsorption aus einem realen Rauchgasstrom — erstmals in einem zeitlich synchronisierten, alternierenden Zyklusbetrieb zusammenzuführen und auf zyklische Stabilität, reproduzierbare Arbeitskapazität sowie ihre Eignung für die in Arbeitspaket 8 angestrebte Wirtschaftlichkeitsbeurteilung zu prüfen.

Versuchsaufbau und Randbedingungen

Im Antrag war als Realabgasquelle die Teilstromentnahme aus dem Abgasstrang eines im IUTA-Technikum betriebenen BHKW-Moduls vorgesehen. Im Berichtszeitraum war dieses BHKW jedoch über mehrere Monate hinweg betriebsbedingt außer Betrieb genommen, sodass eine kontinuierliche, planungssichere Abgasversorgung über die Projektlaufzeit nicht gewährleistet werden konnte. Als zeitnah verfügbare und im Hinblick auf die Gaszusammensetzung repräsentative Ersatzquelle wurde stattdessen ein institutseigener Gas-Brennwertkessel (Buderus) angebunden, dessen Rauchgas einen CO₂-Gehalt von etwa 9,3 Vol.-% bei prozesstypischer Restfeuchte aufweist. Die Konzentration liegt damit im für BHKW-Module und vergleichbare Verbrennungsanlagen charakteristischen Bereich und deckt zugleich den in Arbeitspaket 4 ausführlich untersuchten Konzentrationsbereich zwischen 2 und 15 Vol.-% CO₂ ab.

Der Betrieb erfolgte als quasi-kontinuierlicher Zyklusbetrieb. Die ursprünglich vorgesehene vollautomatisierte Prozessführung über die in Arbeitspaket 3 implementierte LabVIEW-Bedienoberfläche wurde dahingehend modifiziert, dass das Umschalten zwischen den Phasen (Adsorption, Dampf-Desorption, Trocknung) manuell durch Ventilstellung erfolgte und der Adsorber zwischen den Phasen zur gravimetrischen Wägung kurzzeitig ausgebaut wurde. Damit konnte für jeden einzelnen Zyklus eine präzise Massenbilanz erstellt werden, ohne dass zusätzliche Online-Massenmessverfahren erforderlich waren. Die thermischen Anfangsbedingungen jedes Folgezyklus entsprachen mit ca. 40 – 50 °C Festbett-Temperatur und einer aus der vorangegangenen Dampfphase resultierenden Restfeuchte realitätsnahen Bedingungen eines durchgehend betriebenen Adsorbers, was eine sachgerechte Bewertung des Übergangs in den eingeschwungenen Zyklusbetrieb erlaubte.

Als Adsorbens diente Lewatit® VP OC 1065 in identischer Schüttungskonfiguration und Trockenmasse wie in den Arbeitspaketen 4 und 5. Die Adsorption erfolgte am Realabgasstrang des Brennwertkessels, die Regeneration in einer hybriden, zeitlich gestaffelten Sequenz aus dreiminütiger direkter Dampf-Desorption (entsprechend dem in Arbeitspaket 5 als besonders leistungsfähig identifizierten sTVSA-Konzept) und einer anschließenden, siebenminütigen Trocknungs- und Nachdesorptionsphase mit heißem Stickstoff (100 °C) bei einem reduzierten Systemdruck von 0,6 bar(a). Diese Hybridstrategie verbindet die hohe spezifische Energiedichte des Wasserdampfs zur schnellen Aufheizung der Schüttung mit der bei Lewatit nachweislich vorteilhaften

Konvektionsabfuhr des freigesetzten CO₂ über ein heißes, trockenes Strippgas und ermöglicht zugleich eine partielle Trocknung des Festbetts vor dem nächsten Adsorptionszyklus.

Adsorptionsverhalten – Erstzyklus und Cyclic Steady State

Bereits die ersten vier konsekutiven Zyklen zeigten ein für aminfunktionalisierte Adsorbentien im Realbetrieb charakteristisches, zweistufiges Beladungsverhalten (Abbildung 21). Im ersten Zyklus wurde das vollständig trockene und frisch konditionierte Festbett mit dem Rauchgas beaufschlagt. Die ausgeprägte exotherme Reaktion zwischen CO₂ und den primären Amingruppen führte zu einem deutlichen Temperaturanstieg im Bett auf über 75 °C; gleichzeitig erfolgte der CO₂-Durchbruch am Auslass nach etwa 13 Minuten, und die gravimetrisch bestimmte aufgenommene CO₂-Masse betrug 23,35 g. Dieser Wert entspricht der unter den gegebenen Randbedingungen und bei trockenem Ausgangszustand maximal erreichbaren Arbeitskapazität und liegt erwartungsgemäß auf einem Niveau, das mit den in Arbeitspaket 4 für vergleichbare Konzentrationen ermittelten Beladungen konsistent ist.

In den unmittelbar anschließenden Zyklen 2 bis 4, die jeweils mit einem aus der vorangegangenen Hybridregeneration resultierenden, warm-feuchten Adsorberzustand starteten, stellte sich ein deutlich verändertes Bild ein. Die aufgenommene CO₂-Masse fiel auf reproduzierbare Werte zwischen 9,6 und 11,2 g pro Zyklus (10,23 g, 11,17 g, 9,61 g) ab. Gleichzeitig verschob sich der detektierte CO₂-Durchbruch auf etwa 16 bis 20 Minuten und damit zu späteren Zeitpunkten als im ersten Zyklus, und die im Bett gemessene Maximaltemperatur ging deutlich zurück. Aus den drei nahezu identischen Folgezyklen lässt sich ableiten, dass sich das System bereits nach wenigen Zyklen auf ein stabiles, niedrigeres Beladungsniveau einpendelt, das den im zyklischen Dauerbetrieb tatsächlich nutzbaren Arbeitspunkt (Cyclic Steady State) darstellt.

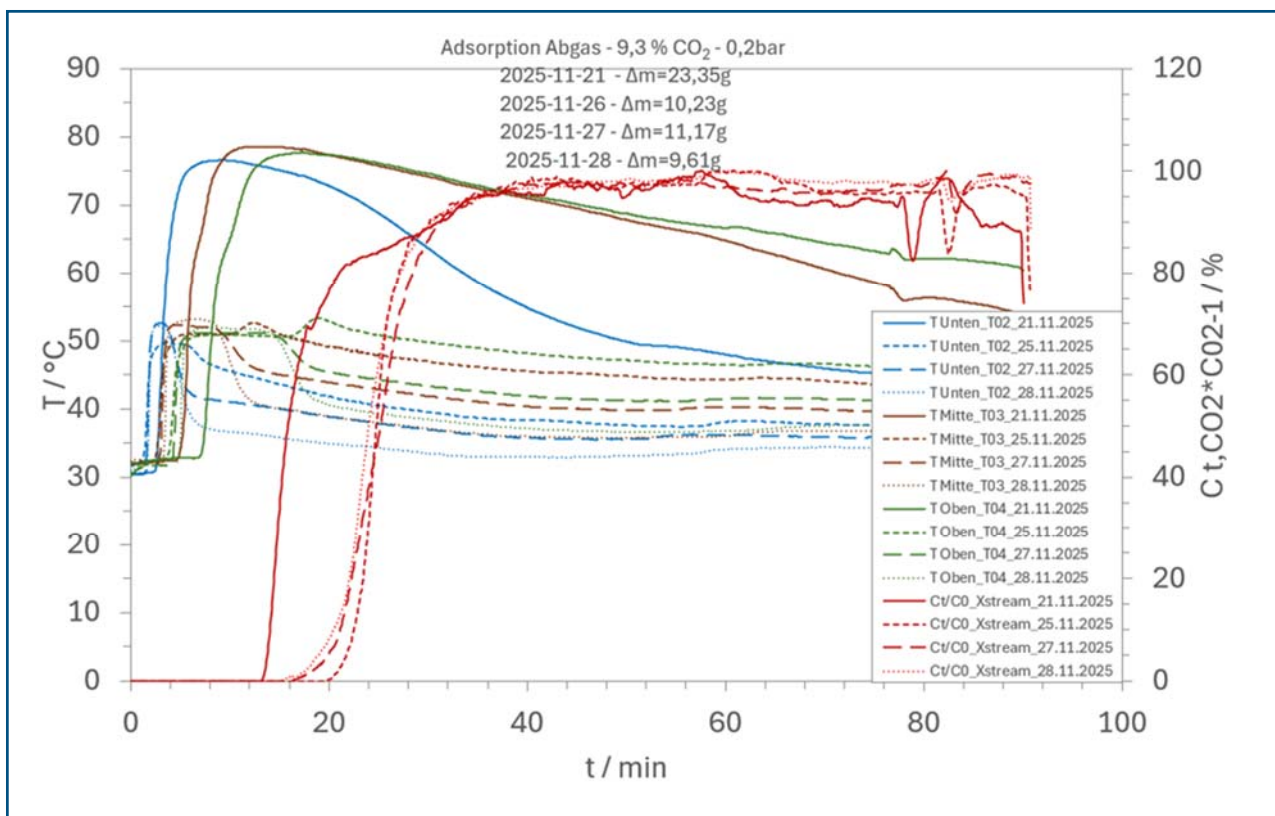


Abbildung 21: Adsorptionsverhalten im quasi-kontinuierlichen Zyklusbetrieb mit Rauchgas (9,3 Vol.-% CO₂, 0,2 bar Überdruck); Zyklus 1 (trocken/frisch konditioniert, ΔmCO₂ = 23,35 g) und Folgezyklen 2 – 4 (warm-feuchter Startzustand, ΔmCO₂ ≈ 10 – 11 g). Temperaturverläufe T₂ (unten), T₃ (Mitte), T₄ (oben) sowie normierte CO₂-Konzentration am Auslass.

Mechanistische Interpretation des First-Cycle-Effekts

Die beobachtete Diskrepanz zwischen dem ersten Zyklus und den eingeschwungenen Folgezyklen erklärt sich aus zwei konkurrierenden Mechanismen, deren Bilanz das Gesamtverhalten bestimmt.

Erstens reicht die für die Regenerationsphase vorgesehene Gesamtdauer von zehn Minuten (3 min Dampf + 7 min heißer Stickstoff) unter den gewählten Bedingungen nicht aus, um das Festbett vollständig zu desorbieren. Wie die in Arbeitspaket 5 detailliert dokumentierten sTVSA-Versuche gezeigt haben, ist für eine nahezu vollständige Regeneration eine erkennbar längere Verweilzeit unter Dampf-/Vakuumbedingungen erforderlich. Die kurze, auf Zykluszeitminimierung optimierte Regeneration belässt daher eine Restbeladung im Adsorbens, die zu Beginn jedes Folgezyklus bereits einen Teil der aktiven Zentren belegt und somit die für die folgende Adsorption verfügbare Restkapazität messbar reduziert. Dies erklärt unmittelbar die geringere absolute CO_2 -Aufnahme der Folgezyklen.

Zweitens überlagert sich diesem Kapazitätsverlust ein gegenläufiger, kinetisch-stöchiometrischer Effekt. Während das Adsorbens im ersten Zyklus vollständig trocken in die Adsorption geht, weisen die Folgezyklen aufgrund der vorangegangenen Dampfphase eine signifikante Restfeuchte auf. Unter trockenen Bedingungen verläuft die CO_2 -Bindung am Lewatit nach einer 2 : 1-Stöchiometrie zum ionischen Carbamat (zwei Amingruppen pro CO_2 -Molekül). In feuchter Atmosphäre tritt zusätzlich der Bicarbonat-Pfad mit einer günstigeren 1 : 1-Stöchiometrie auf, in dem jede Amingruppe stöchiometrisch ein CO_2 -Molekül bindet (Abbildung 22). Die verbleibenden, in den Folgezyklen tatsächlich freien Amin-Plätze werden somit pro aktivem Zentrum effizienter genutzt, was sich in dem gegenüber Zyklus 1 später einsetzenden Durchbruch (16 – 20 min statt 13 min) widerspiegelt: Die wandernde Massentransferzone bewegt sich langsamer durch das Bett, weil pro Adsorptionsstelle mehr CO_2 gebunden werden kann, obwohl die absolute Anzahl freier Stellen geringer ist. Die schwächere Exothermie der Folgezyklen ist damit ebenfalls konsistent, da insgesamt weniger CO_2 aufgenommen wird und die Verdunstungskühlung der Restfeuchte zusätzlich dämpfend wirkt.

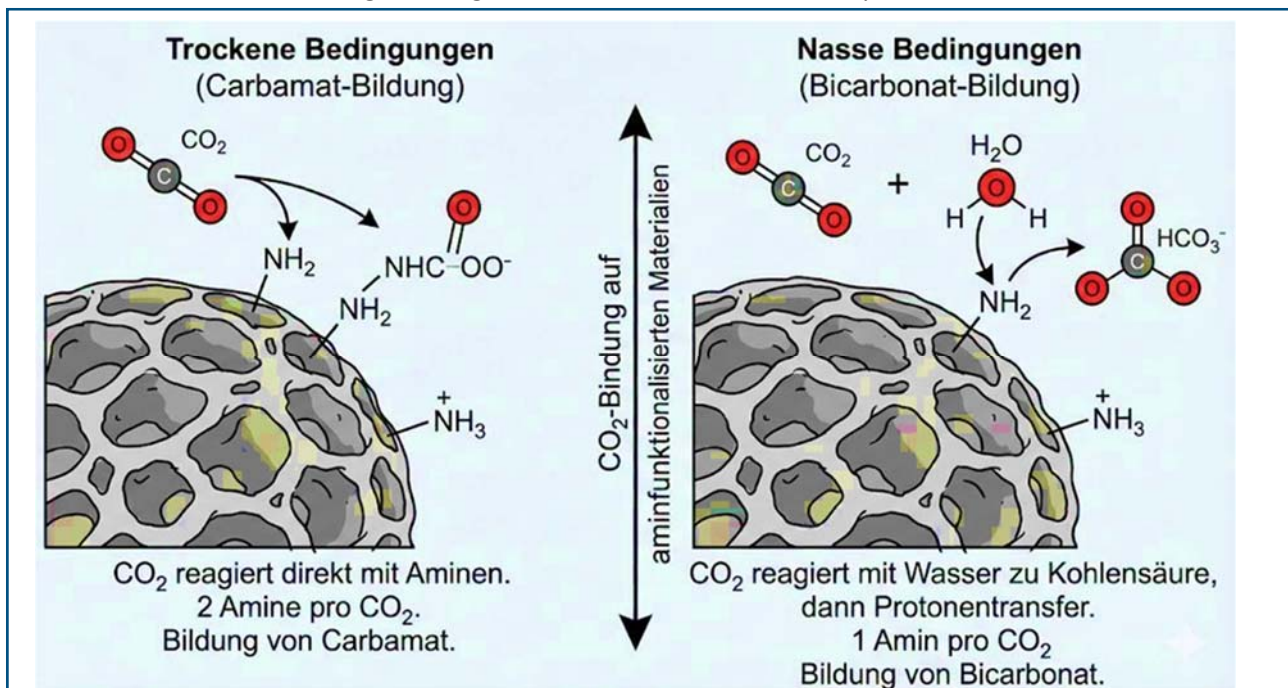


Abbildung 22: Schematische Darstellung der CO_2 -Bindungsmechanismen an aminfunktionalisierten Adsorbentien. Unter trockenen Bedingungen erfolgt die Carbamat-Bildung mit 2 : 1-Stöchiometrie (zwei Amingruppen pro CO_2); in Anwesenheit von Wasser bildet sich Bicarbonat mit 1 : 1-Stöchiometrie (eine Amingruppe pro CO_2).

Die Überlagerung beider Effekte – geringere Anzahl freier Adsorptionsplätze einerseits, effizientere stöchiometrische Nutzung jeder einzelnen Stelle andererseits – führt zu dem beobachteten zyklischen Arbeitspunkt, an dem sich Restbeladung und Bicarbonat-Begünstigung gegenseitig stabilisieren. Im Sinne der Wirtschaftlichkeit ist nicht die im Erstzyklus erzielbare Maximalkapazität, sondern dieses eingeschwungene Niveau die relevante Auslegungsgröße.

Desorptionsverlauf und Phasenwechsel innerhalb der Regeneration

Der zeitliche Verlauf der hybriden Regenerationsphase ist in Abbildung 23 für die vier untersuchten Zyklen dargestellt. Unmittelbar nach Beginn der Dampfeindüsung steigen die axial gemessenen Festbett-Temperaturen schnell auf das Sattdampf-niveau bei dem eingestellten Systemdruck von 0,6 bar(a). Die CO₂-Konzentration am Auslass zeigt einen scharf ausgeprägten Hauptpeak, der den Hauptteil des freigesetzten CO₂ enthält und der durch die hohe Kondensationsenthalpie des Wasserdampfs sowie den Steam-Stripping-Effekt – wie in Arbeitspaket 5 ausführlich beschrieben – getragen wird.

Mit Beendigung der Dampfphase nach drei Minuten ist im Temperaturverlauf ein deutlicher, kurzzeitiger Temperaturabfall zu erkennen, der sich auf zwei überlagerte Beiträge zurückführen lässt, zum einen die endotherme Charakteristik der weiterlaufenden CO₂-Desorption, zum anderen die Verdunstungskühlung der im Bett verbliebenen Restfeuchte, sobald das umgebende Gas vom kondensationsnahen Dampf auf den heißen, trockenen Stickstoffstrom umgestellt wird. In der anschließenden Trocknungs- und Nachdesorptionsphase mit heißem Stickstoff bei 100 °C steigt die Bett-Temperatur wieder an, und es tritt bei etwa Minute 4 – 5 ein dritter, kleinerer CO₂-Peak auf. Dieser dritte Peak ist mechanistisch konsistent mit dem Übergang der Bindungsform: Mit fortschreitender Trocknung des Betts verschiebt sich das chemische Gleichgewicht von Bicarbonat (begünstigt in feuchter Atmosphäre) zurück in Richtung Carbamat; das in Bicarbonat gebundene CO₂ wird dabei in einer separaten Welle freigesetzt. Diese Beobachtung ist in unmittelbarer Übereinstimmung mit dem in Arbeitspaket 5 diskutierten mehrphasigen, wellenförmigen Freisetzungsverhalten und bestätigt das dort entwickelte mechanistische Bild auch unter den realgastypischen Zyklusbedingungen.

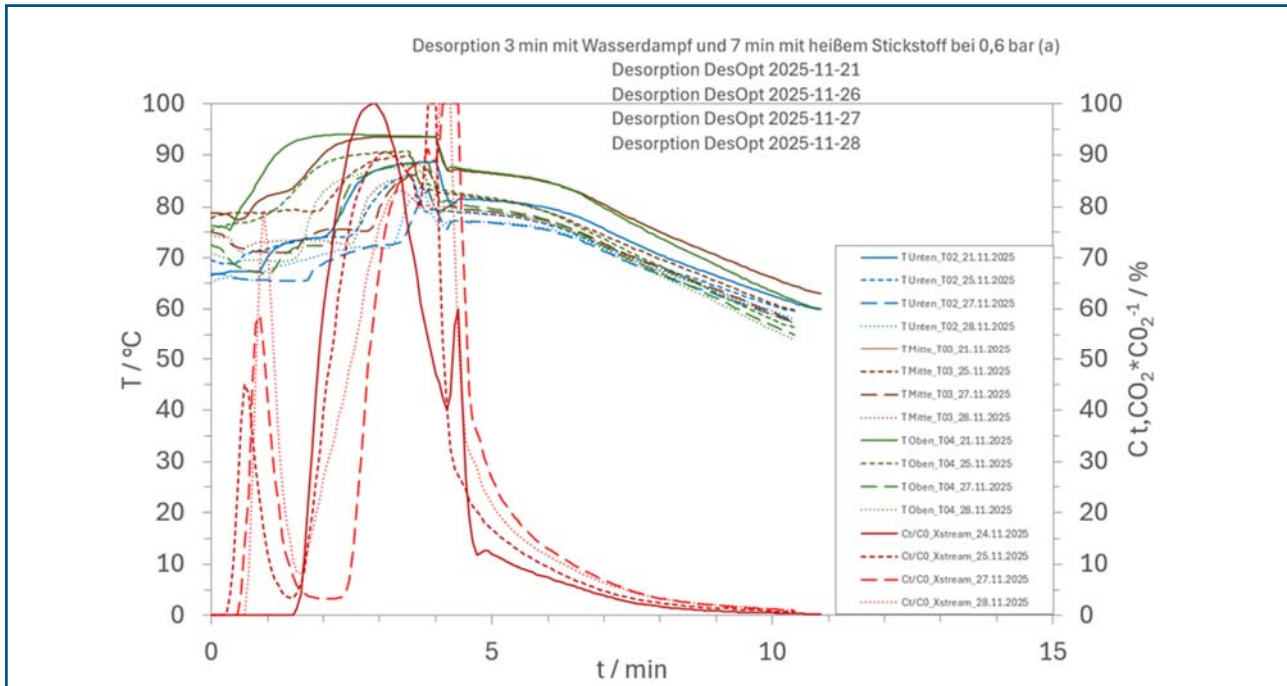


Abbildung 23: Hybrider Regenerationsverlauf im Zyklusbetrieb – 3 min direkte Dampf-Desorption gefolgt von 7 min Trocknung/Nach-desorption mit heißem Stickstoff (100 °C) bei 0,6 bar(a). Dargestellt sind die axial gemessenen Bett-Temperaturen sowie die CO₂-Konzentration am Auslass für vier aufeinanderfolgende Zyklen.

Aus den vier nahezu deckungsgleichen Desorptionsverläufen lässt sich zusätzlich ableiten, dass die hybride Regeneration trotz der bewusst kurz gewählten Phasendauern reproduzierbar arbeitet. Die Restbeladung am Ende jeder Regeneration ist nicht ein Ausdruck mangelnder Reproduzierbarkeit, sondern eine durch die Wahl der Zykluszeit aufgeprägte, definierte Größe. Eine vollständige Regeneration in jedem Einzelzyklus ist im quasi-kontinuierlichen Betrieb energetisch und zeitlich nur eingeschränkt sinnvoll. Die letzten Prozente der CO₂-Freisetzung erfordern überproportional viel Verweilzeit und Energieeintrag, während der dadurch erzielbare zusätzliche Kapazitätsgewinn im Folgezyklus durch den oben diskutierten stöchiometrischen Effekt teilweise kompensiert wird. Der Befund, dass eine bewusste Restbeladung den zyklischen Arbeitspunkt nicht destabilisiert, sondern im Gegenteil zur Ausbildung eines reproduzierbaren Cyclic Steady State führt, ist ein praxisrelevantes Auslegungsergebnis dieses Arbeitspakets.

Begleitende Langzeitbeobachtung der Adsorbensstabilität

Über die im engeren Sinne dem Zyklusbetrieb zuzuordnenden Versuche hinaus wurde an zwei Lewatit® VP OC 1065-Chargen, die parallel über mehrere Monate hinweg in den Versuchsbetrieb eingebunden waren, die Entwicklung der Gleichgewichtsbeladung bei einer standardisierten Referenzbeladung verfolgt (siehe Abbildung 24). Über einen Beobachtungszeitraum von Ende September 2024 bis Ende Januar 2025 zeigte sich eine moderate, aber erkennbare Abnahme der spezifischen CO₂-Gleichgewichtsbeladung mit anschließender Stabilisierung auf einem etwas niedrigeren Niveau. Diese Beobachtung ist konsistent mit den in der Literatur diskutierten Degradationsmechanismen aminfunktionalisierter Polymere – insbesondere der oxidativen Alterung in Anwesenheit von Sauerstoff bereits ab moderaten Temperaturen sowie der Urea-Formation in trockener CO₂-Atmosphäre bei Temperaturen ab ca. 120 °C, wie sie in Arbeitspaket 5 ausführlich diskutiert wurde.

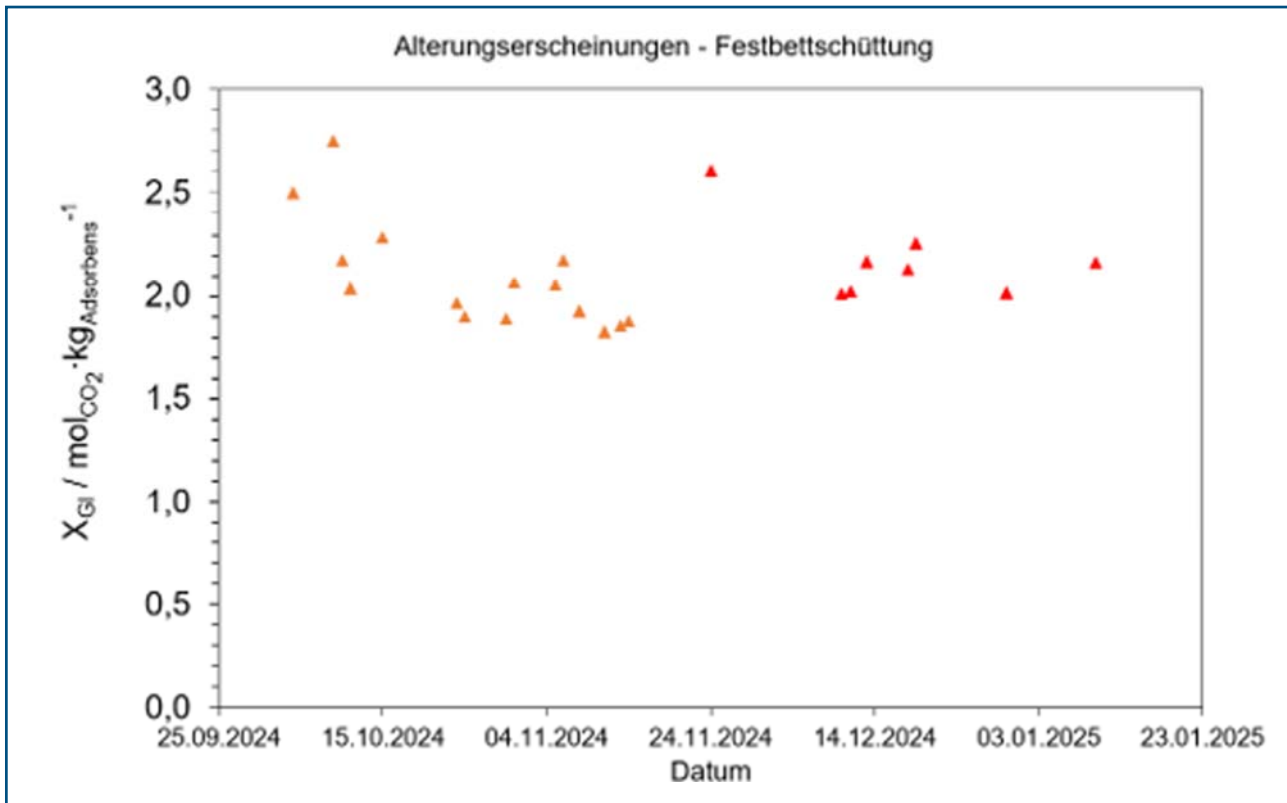


Abbildung 24: Langzeitbeobachtung der CO_2 -Gleichgewichtsbeladung X_{Gl} zweier Lewatit® VP OC 1065-Chargen (in $\text{mol}_{\text{CO}_2} / \text{kg}_{\text{Adsorbens}}$) bei standardisierter Referenzbeladung über den Zeitraum September 2024 bis Januar 2025 (orange: Charge 1, rot: Charge 2).

Für die wirtschaftliche Bewertung in Arbeitspaket 8 ist die in den vorgesehenen Verfahrensgrenzen (STVSA, Verdampfungstemperatur $\leq 130^\circ\text{C}$, keine längeren Aufenthaltszeiten oberhalb 120°C in trockener CO_2 -Atmosphäre, Vermeidung sauerstoffreicher Bedingungen bei hohen Temperaturen) beobachtete, vergleichsweise moderate Kapazitätsabnahme bei gleichzeitig stabilem zyklischen Arbeitspunkt ein günstiger Befund. Die Wiederbeschaffungskosten des Adsorbens stellen einen signifikanten Hebel der spezifischen Abscheidungskosten dar. Je länger die Standzeit gestreckt werden kann, desto deutlicher fällt der Kostenvorteil gegenüber Verfahren mit kontinuierlichen Waschmittelverlusten (etwa Aminschlupf in flüssigen MEA-Wäschen) aus. Eine vollständige, statistisch abgesicherte Quantifizierung der Lebensdauer unter realgastypischen, sauerstoff- und feuchtebeaufschlagten Bedingungen war im Rahmen dieses Vorhabens nicht mehr möglich, sie wird im Rahmen der zyklischen Langzeitversuche im IGF-Folgevorhaben DAC-MetFoam weiterverfolgt werden.

Gesamtbewertung

Mit Arbeitspaket 7 wurde der grundsätzliche Wirksamkeitsnachweis des entwickelten PTSA-Verfahrens auf der Basis aminfunktionalisierter Adsorbentien unter praxisnahen Bedingungen erbracht. Der quasi-kontinuierliche Betrieb mit Realabgas aus einem Gas-Brennwertkessel zeigt, dass die in den Arbeitspaketen 4 und 5 entwickelten Betriebsparameter – steam-assisted Regeneration bei abgesenktem Systemdruck, ergänzt durch eine kurze Trocknungs-/Nachdesorptionsphase mit heißem Stickstoff – zu einem stabilen zyklischen Arbeitspunkt führen. Die im ersten Zyklus erreichte hohe CO_2 -Aufnahme von $23,35\text{ g}$ lässt sich im Dauerbetrieb nicht halten, da die kurze Regeneration eine Restbeladung im Adsorbens belässt. Gleichzeitig sorgt die durch die Dampfphase aufgeprägte Restfeuchte über den Übergang vom Carbamat- zum Bicarbonat-Pfad für

eine stöchiometrisch effizientere Nutzung der verbleibenden freien Adsorptionsplätze. Die Bilanz beider Effekte führt zu einem reproduzierbar eingeschwungenen Zyklenniveau von etwa 10 – 11 g CO₂ pro Zyklus bei deutlich späteren Durchbruchzeiten als im Erstzyklus und stellt damit den für die Wirtschaftlichkeitsbetrachtung in Arbeitspaket 8 maßgeblichen realen Arbeitspunkt dar.

Die zentrale prozesstechnische Erkenntnis aus Arbeitspaket 7 lautet, dass das Feuchtigkeitsmanagement des Adsorbers den dominierenden Stellhebel des zyklischen Betriebsverhaltens darstellt. Eine vollständige Trocknung des Festbetts ist weder energetisch noch zeitlich sinnvoll; eine kontrollierte Restfeuchte hingegen begünstigt aktiv den thermodynamisch und stöchiometrisch günstigeren Bicarbonat-Pfad und verbessert die Ausnutzung des im zyklischen Steady State verfügbaren Aminpools.

Damit liefert Arbeitspaket 7 die belastbare experimentelle Brücke zwischen den Einzelphasen-Untersuchungen der Arbeitspakete 4 und 5 und der abschließenden ökonomischen Bewertung in Arbeitspaket 8. Es belegt die technische Machbarkeit des Verfahrens unter Realabgas, identifiziert den im Dauerbetrieb tatsächlich nutzbaren Arbeitspunkt und stellt die hierfür notwendigen Energie- und Stoffströme als Eingangsgrößen für die Wirtschaftlichkeitsrechnung bereit.

1.8 Arbeitspaket 8: Wirtschaftlichkeitsbetrachtung

- Durchgeführte Arbeiten
 - o Festlegung der Bewertungsmethodik und Bezugsgröße (€/t abgeschiedenes bzw. vermiedenes CO₂),
 - o Auswertung der mit einem MID-Drehstromzähler (Eltako DSZ180CEE-32A) erfassten Energieverbräuche und Trennung des Netto-Prozessbedarfs vom Grundverbrauch,
 - o Ableitung des spezifischen Energiebedarfs aus dem in AP 7 ermittelten Cyclic Steady State,
 - o Hochrechnung der Energie-, Betriebsmittel- und Investitionskosten auf eine Referenzanlage (1.000 m³/h),
 - o Aktualisierung der Preisbestandteile auf die Marktbedingungen 2026,
 - o Gegenüberstellung des PTSA-Adsorptionsverfahrens mit der MEA-Wäsche in mehreren Energieszenarien,
 - o Identifikation der dominierenden Kostentreiber, Sensitivitätsbetrachtung und Einordnung in den aktuellen CO₂-Preiskontext.
- Erzielte Ergebnisse

Arbeitspaket 8 überführt die in den vorangegangenen Arbeitspaketen gewonnenen Erkenntnisse – insbesondere die in Arbeitspaket 7 unter praxisnahen Realabgasbedingungen ermittelten Energie- und Stoffströme – in eine wirtschaftliche Bewertung des entwickelten PTSA-Verfahrens. Ziel ist es, die spezifischen Kosten der CO₂-Abscheidung abzuschätzen und dem etablierten Standardverfahren der aminbasierten Absorption gegenüberzustellen. Da sich das Verfahren noch im Technikumsmaßstab befindet und eine belastbare großtechnische Auslegung erst Gegenstand weiterführender Arbeiten ist, versteht sich die vorliegende Betrachtung ausdrücklich als überschlägige Abschätzung. Sie verfolgt das Ziel, Größenordnungen, dominierende Kostentreiber und die wesentlichen Stellhebel zur Verbesserung der Wirtschaftlichkeit herauszuarbeiten, nicht eine auf die Nachkommastelle belastbare Vollkostenrechnung.

Methodik und Bezugsgröße

Als Anwendungsfall der Wirtschaftlichkeitsbetrachtung dient – in Anknüpfung an die Vorgängeruntersuchung von 2016 – die CO₂-Abscheidung an einem Zementwerk. Dieser Fall ist besonders geeignet, weil rund zwei Drittel der CO₂-Emissionen eines Zementwerks aus der prozessbedingten Kalksteinentsäuerung stammen und sich weder durch Brennstoffwechsel noch durch Elektrifizierung vermeiden lassen. Die nachgeschaltete Abscheidung ist hier somit einer der wenigen tragfähigen Dekarbonisierungswege. Zudem weisen Zementwerke einen vergleichsweise hohen Abgas-CO₂-Gehalt sowie reichlich niederwertige Abwärme (Klinkerkühler, Vorwärmerabgas) auf, was die Wirtschaftlichkeit einer adsorptiven Abscheidung begünstigt.

Als Bezugsgröße der Wirtschaftlichkeitsbetrachtung dient – wie in der Bewertung von Verfahren zur CO₂-Minderung aus Abgasströmen üblich – der spezifische Kostenaufwand je Tonne abgeschiedenen bzw. vermiedenen CO₂ (€/t CO₂). Diese funktionale Einheit erlaubt einen verfahrensunabhängigen Vergleich und schließt unmittelbar an die in der Literatur und in einer eigenen Vorgängerabschätzung aus dem Jahr 2016 verwendete Systematik an. Die Kosten werden in die drei Hauptkategorien Energiekosten, Betriebsmittelkosten (im Wesentlichen der alterungsbedingte Ersatz des Adsorbens) und annuisierte Investitionskosten gegliedert.

Maßgeblicher verfahrenstechnischer Bezugspunkt ist nicht die im Erstzyklus erreichbare Maximalkapazität, sondern der in Arbeitspaket 7 identifizierte eingeschwungene Arbeitspunkt (Cyclic Steady State) mit einer reproduzierbaren Arbeitskapazität von etwa 10 – 11 g CO₂ je Zyklus. Dieser Wert bildet den im zyklischen Dauerbetrieb tatsächlich nutzbaren Zustand ab und ist damit die korrekte Auslegungsgröße für eine wirtschaftliche Bewertung.

Der Energiebedarf wurde gegenüber der Vorgängeruntersuchung methodisch verbessert erfasst. Während 2016 ein mechanischer Drehstromzähler zum Einsatz kam, wurde im vorliegenden Vorhaben ein elektronischer, MID-konformer Drehstromzähler (Measuring Instruments Directive — die EU-Messgeräte-Richtlinie 2014/32/EU) vom Typ Eltako DSZ180CEE-32A (400 V, 50 Hz, max. 32 A) verwendet, der über die gesamte Versuchszeit den Gesamtenergiebedarf der Anlage protokolliert. Um den prozessbedingten Netto-Energiebedarf der Ad- bzw. Desorption vom Grundverbrauch des Mess- und Hilfsequipments zu trennen, wurde der Energiezählerstand ab der ersten Messung am Morgen kontinuierlich aufgezeichnet. Der reale Beginn der jeweiligen Ad- bzw. Desorptionsphase ist in den Energiediagrammen gesondert markiert. Der prozessbedingte Netto-Energiebedarf ergibt sich aus der Differenz zwischen dem Zählerstand am Phasenende und dem zu Phasenbeginn anliegenden Grundverbrauch.

Energiebedarf der Ad- und Desorption aus den Messungen

Die so bestimmten Netto-Energieverbräuche sind in Tabelle 3 zusammengefasst; die zugehörigen Energieverläufe über den Versuchstag zeigt Abbildung 25. Für die Adsorption wurde über drei Versuchstage ein nahezu konstanter Netto-Energiebedarf von rund 0,84 kWh je Versuch ermittelt, der im Wesentlichen auf die Förderung des Gasstroms durch die Drehschieberpumpe entfällt. Die Desorption ist demgegenüber durch eine deutlich höhere Leistungsaufnahme bei kürzerer Dauer gekennzeichnet (Dampferzeugung, Vakuumpumpe, Beheizung des Strippgases) und weist mit 0,35 – 0,56 kWh je Versuch einen Netto-Energiebedarf in der gleichen Größenordnung wie die Adsorption auf. Für einen vollständigen Ad-/Desorptionszyklus resultiert damit ein elektrischer Netto-Energiebedarf von rund 1,3 kWh.

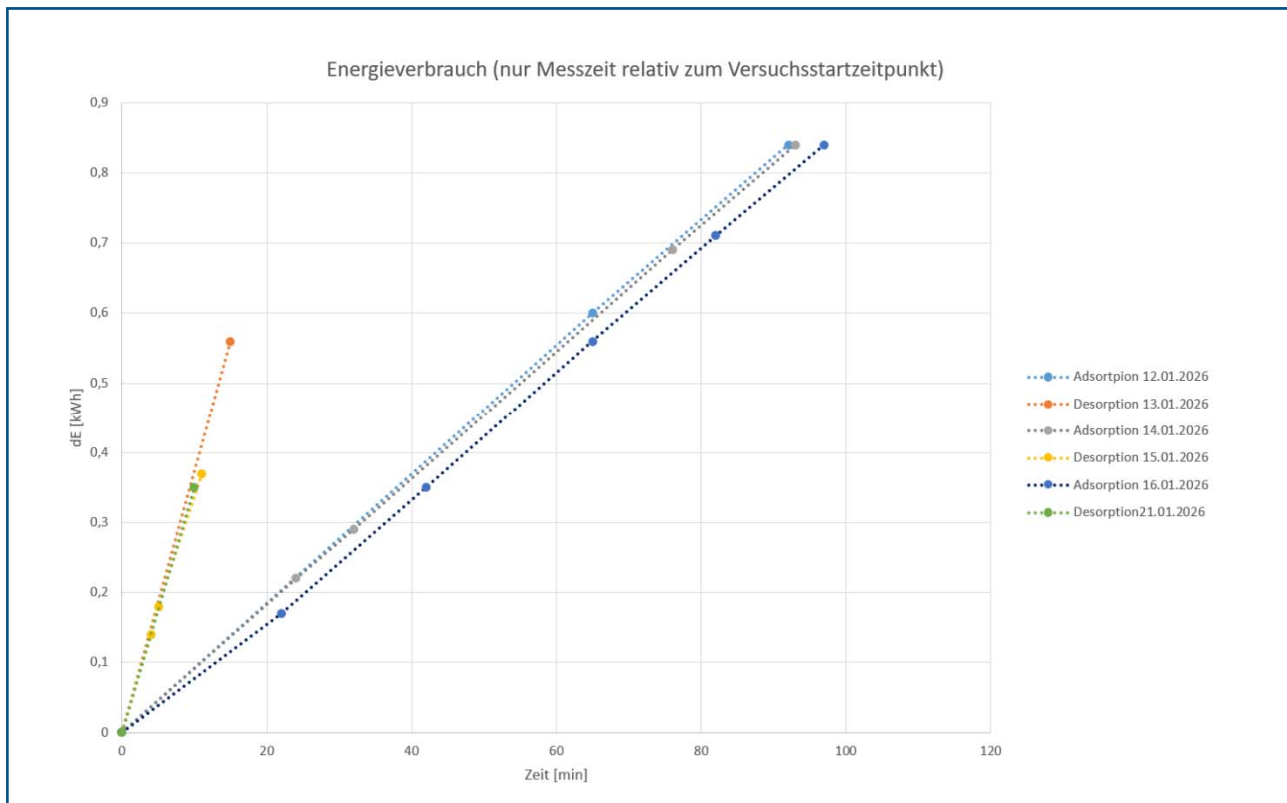


Abbildung 25: Energieverbrauch für Ad- und Desorption während drei exemplarischer Versuche

Tabelle 3: Aus den Messungen abgeleitete Netto-Energieverbräuche der Ad- und Desorption (Werte aus den Energiediagrammen abgelesen, gerundet).

Versuch	Datum	Netto-Energie [kWh]
Adsorption	12.01.2026	0,84
Adsorption	14.01.2026	0,84
Adsorption	16.01.2026	0,84
Desorption	13.01.2026	0,56
Desorption	15.01.2026	0,37
Desorption	21.01.2026	0,35

Wird dieser Energiebedarf auf die im eingeschwungenen Zustand freigesetzte CO₂-Masse von etwa 10,5 g je Zyklus (für reales Abgas aus Buderus-Brennwertkessel mit 9,3 Vol.-% CO₂) bezogen, ergibt sich rechnerisch ein spezifischer Energiebedarf in der Größenordnung von 120 MWh je Tonne CO₂. Dieser Wert liegt um etwa zwei Größenordnungen über jedem großtechnisch realistischen Niveau und darf keinesfalls unmittelbar auf eine ausgeführte Anlage übertragen werden. Ursache ist das ungünstige Verhältnis von fest installierter, für den Technikumsbetrieb deutlich überdimensionierter Aggregatleistung (Drehschieberpumpe, elektrische Dampferzeugung) zu dem sehr kleinen behandelten Gasvolumenstrom und der geringen Schüttungsmasse von deutlich weniger als einem halben Liter. Übertragbar sind aus den Messungen daher nicht die absoluten

Energiewerte, sondern die relative Aufteilung zwischen Ad- und Desorption sowie – nach verfahrenstechnisch begründeter Skalierung – die spezifische Größenordnung des Regenerationsenergiebedarfs.

Hochrechnung auf eine Referenzanlage (1.000 m³/h)

Zur Einordnung und zur direkten Vergleichbarkeit mit der Vorgängerabschätzung von 2016 werden die Kosten auf eine Referenzanlage mit einem Gasdurchsatz von 1.000 m³/h und einer jährlichen Betriebszeit von 8.000 h hochgerechnet. Bei dem in Arbeitspaket 7 vorliegenden CO₂-Gehalt des Rauchgases von 9,3 Vol.-% und einer konservativ angenommenen Gesamt-Abscheide- und -Rückgewinnungsrate von 80 % werden der Anlage rechnerisch rund 147 kg CO₂/h entzogen, was einer Jahresmenge von etwa 1.180 t CO₂ entspricht.

Für den spezifischen Energiebedarf der hochskalierten Anlage werden literaturgestützte Stoffwerte für Lewatit® VP OC 1065 herangezogen. Veneman et al. (2015) [10] geben für dieses Adsorbens eine Feststoff-Wärmekapazität von 1,5 kJ/(kg·K) sowie eine CO₂-Desorptionsenthalpie von 75 – 78 kJ/mol an. Der Reaktor wurde mit trockenem Adsorbens befüllt (eingewogene Trockenmasse 180,8 g; die im Datenblatt genannte Schüttdichte von 630 – 710 g/l bezieht sich auf das mit 65 – 70 % Wasser ausgelieferte Harz und ist für die trockene Betriebsschüttung nicht maßgeblich). Aus der in Arbeitspaket 7 gemessenen CO₂-Aufnahme von 10,5 g je Zyklus und der Trockenmasse ergibt sich eine zyklische Arbeitskapazität von rund 1,32 mol/kg (≈ 58 g CO₂ je kg Adsorbens), die sehr gut mit dem in der Literatur berichteten Wert übereinstimmt (Veneman et al. 2015: ≈ 1,4 mol/kg).

Daraus folgen die thermischen Anteile je Tonne CO₂: Aufheizung der Schüttung ($\Delta T \approx 58$ K, ohne Wärmerückgewinnung) rund 0,42 MWh/t, Desorptionsenthalpie rund 0,49 MWh/t sowie Desorption der mitadsorbierten Restfeuchte rund 0,07 MWh/t, in Summe ein physikalischer Wärmebedarf von rund 0,98 MWh/t. Diese Wärme wird im dampfunterstützten Verfahren durch den kondensierenden Strippdampf bereitgestellt und entspricht rechnerisch einem kondensierenden Dampfanteil von rund 1,6 kg Dampf je kg CO₂. Der Dampf ist somit das Transportmedium der Regenerationswärme und kein zusätzlicher, zu addierender Posten. Da der real eingesetzte Strippdampf darüber liegt und der nicht kondensierende Überschuss mit dem Produktgas abgeführt wird, wird für die thermische Regeneration ein konservativer Wert von rund 1,3 MWh/t CO₂ angesetzt (entsprechend einem Gesamt-Dampfeinsatz von rund 2 kg je kg CO₂), der diesen Dampfüberschuss sowie Wärmeverluste abdeckt.

Der elektrische Anteil (Vakuumpumpe, Gebläse, Hilfsaggregate) wird – mangels direkter Literaturwerte aus der Skalierung der Praxisversuche von 2016 – mit rund 0,6 MWh/t abgeschätzt, sodass ein spezifischer Gesamtenergiebedarf von rund 1,9 MWh/t CO₂ resultiert. Zum Vergleich nennen Veneman et al. (2015) [10] für eine wärmeintegrierte Auslegung (75 % Sensibelwärme-Rückgewinnung) einen Gesamt-Regenerationswärmebedarf von lediglich 2,6 GJ/t (≈ 0,72 MWh/t) zuzüglich 0,74 GJ/t (≈ 0,21 MWh/t) Kühlleistung – dieses Niveau liegt dem optimierten Szenario C zugrunde.

Entscheidend für die gegenüber 2016 verbesserte wirtschaftliche Ausgangslage ist dabei weniger der absolute Energiebedarf je Zyklus als vielmehr die im Projekt erreichte deutliche Steigerung der effektiven Desorptionsrate. Während bei den Praxisversuchen 2016 nur etwa 20 – 30 % des adsorbierten CO₂ wieder freigesetzt werden konnten (damals nur der über Vakuum gewonnene Anteil vor dem Luftstrippen) und sich dadurch die rechnerische Betriebsdauer je abgeschiedener Tonne CO₂ stark erhöhte, liefert die optimierte Regeneration einen reproduzierbar nutzbaren Arbeitspunkt mit höherer Produktreinheit. Dies ist der zentrale, durch das Vorhaben adressierte ökonomische Hebel.

Energiekosten unter den Preisbedingungen 2026

Gegenüber der Abschätzung von 2016 hat sich die Preissituation strukturell verändert. Der mit Abstand größte Einzelposten der damaligen Energiekostenrechnung – die Steuern und Abgaben in Höhe von 9,107 ct/kWh, die seinerzeit maßgeblich durch die EEG-Umlage bestimmt waren – ist in dieser Form entfallen, da die EEG-Umlage zum 1. Juli 2022 auf null gesenkt und mit dem EEG 2023 zum 1. Januar 2023 endgültig abgeschafft wurde. Der Gesamtpreis für Industriestrom liegt 2026 für Neuabschlüsse kleiner und mittlerer Industriebetriebe mit rund 16,7 ct/kWh¹ [11] zwar in einer ähnlichen Größenordnung wie 2016 (16,29 ct/kWh), seine Zusammensetzung hat sich jedoch deutlich verschoben (Tabelle 4). Der Schwerpunkt liegt heute auf Energiebeschaffung und Netzentgelt, während der zuvor dominierende Hebel einer steuerbefreiten Eigenstromnutzung an Bedeutung verloren hat.

Tabelle 4: Bestandteile des Industriestrompreises 2026 (Neuabschlüsse, kleine bis mittlere Industriebetriebe; gerundete Orientierungswerte) im Vergleich zur Vorgängerabschätzung 2016 [11], [12], [13].

Bestandteil	Wert 2026 [ct/kWh]	Wert 2016 [ct/kWh]
Energiebeschaffung / Vertrieb	8,7	3,33
Netzentgelt	3,0	3,85
Stromsteuer + Umlagen (KWKG / §19 / Offshore)	5,0	9,11
Summe Industriestrom	16,7	16,29

Die thermische Energie für die Regeneration kann je nach Standort sehr unterschiedlich bereitgestellt werden. Im Technikum erfolgt die Dampferzeugung vollelektrisch, in einer industriellen Anwendung – etwa in einem Zementwerk – steht hingegen häufig niederwertige Prozess- bzw. Abwärme zur Verfügung. Diese beiden Möglichkeiten werden im Verfahrensvergleich als getrennte Szenarien abgebildet: Szenario A bewertet den gesamten (hochgerechneten) Energiebedarf elektrisch zum Industriestrompreis von 16,7 ct/kWh und bildet damit konservativ die am Teststand vollelektrische Energiebereitstellung (elektrische Dampferzeugung) ab; Szenario B deckt den thermischen Anteil über Abwärme (25 €/MWh [10], [14]) und nur den elektrischen Anteil über Industriestrom.

Betriebsmittelkosten und Standzeit des Adsorbens

Neben den Energiekosten bestimmt vor allem der alterungsbedingte Ersatz des Adsorbens die Betriebskosten. Eine lineare Hochrechnung der in der Vorgängeruntersuchung eingesetzten Adsorbensmenge (150 l für 11 m³/h) auf 1.000 m³/h ergibt einen Bedarf von rund 13.600 l Lewatit® VP OC 1065. Bei einem für Großmengen realistischen Bezugspreis von etwa 11,75 €/l (rund 50 % des Preises im Spezialchemikalienhandel) entspricht dies einer Erstausrüstung von rund 160.000 €. Wird eine Standzeit von fünf Jahren zugrunde gelegt, ergeben sich daraus spezifische Kosten von etwa 27 €/t CO₂; bei einer konservativeren Annahme von drei Jahren erhöhen sie sich auf rund 45 €/t CO₂.

Die in Arbeitspaket 7 begleitend durchgeführte Langzeitbeobachtung zweier Lewatit-Chargen stützt die Annahme einer mehrjährigen Standzeit: Über den Beobachtungszeitraum zeigte sich lediglich eine moderate Abnahme der Gleichgewichtsbeladung mit anschließender Stabilisierung. Hierin liegt ein struktureller Vorteil

¹ Für Unternehmen des produzierenden Gewerbes ermäßigt sich die Stromsteuer 2026 auf rund 0,05 ct/kWh (Steu-
erentlastung nach § 9b StromStG); Tabelle 4 setzt mit der vollen Stromsteuer bewusst den konservativen Fall an.

des Adsorptionsverfahrens gegenüber der MEA-Wäsche, bei der durch Verdampfung, Degradation und A-minschlupf ein kontinuierlicher Waschmittelverlust mit entsprechendem Ergänzungs- und Entsorgungsbedarf anfällt. Je länger die Standzeit des Adsorbens gestreckt werden kann, desto deutlicher fällt dieser Kostenvorteil aus. Eine statistisch abgesicherte Quantifizierung der Lebensdauer unter realgastypischen, sauerstoff- und feuchtebeaufschlagten Bedingungen war im Rahmen dieses Vorhabens nicht möglich und wird im IGF-Folgevorhaben DAC-MetFoam weiterverfolgt.

Investitionskostenabschätzung

Die Investitionskosten wurden in erster Näherung aus der Vorgängerabschätzung übernommen und moderat an das Preisniveau 2026 (+20 %) angepasst. Für die Referenzanlagengröße von 1.000 m³/h werden somit Investitionskosten von rund 1,37 Mio. € angesetzt, die die typischen technischen Komponenten (Reaktoren bzw. Kolonnen, Wärmeübertrager, Vakuumpumpe, Gebläse, Verrohrung, Mess-, Steuer- und Regelungstechnik) umfassen. Bei linearer Abschreibung über zehn Jahre sowie Ansätzen von 4 % für Instandhaltung/Wartung und 1 % für sonstige Betriebskosten resultiert ein annuierter investitionsgebundener Jahreskostenanteil von rund 205.500 €/a bzw. – bezogen auf die Jahresabscheidemenge der Referenzanlage – von etwa 175 €/t CO₂. Dieser hohe spezifische Wert ist unmittelbarer Ausdruck der für eine wirtschaftliche Auslegung noch zu geringen Anlagengröße und sinkt mit zunehmendem Anlagenmaßstab deutlich. Um einen fairen Verfahrenvergleich zu gewährleisten, wird – wie bereits 2016 – für die MEA-Wäsche derselbe Investitionskostenansatz verwendet.

Verfahrenvergleich mit der MEA-Wäsche

Tabelle 5 stellt die spezifischen CO₂-Abscheidkosten des entwickelten Adsorptionsverfahrens in drei Energieszenarien der MEA-Wäsche gegenüber. Abbildung 26 visualisiert die Zusammensetzung der Gesamtkosten.

Tabelle 5: Spezifische CO₂-Abscheidkosten im Verfahrenvergleich (Referenzanlage 1.000 m³/h, 8.000 h/a; alle Werte in € je Tonne abgeschiedenem CO₂; überschlägige Abschätzung 2026).

Kostenposition [€/t CO ₂]	Adsorption A (rein elektrisch) elektrisch 1,9 MWh/t	Adsorption B (Abwärme, konservativ) thermisch 1,3 / elektrisch 0,6 MWh/t	Adsorption C (Abwärme + Optim.) thermisch 0,7 / elektrisch 0,35	MEA-Wäsche (Abwärme) thermisch (Reboiler) 1,0 / elektrisch 0,15
Energiekosten Strom	317	100	58	25
Energiekosten Wärme	–	33	18	25
Energiekosten Kühlung	30	30	30	44
Summe Energiekosten	347	163	106	94
Betriebsmittel (Adsorbens / Waschmittel)	27	27	27	24
Investitions- und Fixkosten (annuiert)	175	175	175	175
Gesamtkosten	549	365	308	293

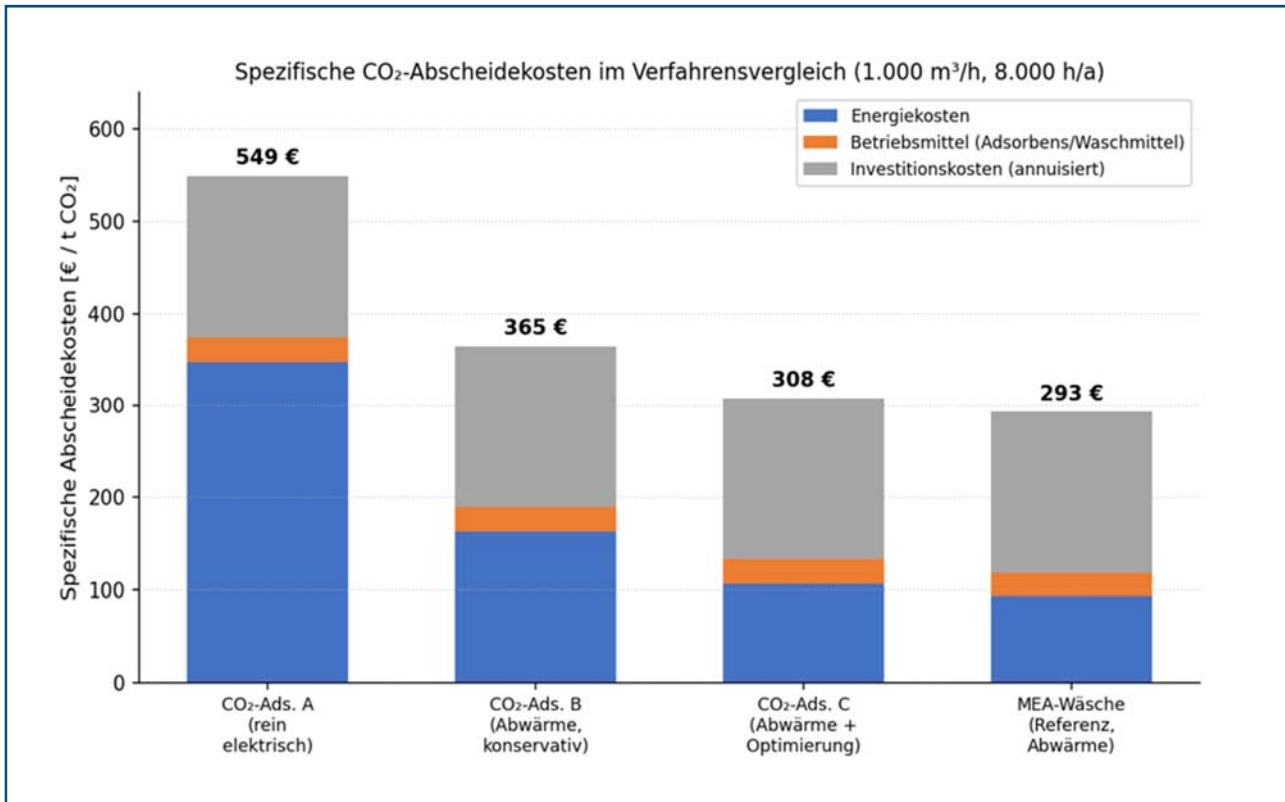


Abbildung 26: Spezifische CO₂-Abscheidekosten im Verfahrenvergleich (Referenzanlage 1.000 m³/h). Aufgeschlüsselt nach Energie-, Betriebsmittel- und annuierten Investitions- und Fixkosten.

Der Vergleich zeigt zunächst, dass die Art der Bereitstellung der Regenerationswärme der mit Abstand wichtigste Stellhebel des Adsorptionsverfahrens ist. In der rein elektrischen Variante (Szenario A) liegen die Gesamtkosten mit rund 549 €/t CO₂ deutlich über der MEA-Wäsche und sind nicht wettbewerbsfähig — maßgeblich, weil hier die gesamte Regenerationswärme (1,3 MWh/t) elektrisch zum vollen Industriestrompreis von 167 €/MWh erzeugt wird, was rund 217 €/t CO₂ entspricht, während der elektrische Bedarf der Vakuumpumaggregate (0,6 MWh/t ≈ 100 €/t) demgegenüber zurücktritt.

Die Bereitstellung der Regenerationswärme aus Abwärme senkt die Kosten in der konservativen Auslegung ohne Wärmerückgewinnung (Szenario B) auf rund 365 €/t CO₂. Da die thermische Energie bei Abwärmenutzung ohnehin günstig ist, schlägt sich die in Arbeitspaket 7 gemessene, literaturkonforme Arbeitskapazität (≈ 1,32 mol/kg) hier vor allem in einem niedrigen Wärmekostenanteil nieder. Wird zusätzlich das Optimierungspotenzial ausgeschöpft – Sensibelwärme-Rückgewinnung sowie effizientere, großskalige Vakuum- und Gebläseaggregate, die den dominierenden elektrischen Bedarf senken (Szenario C) – sinken die Gesamtkosten auf rund 308 €/t CO₂ und erreichen damit nahezu das Niveau der unter gleichen Randbedingungen und gleicher Anlagengröße bewerteten MEA-Wäsche (rund 293 €/t CO₂). Der wesentliche verbleibende Nachteil des

Adsorptionsverfahrens unter den Preisbedingungen 2026 bleibt der elektrische Energiebedarf der Vakuumregeneration, der – anders als 2016, als ein steuerbefreiter Eigenstrombezug unterstellt wurde – heute mit dem vollen Industriestrompreis zu bewerten ist. Dem stehen die strukturellen Vorteile des Adsorptionsverfahrens gegenüber (kein kontinuierlicher Waschmittelverlust, Nutzung niederwertiger Abwärme, Entfall aminbedingter Emissionsminderungsmaßnahmen). Das Kostensenkungspotenzial ist zudem hoch und wird wesentlich durch Wärmeintegration und die Effizienz der Vakuumaggregate bestimmt.

Die absoluten Kostenniveaus beider Verfahren in dieser kleinen Referenzanlage liegen erwartungsgemäß deutlich über den in der aktuellen Literatur für großtechnische Zementwerksanlagen genannten Werten der MEA-Wäsche von etwa 48 – 61 €/t CO₂ (CO₂-Vermeidungskosten rund 57 – 85 €/t CO₂) [15]. Diese niedrigen Literaturwerte beruhen auf sehr großen Anlagen mit entsprechend geringen spezifischen Investitionskosten sowie auf der Nutzung nahezu kostenfreier Abwärme. Der hier durchgeführte Vergleich bei einheitlich 1.000 m³/h ist daher nicht als Aussage über die absolute Wettbewerbsfähigkeit zu verstehen, sondern als belastbarer relativer Vergleich der beiden Technologien bei gleichem Maßstab. Bei einer Hochskalierung auf reale Zementwerksabgasströme (0,2 – 0,5 Mio. Nm³/h) ist – analog zur MEA-Wäsche – auch für das Adsorptionsverfahren ein erheblicher Rückgang sowohl der spezifischen Investitions- als auch der spezifischen Energiekosten zu erwarten.

Einordnung, Sensitivität und Ausblick

Als dominierende Kostentreiber lassen sich drei Größen identifizieren: der spezifische Energiebedarf und insbesondere die Art seiner Deckung (Abwärme gegenüber elektrischer Versorgung), die Standzeit des Adsorbens sowie der Anlagenmaßstab, der sowohl die spezifischen Investitions- als auch die spezifischen Energiekosten bestimmt. Tabelle 6 stellt die spezifischen Gesamtkosten (Szenario B als Basis, 365 €/t CO₂) bei Variation der vier wichtigsten Einflussgrößen zusammen; variiert wird jeweils ein Parameter bei sonst konstanten Annahmen.

Tabelle 6: Sensitivität der spezifischen CO₂-Abscheidekosten (Szenario B, Basisfall 365 €/t CO₂; jeweils Variation eines Parameters bei sonst konstanten Annahmen).

Parameter	Variation (ungünstig / Basis / günstig)	Gesamtkosten [€/t CO ₂]
Adsorbens-Standzeit	3 / 5 / 7 a	383 / 365 / 357
Preis der Abwärme	50 / 25 / 0 €/MWh	397 / 365 / 332
Elektr. Vakuum-/Gebläsebedarf	0,9 / 0,6 / 0,35 MWh/t	415 / 365 / 323
Anlagenmaßstab (Investition annuiert)	1.000 / 10.000 / 50.000 m ³ /h	365 / 278 / 244

Die Aufstellung zeigt, dass der Anlagenmaßstab den mit Abstand größten Hebel darstellt: Eine Vergrößerung um den Faktor 10 bzw. 50 senkt allein über die spezifischen Investitionskosten die Gesamtkosten von 365 auf rund 278 bzw. 244 €/t CO₂ (zugrunde gelegter Kapazitätsexponent 0,7). Auf der Betriebskostenseite sind der elektrische Vakuumbedarf und der Preis der Regenerationswärme die wirksamsten Stellgrößen, während die Adsorbens-Standzeit im betrachteten Bereich von vergleichsweise untergeordneter Bedeutung ist.

Für die ökonomische Gesamteinordnung ist schließlich der CO₂-Preis maßgeblich, der den Wert des vermiedenen CO₂ bestimmt. Mit einem Preis für EU-Emissionszertifikate (EUA) von etwa 75 – 77 €/t CO₂ zur Jahresmitte 2026 – ein Niveau, das auch durch den ersten CBAM-Referenzpreis (Carbon Border Adjustment Mechanism, deutsch: CO₂-Grenzausgleichssystem) gestützt wird – liegen die spezifischen Abscheidekosten der

kleinen Referenzanlage noch deutlich über dem Marktwert des vermiedenen CO₂. Eine wirtschaftlich tragfähige Abscheidung setzt daher den großtechnischen Maßstab, eine konsequente Abwärmeintegration und niedrige Adsorbenskosten voraus. Die belastbare großtechnische Auslegung, die statistisch abgesicherte Bestimmung der Adsorbens-Lebensdauer unter Realgasbedingungen sowie die abschließende ökonomische Bewertung sind Gegenstand des IGF-Folgevorhabens DAC-MetFoam.

Zusammenfassende Bewertung

Die Wirtschaftlichkeitsbetrachtung in Arbeitspaket 8 zeigt, dass das im Vorhaben optimierte Desorptionsverfahren die ökonomische Ausgangslage gegenüber der Situation von 2016 vor allem dadurch verbessert, dass es den eigentlichen Engpass – die zuvor nur teilweise gelingende Freisetzung des adsorbierten CO₂ – auflöst. Indem die effektive Desorptionsrate und die Produktreinheit deutlich gesteigert werden, verschiebt sich der begrenzende Faktor von der Frage der grundsätzlichen Regenerierbarkeit hin zu den klassischen, gut beeinflussbaren Optimierungsgrößen Energieeinsatz, Anlagenmaßstab und Betriebsmittelstandzeit.

Unter den Preisbedingungen des Jahres 2026 erreicht das Verfahren bei Nutzung von Abwärme ein Kosten-niveau, das bei gleicher Anlagengröße in der Größenordnung der etablierten MEA-Wäsche liegt, und bietet zugleich strukturelle Vorteile: die Nutzbarkeit niederwertiger Wärme bei Verdampfungstemperaturen ≤ 130 °C, den Verzicht auf kontinuierliche Waschmittelergänzung und -entsorgung sowie das Entfallen aminbedingter Emissionsminderungsmaßnahmen. Entscheidend für die Wettbewerbsfähigkeit sind der Einsatz großer, leistungsfähiger Aggregate, die konsequente Integration vorhandener Abwärme und eine möglichst lange Standzeit des Adsorbens. Die Betrachtung bestätigt damit das technisch-wirtschaftliche Potenzial des entwickelten Verfahrens und benennt die für Folgevorhaben maßgeblichen Stellhebel.

2 Verwendung der Zuwendung

Nachfolgend wird die Verwendung der Zuwendung entsprechend den Einzelansätzen des Finanzierungsplans dargestellt. Die ausführliche Begründung der Notwendigkeit und Angemessenheit der einzelnen Positionen sowie der beiden kostenneutralen Laufzeitverlängerungen erfolgt in Kapitel 3.

Wissenschaftlich-technisches Personal (Einzelansatz A.1 des Finanzierungsplans)

Es wurde wissenschaftlich-technisches Personal der Forschungseinrichtung IUTA im Umfang von 24 Personenmonaten eingesetzt. Damit wurde die im Finanzierungsplan vorgesehene Personalzuwendung planmäßig und vollständig in Anspruch genommen, ein Mehraufwand gegenüber dem Plan entstand nicht.

Geräte (Einzelansatz B des Finanzierungsplans)

Anstelle des im Finanzierungsplan vorgesehenen Dampfgenerators vom Typ Giconmes NGV-1615 wurde nach bewilligtem Antrag auf Umwidmung der zugehörigen Sachmittel eine mobile Gasaufbereitungseinheit der Firma M&C TechGroup zum Preis von 6.364 € beschafft. Weitere Geräte mit einem Beschaffungswert von mehr als 2.500 € wurden im Bearbeitungszeitraum nicht beschafft.

Leistungen Dritter (Einzelansatz C des Finanzierungsplans)

Im gesamten Bearbeitungszeitraum des Forschungsvorhabens wurden wie geplant keine Leistungen Dritter in Anspruch genommen.

3 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

Das Forschungsvorhaben umfasste acht aufeinander aufbauende Arbeitspakete, deren Inhalte und Ergebnisse in Kapitel 1 ausführlich dargestellt sind. Die in den Arbeitspaketen geleistete Arbeit war zur Erreichung der im Antrag formulierten Zielsetzung – die Weiterentwicklung des Prozessschritts der Desorption bei trockenen CO₂-Abtrennverfahren mit aminfunktionalisierten Adsorbentien einschließlich Wirtschaftlichkeitsbewertung – in vollem Umfang notwendig; der hierfür eingesetzte personelle und sachmittelbezogene Aufwand entspricht dem für vergleichbare verfahrenstechnische IGF-Vorhaben üblichen und angemessenen Maß.

Personaleinsatz

Der Einsatz von 24 Personenmonaten wissenschaftlich-technischen Personals war notwendig, um die anspruchsvollen verfahrenstechnischen, experimentellen, simulatorischen und ökonomischen Arbeitsinhalte des Vorhabens fachgerecht zu bearbeiten. Schwerpunkte des Personaleinsatzes lagen auf der verfahrenstechnischen Auslegung und dem Umbau des Versuchsstands (AP 1, AP 3), der Entwicklung optimierter Wärmeübertragerkonfigurationen (AP 2), den umfangreichen Versuchskampagnen zur Adsorption und Desorption am Teststand (AP 4, AP 5), der dynamischen Festbett-Simulation des Adsorptions- und Desorptionsprozesses (AP 6), der Evaluation des Verfahrens unter realgasnahen Bedingungen am Abgasstrom eines Gas-Brennwertkessels (AP 7) sowie der abschließenden Wirtschaftlichkeitsbetrachtung (AP 8). Sämtliche Tätigkeiten waren zur Erreichung der Projektziele unverzichtbar, der eingesetzte Personalaufwand entspricht der ursprünglich beantragten Planung.

Umwidmung der Sachmittel

Die Umwidmung der für den Dampfgenerator vom Typ Giconmes NGV-1615 vorgesehenen Sachmittel zugunsten der mobilen Gasaufbereitungseinheit der Firma M&C TechGroup war aus zwei voneinander unabhängigen Gründen notwendig und sowohl technisch als auch wirtschaftlich angemessen. Zum einen erwies sich der ursprünglich beantragte Dampfgenerator beim Detail-Engineering für den Arbeitsbereich der Versuchsanlage als ungeeignet: Die erzeugbare Dampfmenge war zu hoch und aufgrund einer geringen Modulationsfähigkeit nicht in den benötigten Bereich regelbar. Eine geeignete Alternative der Firma ADROP Feuchtemesstechnik GmbH hätte mit 14.900 € (ohne Dosiereinrichtung) den im Finanzierungsplan vorgesehenen Mittelansatz erheblich überschritten. Es wurde daher auf ein im Hause vorhandenes Bestandsgerät der Firma ADROP aus einer ähnlichen Anwendung zurückgegriffen, dessen Instandsetzung und Systemintegration ohne zusätzliche Sachmittel realisiert werden konnten. Zum anderen fiel im Verlauf der Versuchsdurchführung die Membranpumpe des bestehenden Messgasaufbereitungssystems aus. Da diese vom Hersteller nicht mehr lieferbar ist, war ein Ersatz des Messgasaufbereitungssystems zwingend erforderlich, um die für die Auswertung sämtlicher Versuchsreihen unverzichtbare Online-Gasanalyse aufrechterhalten zu können. Die angeschaffte mobile Gasaufbereitung der M&C TechGroup deckt diesen Bedarf vollständig ab und ermöglichte den fortgeführten Betrieb der Versuchsanlage zu deutlich niedrigeren Kosten als die ursprünglich vorgesehene Beschaffung.

Kostenneutrale Laufzeitverlängerungen

Im Verlauf des Vorhabens wurden zwei kostenneutrale Verlängerungen beantragt und bewilligt; beide Verlängerungen waren notwendig, um die Arbeitspakete in der vorgesehenen Tiefe und Qualität abschließen zu können. Die erste Verlängerung um sechs Monate (vom 31.03.2025 auf den 30.09.2025) ergab sich aus den

oben dargestellten technischen Schwierigkeiten beim Umbau der Versuchsanlage, insbesondere aus der aufwendigen Instandsetzung und Systemintegration des ADROP-Bestandsgeräts, den zur Zeit des Anlagenumbaus erheblich verlängerten Lieferzeiten zentraler Systemkomponenten (Feuchtesensoren, Gasbefeuchter, Reaktoren, Heizsysteme, Kühlaggregate), den nach Inbetriebnahme erforderlichen umfangreichen Rüstvorgängen und Einschwingzeiten zur Einstellung stationärer Start- und Gleichgewichtsbedingungen sowie aus dem zwischenzeitlichen Ausfall der nicht mehr lieferbaren Membranpumpe. Diese Faktoren führten zu einer um etwa drei bis vier Monate verspäteten Fertigstellung der Versuchsanlage gegenüber der ursprünglichen Planung. Die zweite Verlängerung um drei weitere Monate (vom 30.09.2025 auf den 31.12.2025) wurde notwendig, da nach dem Abschluss aller übrigen Arbeitspakete für AP 7 die saisonale Außerbetriebnahme des extern betriebenen Blockheizkraftwerks (BHKW) über die Sommermonate berücksichtigt werden musste. Der projektbegleitende Ausschuss sprach sich in seiner Sitzung am 10.07.2025 dafür aus, AP 7 nach Wiederinbetriebnahme des BHKW im Herbst 2025 unter Realbedingungen durchzuführen, anstatt auf eine alternative Rauchgasquelle auszuweichen, um die industrielle Aussagekraft der Validierungsergebnisse sicherzustellen. Beide Anträge auf kostenneutrale Verlängerung sind als Anlage beigefügt.

Einbindung des projektbegleitenden Ausschusses und Verzicht auf Leistungen Dritter

Die Begleitung des Vorhabens durch den projektbegleitenden Ausschuss war zur Sicherstellung der industriellen Relevanz und Praxisorientierung notwendig und in der gewählten Form angemessen. Im Rahmen regelmäßiger Sitzungen wurden Zwischenergebnisse vorgestellt, das weitere Vorgehen abgestimmt und – wie im vorhergehenden Abschnitt am Beispiel der Wahl der Realabgasquelle für AP 7 dargestellt – strategische Entscheidungen mit den Ausschussmitgliedern gemeinsam getroffen. Auf die Inanspruchnahme von Leistungen Dritter konnte verzichtet werden, da sämtliche Arbeitsinhalte mit dem in der Forschungseinrichtung IUTA vorhandenen wissenschaftlich-technischen Know-how und der vorhandenen Versuchsinfrastruktur bearbeitet werden konnten.

4 Darstellung des wissenschaftlich-technischen und wirtschaftlichen Nutzens der erzielten Ergebnisse insbesondere für KMU sowie ihres innovativen Beitrags und ihrer industriellen Anwendungsmöglichkeiten

Das Vorhaben hat die im Antrag und in den Gutachten der zuständigen AiF-Gutachtergruppe formulierten Erwartungen an die wirtschaftliche Relevanz für KMU adressiert und in belastbare Ergebnisse überführt. Die nachfolgenden Abschnitte stellen den wissenschaftlich-technischen Erkenntnisgewinn (Abschnitt a), den daraus abgeleiteten wirtschaftlichen Nutzen für kleine und mittelständische Unternehmen (Abschnitt b), den innovativen Beitrag (Abschnitt c) sowie die konkreten industriellen Anwendungsmöglichkeiten (Abschnitt d) zusammen. Detaillierte Mess-, Simulations- und Wirtschaftlichkeitsergebnisse, auf die sich die folgenden Ausführungen stützen, sind in Kapitel 1, insbesondere in den Arbeitspaketen 4, 5, 6, 7 und 8, dargestellt.

a) Wissenschaftlich-technischer Nutzen

Der wissenschaftlich-technische Nutzen des Vorhabens liegt in einer geschlossenen, experimentell und numerisch abgesicherten Wissensbasis zum Prozessschritt der Desorption an aminfunktionalisierten Adsorbentien, die in dieser Tiefe für das hier untersuchte Sorbenssystem Lewatit® VP OC 1065 vorher nicht öffentlich

verfügbar war. Im Einzelnen wurden eine systematische, einheitlich am gleichen Teststand erhobene Datenbasis für sechs miteinander kombinierbare Desorptionsstrategien (TSA, TVSA, TVCSA, sTSA, sTVCSA und sTVSA) erarbeitet und der dominierende Einfluss des thermischen Festbett-Managements quantitativ belegt. Durch den Einsatz wärmeleitfähiger Einbauten (offenporige Kupferschäume, Kupfervlies) wurden eine signifikant verbesserte Temperaturhomogenität, kürzere Aufheizzeiten und reproduzierbar erhöhte Desorptionsgrade erreicht. Ergänzend wurde in Arbeitspaket 6 ein numerisches Festbett-Modell entwickelt und gegen die experimentellen Daten validiert, mit dem Temperatur- und Konzentrationsverläufe zuverlässig vorhergesagt sowie alternative Betriebsstrategien energetisch bewertet werden können. In Arbeitspaket 7 wurde das Gesamtkonzept erstmals in einem zeitlich synchronisierten, alternierenden PTSA-Zyklus an Realabgas eines in der Praxis verwendeten Heizkesselmoduls über mehrere Zyklen erprobt und der für den Dauerbetrieb maßgebliche eingeschwungene Arbeitspunkt ($\approx 10 - 11 \text{ g CO}_2$ pro Zyklus) als Auslegungsgröße quantifiziert. Damit liegt ein geschlossener Datensatz vom Sorptionsverhalten über die zyklische Stabilität bis hin zur techno-ökonomischen Bewertung vor, der unmittelbar als Auslegungsgrundlage für reale Anlagen dient.

b) Wirtschaftlicher Nutzen, insbesondere für KMU

Wie bereits in der Begutachtung des Antrags durch die AiF-Gutachtergruppe hervorgehoben wurde, sind verfügbare CC-Verfahren auf Basis flüssiger Aminwäschen aufgrund des hohen Energiebedarfs und der typischerweise sehr großen Anlagengrößen für mittelständische Punktquellen kaum wirtschaftlich einsetzbar. Genau diese Lücke adressieren die Ergebnisse des Vorhabens. Die im Rahmen von Arbeitspaket 8 durchgeführte techno-ökonomische Bewertung belegt, dass das entwickelte Verfahren bei Nutzung von Abwärme im konservativen Basisszenario spezifische Gesamtkosten von etwa 365 €/t CO_2 erreicht und bei konsequenter Ausschöpfung des Optimierungspotenzials (Sensibelwärme-Rückgewinnung, effiziente Vakuum- und Gebläseaggregate) auf rund 308 €/t CO_2 sinkt – ein Niveau, das bei gleicher Anlagengröße in der Größenordnung der etablierten MEA-Wäsche liegt. Bereits bei einer Vergrößerung des Anlagenmaßstabs um den Faktor 50 sinken die Abscheidekosten auf rund 244 €/t CO_2 . Damit wird das Verfahren für KMU in zwei Konstellationen wirtschaftlich interessant: Erstens für mittelständische Punktquellen in Industriebranchen wie Glas, Keramik und Feuerfest, Papier, Lebensmittel/Brauereien sowie thermische Abfallbehandlung, in denen niederwertige Abwärme bei Verdampfungstemperaturen $\leq 130 \text{ °C}$ ohnehin verfügbar ist, der typische Emissionsumfang aber unterhalb der Wirtschaftlichkeitsschwelle der klassischen MEA-Wäsche liegt. Ein zweites Szenario bilden dezentrale, kleinskalige Anwendungen (z. B. Biogasaufbereitung, BHKW-Module), in denen die einfache Skalierbarkeit der Festbettmodule, der Verzicht auf kontinuierliche Waschmittelergänzung und -entsorgung sowie das Entfallen aminbedingter Emissionsminderungsmaßnahmen entscheidende Vorteile darstellen. Vor dem Hintergrund eines EUA-Preises (European Union Allowance, Deutsch: EU-Emissionsberechtigung oder CO_2 -Zertifikat) von etwa $75 - 77 \text{ €/t CO}_2$ zur Jahresmitte 2026, des stufenweisen Auslaufens der kostenfreien Zertifikatszuteilung im EU-ETS 1 (European Union Emissions Trading System 1, Deutsch: Europäisches Emissionshandelssystem 1) bis 2034 sowie des CO_2 -Grenzausgleichsmechanismus (CBAM) gewinnt die Verfügbarkeit eines auch im mittleren Maßstab wirtschaftlich tragfähigen CC-Verfahrens für deutsche KMU zunehmend Standortbedeutung.

c) Innovativer Beitrag

Der innovative Beitrag des Vorhabens gegenüber dem Stand der Forschung und Entwicklung ist dreifach. Erstens wurde der Engpass des Vorläufervorhabens IGF 17796 N – die nur teilweise gelingende Desorption – nicht durch eine weitere materialeitige Optimierung des Sorbens adressiert, sondern erstmals systematisch

durch ein apparativ-verfahrenstechnisches Konzept, nämlich durch die Kombination einer aktiven Verbesserung des Festbett-Wärmemanagements (wärmeleitfähige Einbauten) mit einer optimierten Prozessführung aus Temperatur-, Vakuum- und Dampfunterstützung. Hierdurch wurden die zyklischen Arbeitskapazitäten gegenüber dem Vorläuferprojekt deutlich gesteigert und die für KMU-Anwendungen kritische Zykluszeit signifikant verkürzt. Zweitens wurde der für die wirtschaftliche Auslegung maßgebliche eingeschwungene Arbeitspunkt im zyklischen Realbetrieb quantitativ erfasst und mechanistisch erklärt, womit erstmals eine belastbare Auslegungsgröße zur Verfügung steht, die das in der Literatur überwiegend aus Einzelphasen-Untersuchungen abgeleitete Bild durch das Verhalten im realen Dauerbetrieb ersetzt. Drittens überführt die in Arbeitspaket 8 erarbeitete Wirtschaftlichkeitsbetrachtung die Verfahrensergebnisse erstmals in einen direkten Kostenvergleich gegen die MEA-Wäsche bei einheitlichem Maßstab und identifiziert die maßgeblichen Stellhebel (Energieart, Anlagenmaßstab, Adsorbensstandzeit).

d) Industrielle Anwendungsmöglichkeiten

Die Ergebnisse sind für mehrere KMU-relevante Nutzergruppen unmittelbar verwertbar. Anlagen- und Apparatebauer (z. B. die im projektbegleitenden Ausschuss vertretenen Firmen CALORIC Anlagenbau GmbH und ETW Energietechnik GmbH) erhalten eine experimentell validierte Auslegungsgrundlage einschließlich Simulationsmodell, um modulare CC-Einheiten für mittlere Punktquellen im industriellen Maßstab und für dezentrale Anwendungen am BHKW zu projektieren. Anwender aus den mittelständisch geprägten Branchen Glas, Keramik, Feuerfest, Papier, Lebensmittel und thermische Abfallbehandlung können das Verfahren zur Erfüllung verschärfter Klimaziele und zur Vermeidung steigender Belastungen aus EU-ETS und CBAM einsetzen, insbesondere wenn betriebsseitig niederwertige Abwärme verfügbar ist. Betreiber von Biogasanlagen und BHKW – wie in den Vorhaben des IUTA mehrfach vertreten – können das Verfahren zur Erzeugung eines hochreinen CO₂-Produktstroms für die Biomethan- bzw. Bio-LNG-Aufbereitung oder zur Anbindung an CCU-Pfade nutzen. Der im projektbegleitenden Ausschuss vertretenen Firma DACMA GmbH eröffnet sich darüber hinaus der unmittelbare Anwendungspfad in Richtung Direct Air Capture (DAC). Auch die heimische Adsorbenshersteller-Industrie (LANXESS als Hersteller des eingesetzten Lewatit® VP OC 1065) profitiert von einer breiter belegten technisch-wirtschaftlichen Praxistauglichkeit ihres Produkts. Die in Arbeitspaket 2 gewonnenen Erkenntnisse zur Wirkung wärmeleitfähiger Metallstrukturen werden im unmittelbar anschließenden, vom projektbegleitenden Ausschuss bereits unterstützten IGF-Folgevorhaben „DAC-MetFoam“ (Funktionalisierte Metallschäume als thermisch optimierte Trägerstrukturen für die CO₂-Abscheidung aus Luft) aufgegriffen und auf das wirtschaftlich besonders perspektivreiche, von KMU verstärkt nachgefragte Anwendungsfeld DAC übertragen.

5 Wissenstransfer in die Wirtschaft

Der Transfer der im Vorhaben erzielten Ergebnisse in die Wirtschaft – insbesondere zu kleinen und mittleren Unternehmen (KMU) – war integraler Bestandteil der Projektkonzeption und wurde bereits während der Laufzeit kontinuierlich umgesetzt. Zentrales Instrument des Wissenstransfers war der projektbegleitende Ausschuss (PA), in dem Anlagen- und Apparatebauer, Adsorbenshersteller sowie potenzielle industrielle Anwender und Betreiber vertreten waren. Der Ausschuss trat in regelmäßigen Sitzungen zusammen und wurde fortlaufend über den Stand der Auslegung, der experimentellen Untersuchungen, der Festbett-Simulation sowie der Wirtschaftlichkeitsbetrachtung informiert. Die Rückmeldungen der Unternehmen flossen unmit-

telbar in die Priorisierung der Arbeiten und in die Festlegung praxisrelevanter Randbedingungen – etwa hinsichtlich Abgaszusammensetzung, verfügbarer Abwärmeniveaus und Anlagengrößen – ein, sodass die Ergebnisse von Beginn an an den Bedürfnissen der adressierten Branchen ausgerichtet werden konnten.

Die im projektbegleitenden Ausschuss vertretenen Unternehmen decken die Wertschöpfungskette des entwickelten Verfahrens weitgehend ab. Mit der CALORIC Anlagenbau GmbH und der ETW Energietechnik GmbH waren Anlagen- und Apparatebauer eingebunden, die die experimentell validierte Auslegungsgrundlage einschließlich des in Arbeitspaket 6 entwickelten Simulationsmodells unmittelbar zur Projektierung modularer CO₂-Abscheideeinheiten für mittlere Punktquellen und für dezentrale Anwendungen nutzen können. Die DACMA GmbH bringt einen direkten Anwendungspfad in Richtung Direct Air Capture (DAC) ein. Mit LANXESS als Hersteller des eingesetzten Adsorbens Lewatit® VP OC 1065 war zudem die Adsorbensherstellung vertreten, die von einer breiter belegten technisch-wirtschaftlichen Praxistauglichkeit ihres Produkts profitiert. Ergänzt wurde der Ausschuss durch weitere Industriepartner (u. a. Corning GmbH, DEIG Energie und Karl Steiger GmbH), die die Perspektive industrieller Anwender und Zulieferer einbrachten.

Über den projektbegleitenden Ausschuss hinaus trug die Einbindung wissenschaftlichen Nachwuchses zum Wissenstransfer bei. Im Rahmen des Vorhabens entstand eine Qualifizierungsarbeit (Masterarbeit O. Yildizli) zur Entwicklung und Erprobung eines effizienten CO₂-Adsorptionsverfahrens auf Basis aminfunktionalisierter Adsorbentien. Damit wurde zugleich qualifiziertes Personal mit unmittelbar industrieverwertbarem Know-how ausgebildet, das dem Arbeitsmarkt der adressierten Branchen zur Verfügung steht.

Ein wesentlicher, bereits angestoßener Transferkanal ist die Überführung zentraler Projektergebnisse in ein direktes Folgevorhaben. Die in Arbeitspaket 2 gewonnenen Erkenntnisse zur Wirkung wärmeleitfähiger Metallstrukturen auf das Festbett-Wärmemanagement werden im vom projektbegleitenden Ausschuss unterstützten IGF-Folgevorhaben „DAC-MetFoam“ (Funktionalisierte Metallschäume als thermisch optimierte Trägerstrukturen für die CO₂-Abscheidung aus Luft) aufgegriffen und auf das wirtschaftlich besonders perspektivreiche Anwendungsfeld DAC übertragen. In diesem Folgevorhaben wird zudem die im vorliegenden Projekt begonnene Modellierung des Desorptionsschritts fortgeführt, sodass eine kontinuierliche Weiterführung und Verwertung der Ergebnisse über das Projektende hinaus gesichert ist.

Der Adressatenkreis des Wissenstransfers umfasst dementsprechend mehrere KMU-relevante Nutzergruppen: Anlagen- und Apparatebauer als Umsetzer modularer Abscheideeinheiten, Anwender aus den mittelständisch geprägten Branchen Glas, Keramik und Feuerfest, Papier, Lebensmittel und Brauereien sowie thermische Abfallbehandlung, in denen niederwertige Abwärme häufig betriebsseitig verfügbar ist, ferner Betreiber von Biogasanlagen und Blockheizkraftwerken zur Erzeugung hochreiner CO₂-Produktströme sowie die heimische Adsorbensherstellung. Die zugrunde liegenden wissenschaftlich-technischen und wirtschaftlichen Verwertungspotenziale sind ausführlich in Kapitel 4 dargestellt.

Das aktualisierte Transferkonzept wird insgesamt als gut realisierbar eingeschätzt. Mit der experimentell validierten Auslegungsgrundlage, dem nachvollziehbar dokumentierten Festbett-Simulationsmodell und der techno-ökonomischen Bewertung liegen die für eine industrielle Umsetzung erforderlichen Bausteine vor. Die kontinuierliche Einbindung des projektbegleitenden Ausschusses, das bereits gestartete Folgevorhaben sowie der durch verschärfte Klimaziele, das stufenweise Auslaufen der kostenfreien Zertifikatszuteilung im EU-ETS und den CO₂-Grenzausgleichsmechanismus (CBAM) steigende Bedarf an wirtschaftlich tragfähigen

CO₂-Abscheideverfahren für mittlere Punktquellen stützen diese Einschätzung. Die im Einzelnen durchgeführten und nach Projektende geplanten Transfermaßnahmen sind im nachfolgenden Kapitel „Plan zum Ergebnistransfer in die Wirtschaft“ tabellarisch zusammengestellt.

6 Plan zum Ergebnistransfer in die Wirtschaft

Der bereits im Förderantrag vorgelegte Plan zum Ergebnistransfer in die Wirtschaft wurde während der gesamten Projektlaufzeit fortlaufend umgesetzt und fortgeschrieben. Die folgenden beiden Übersichten fassen die im Berichtszeitraum (01.04.2023 bis 31.12.2025) durchgeführten spezifischen Transfermaßnahmen sowie die nach Projektende vorgesehenen Maßnahmen zusammen. Zentrales und kontinuierlich genutztes Transferinstrument war der projektbegleitende Ausschuss, ergänzend erfolgte der Transfer über bilaterale Fachberatungen mit Industriepartnern, die Ausbildung wissenschaftlichen Nachwuchses, Veröffentlichungen sowie die Überführung zentraler Ergebnisse in ein direktes Folgevorhaben.

6.1 Durchgeführte Transfermaßnahmen (vom Projektstart bis zum Projektende)

Die folgende Übersicht dokumentiert die während der Projektlaufzeit durchgeführten spezifischen Transfermaßnahmen.

Tabelle 7: Durchgeführte spezifische Transfermaßnahmen in die Wirtschaft während der Projektlaufzeit.

Maßnahme	Ziel / Inhalt	Rahmen / Adressatenkreis	Datum / Zeitraum
Projektbegleitender Ausschuss (PA)	Fortlaufende Vorstellung und Diskussion der Projektergebnisse, Praxisabgleich und Priorisierung der weiteren Arbeiten	Drei PA-Sitzungen mit Vertretern aus Anlagen- und Apparatebau, Adsorbensherstellung und industrieller Anwendung (Kick-off, Zwischenstand, Abschluss)	16.08.2023; 10.07.2025; 18.12.2025
Bilaterale Fachberatung Corning GmbH	Fachlicher Austausch und Beratung zu Trägerstrukturen und Anwendungsperspektiven	Beratung und Besichtigung der Versuchsstände des Forschungsbereichs (Wiesbaden); Fachgespräch und Besichtigung im Keramikwerk (Kaiserslautern)	08.07.2024 (Wiesbaden); 04.02.2025 (Kaiserslautern)
Bilaterale Fachberatung Karl Steiger GmbH und DEIG Energietechnik-Insumma GmbH	Ganztägige fachliche Beratung zu Verfahren, Auslegung und Anwendungsperspektiven	Ganztägige Beratung im Videoformat	19.01.2024
Bilaterale Fachberatung DACMA GmbH	Austausch zum Anwendungspfad Direct Air Capture (DAC)	Kurze bilaterale Beratungsgespräche (Vertreterinnen L. Möller, N. Jensen)	Während der Projektlaufzeit
Bilaterale Fachberatung ETW Energietechnik GmbH	Beratung zu Anlagentechnik und Verwertungsperspektiven	Regelmäßige Beratungen mit Hr. H. Meyer (bis zu seinem Weggang aus dem Unternehmen)	Während der Projektlaufzeit
Ausbildung wissenschaftlichen Nachwuchses	Qualifizierung von Personal mit unmittelbar industrieverwertbarem Know-how	Masterarbeit (O. Yildizli) im Themenfeld des Vorhabens, Universität Duisburg-Essen	Während der Projektlaufzeit
Fachveröffentlichung	Transfer der Projektergebnisse in die Fachöffentlichkeit	Berry, A.: „CCS: Forschung trifft Praxis“, Filtrieren und Separieren, Ausgabe 06/2025, S. 30–31	2025

Beitrag im Tätigkeitsbericht des IUTA	Breiter Transfer der Vorhabensergebnisse in Wirtschaft und Öffentlichkeit	IUTA-Tätigkeitsbericht 2025: „Carbon Management im Mittelstand: Von Laborkonzepten zu industriellen Lösungen“	2025 (erschieden Anfang 2026)
Öffentlichkeitswirksamer Podcast-Beitrag	Wissenstransfer in eine breite Fachöffentlichkeit	Bathen, D.; Berry, A.; Grützner, T.; Seyfang, B.: „CO ₂ -Abscheidung aus der Atmosphäre“, Podcast „DeCarbon Cast“, Folge 41	17.10.2025
Kurzinformationen / Öffentlichkeitsarbeit	Breiter Transfer der Vorhabensergebnisse in Wirtschaft und Öffentlichkeit	Internetauftritt (www.iuta.de) und Broschüre „IUTA Aktuell“	Laufend

6.2 Geplante Transfermaßnahmen (nach Projektende)

Die folgende Übersicht fasst die nach Projektende vorgesehenen spezifischen Transfermaßnahmen zusammen.

Tabelle 8: Geplante spezifische Transfermaßnahmen in die Wirtschaft nach der Projektlaufzeit.

Maßnahme	Ziel / Inhalt	Rahmen / Adressatenkreis	Datum / Zeitraum
Schlussbericht	Öffentliche Bereitstellung der Forschungsergebnisse für Wirtschaft und Wissenschaft	Downloadbereich der Internetseite des IUTA (www.iuta.de)	Nach Freigabe des Schlussberichts (2026)
Weitere wissenschaftliche Veröffentlichung(en)	Vertiefter Ergebnistransfer in Wirtschaft und Wissenschaft	Geplanter Fachbeitrag in einer einschlägigen Fachzeitschrift (z. B. „Chemie Ingenieur Technik“)	2026
Überführung in das Folgevorbahn „DAC-Met-Foam“	Weiterführung und Vertiefung der Ergebnisse (wärmeleitfähige Metallschäume, Desorptionssimulation) sowie Übertragung auf das Anwendungsfeld Direct Air Capture	Vom projektbegleitenden Ausschuss unterstütztes IGF-Folgevorbahn	Ab 2026 / laufend
Universitäre Lehre	Bildung künftiger Entscheidungsträger und Fachkräfte	Vertiefungsfächer Verfahrens-, Umwelt- und Energietechnik der Universität Duisburg-Essen	Laufend
Wissenstransfer in Arbeitskreisen und Gremien	Diskussion der Ergebnisse mit Entwicklern und Wissenschaftlern	Einschlägige Arbeitskreise und Netzwerke (z. B. VDI-KRdL, Forschungsnetzwerke Energie/Umwelt)	Laufend
Kurzinformationen / Öffentlichkeitsarbeit	Fortlaufender breiter Transfer der Ergebnisse	Internetauftritt (www.iuta.de), Broschüre „IUTA Aktuell“ und Tätigkeitsbericht des IUTA	Laufend
Direkte Beratung interessierter Unternehmen	Unterstützung bei Projektierung, Auslegung und wirtschaftlicher Bewertung	Bilaterale Anfragen von KMU, Anlagenbauern und Anwendern	Nach Bedarf

Die Realisierbarkeit der noch ausstehenden Transfermaßnahmen wird als hoch eingeschätzt.

7 Literaturverzeichnis

- [1] Yildizli, Oktan, „Entwicklung und Erprobung eines effizienten CO₂-Adsorptionsverfahrens auf der Basis aminfunktionalisierter Adsorbentien“, Masterarbeit, Duisburg-Essen, Duisburg.
- [2] D. R. Garg und D. M. Ruthven, „Linear driving force approximations for diffusion controlled adsorption in molecular sieve columns“, *AIChE J.*, Bd. 21, Nr. 1, Art. Nr. 1, Jan. 1975, doi: 10.1002/aic.690210137.
- [3] S. Sircar und J. R. Hufton, „Why Does the Linear Driving Force Model for Adsorption Kinetics Work?“, *Adsorption*, Bd. 6, Nr. 2, S. 137–147, Juni 2000, doi: 10.1023/A:1008965317983.
- [4] S. Sircar, „Linear-driving-force model for non-isothermal gas adsorption kinetics“, *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1 Phys. Chem. Condens. Phases*, Bd. 79, Nr. 4, S. 785–796, Jan. 1983, doi: 10.1039/F19837900785.
- [5] M. Suzuki, *Adsorption engineering*. in Chemical engineering monographs, no. vol. 25. Tokyo : Amsterdam ; New York: Kodansha ; Elsevier, 1990.
- [6] R. T. Driessen, M. J. Bos, und D. W. F. Brilman, „A Multistage Fluidized Bed for the Deep Removal of Sour Gases: Proof of Concept and Tray Efficiencies“, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Bd. 57, Nr. 11, S. 3866–3875, März 2018, doi: 10.1021/acs.iecr.7b04891.
- [7] Y. Qiao, „Energetische Integration der CO₂-Gewinnung direkt aus der Luft und seiner Methanisierung mit erneuerbarem Wasserstoff“, 2022, Zugegriffen: 20. Mai 2026. [Online]. Verfügbar unter: <http://hdl.handle.net/2003/41008>
- [8] E. N. Fuller, P. D. Schettler, und J. Calvin. Giddings, „NEW METHOD FOR PREDICTION OF BINARY GAS-PHASE DIFFUSION COEFFICIENTS“, *Ind. Eng. Chem.*, Bd. 58, Nr. 5, S. 18–27, Mai 1966, doi: 10.1021/ie50677a007.
- [9] P. S. Sauter, „Mass transfer in Direct Air Capture sorbents“.
- [10] R. Veneman, N. Frigka, W. Zhao, Z. Li, S. Kersten, und W. Brilman, „Adsorption of H₂O and CO₂ on supported amine sorbents“, *Int. J. Greenh. Gas Control*, Bd. 41, S. 268–275, Okt. 2015, doi: 10.1016/j.ijggc.2015.07.014.
- [11] BDEW, „BDEW-Strompreisanalyse April 2026“. Zugegriffen: 18. Juni 2026. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.bdew.de/service/daten-und-grafiken/bdew-strompreisanalyse/>
- [12] „trawa - Ganzheitliche Energieversorgung für Unternehmen | Kosten senken und Klimaziele erreichen“. Zugegriffen: 18. Juni 2026. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.trawa.de/en/blog/industriestrom-preis-entschluesst>
- [13] „Umlagen auf Strom 2026 [aktueller Überblick]“, wattline. Zugegriffen: 18. Juni 2026. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.wattline.de/energiewissen/strom-umlagen/>
- [14] „Data Center Waste Heat Recovery 2026: Economics & Case Studies“. Zugegriffen: 18. Juni 2026. [Online]. Verfügbar unter: <https://energy-solutions.co/articles/sub/data-center-waste-heat-district-heating.html>
- [15] M. M. Jaffar u. a., „Comparative techno-economic analysis of the integration of MEA-based scrubbing and silica PEI adsorbent-based CO₂ capture processes into cement plants“, *J. Clean. Prod.*, Bd. 414, S. 137666, Aug. 2023, doi: 10.1016/j.jclepro.2023.137666.

8 Anhang

Berechnungsgrundlagen, Annahmen und Rechengang (Kurzfassung) zu Kapitel 1.8 „Wirtschaftlichkeitsberechnung“

Die nachfolgende Übersicht fasst die getroffenen Annahmen (Tabelle 7) und den Rechengang der wesentlichen Größen (Tabelle 8) zusammen. Mess- und Literaturwerte sind als solche gekennzeichnet; alle übrigen Werte sind begründete Annahmen für die überschlägige Hochrechnung. Umrechnung: 1 kJ/kg CO₂ = 1 MJ/t CO₂ und 1 MWh = 3.600 MJ, somit MWh/t = (kJ/kg) ÷ 3.600.

Tabelle 9: Wesentliche Eingangsgrößen und Annahmen der Wirtschaftlichkeitsabschätzung.

Größe / Parameter	Wert	Quelle / Anmerkung
Gasvolumenstrom (Referenz)	1.000 Nm ³ /h	Vergleichbarkeit mit Abschätzung 2016
Jährliche Betriebszeit	8.000 h/a	Annahme
CO ₂ -Gehalt Rauchgas	9,3 Vol.-%	gemessen, AP 7 (Brennwertkessel)
Abscheide-/Rückgewinnungsrate	80 %	durch Messungen untermauerte Schätzung
Jahresabscheidemenge	≈ 1.180 t CO ₂ /a	berechnet
CO ₂ -Aufnahme je Zyklus	10,5 g	gemessen, AP 7 (Cyclic Steady State)
Trockenmasse Adsorbens	180,8 g	Einwaage (trocken befüllt)
Zyklische Arbeitskapazität	1,32 mol/kg (58 g/kg)	berechnet; Veneman 2015 ≈ 1,4
Wärmekapazität cp (Lewatit)	1,5 kJ/(kg·K)	Veneman et al. 2015 [10]
CO ₂ -Desorptionsenthalpie	75 – 78 kJ/mol	Veneman et al. 2015 [10]
Temperaturhub ΔT	58 K	AP 7 (≈ 42 → 100 °C)
Thermischer Energiebedarf (B / C)	1,3 / 0,7 MWh/t	konservativ / wärmeintegriert
Elektrischer Energiebedarf (B / C)	0,6 / 0,35 MWh/t	skaliert aus 2016 / optimiert
MEA-Reboiler-Wärmebedarf	1,0 MWh/t (3,6 GJ/t)	Stand der Technik
Industriestrompreis 2026	167 €/MWh (16,7 ct/kWh)	BDEW 2026 [11]
Preis Abwärme / Dampf	25 €/MWh	oberer Rand 12–30 €/MWh [13],[14]
Adsorbensmenge / -preis	13.600 l / 11,75 €/l	Scale-up 2016 / Großmenge (50 %)
Adsorbens-Standzeit	5 a	Annahme (vgl. AP 7)
Investitionskosten	1,37 Mio. €	2016 + 20 %
Annuität (Abschr./Wartung/Sonst.)	10 % / 4 % / 1 % p.a. (= 15 %/a)	Annahme

Tabelle 10: Rechengang der wesentlichen Größen (Beispielwerte für Szenario B).

Größe	Berechnung	Ergebnis
Jahresabscheidemenge	1.000 Nm ³ /h × 0,093 × 1,977 kg/Nm ³ × 0,80 × 8.000 h	≈ 1.180 t/a
Arbeitskapazität	10,5 g ÷ 180,8 g (÷ 44,01 g/mol)	58 g/kg = 1,32 mol/kg
Sensibelwärme	1,5 kJ/(kg·K) × 58 K ÷ 0,0581 kg/kg ÷ 3.600	0,42 MWh/t

Desorptionseenthalpie	$78 \text{ kJ/mol} \div 0,04401 \text{ kg/mol} \div 3.600$	0,49 MWh/t
Restfeuchte-Desorption	$0,25 \text{ GJ/t} \div 3,6$	0,07 MWh/t
Thermischer Bedarf (konservativ)	$0,42 + 0,49 + 0,07 = 0,98 + \text{Zuschlag}$	$\approx 1,3 \text{ MWh/t}$
Energiekosten Strom (B)	$0,6 \text{ MWh/t} \times 167 \text{ €/MWh}$	100 €/t
Energiekosten Wärme (B)	$1,3 \text{ MWh/t} \times 25 \text{ €/MWh}$	33 €/t
Betriebsmittel (Adsorbens)	$13.636 \text{ l} \times 11,75 \text{ €/l} \div 5 \text{ a} \div 1.180 \text{ t}$	27 €/t
Investitions-/Fixkosten	$1,37 \text{ Mio. €} \times 15 \%/\text{a} \div 1.180 \text{ t}$	175 €/t
Gesamtkosten (Szenario B)	$163 \text{ (Energie)} + 27 + 175$	365 €/t