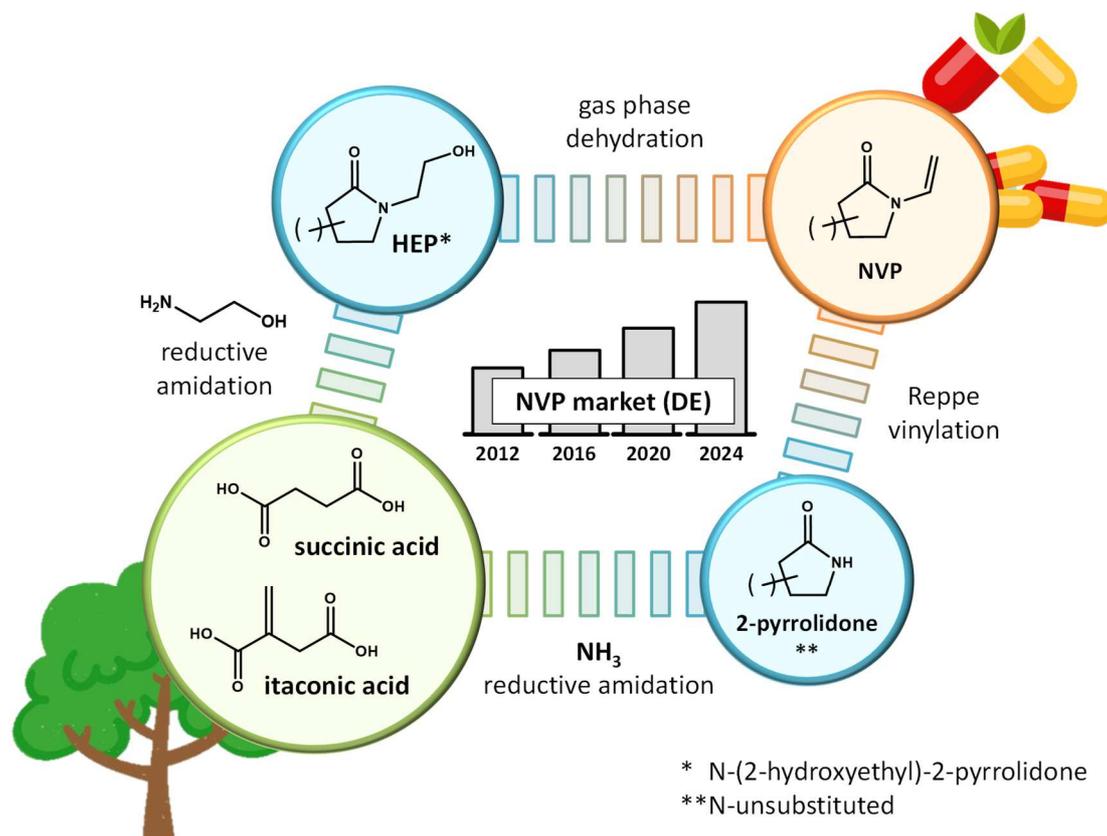


# Prozesssimulation zur Produktion biogener Pyrrolidonmonomere

## Projektarbeit im Bereich Prozessdesign



**Abbildung 1:** Vorgeschlagene Prozesse zur Produktion von Pyrrolidonmonomeren ähnlich dem N-Vinyl-2-pyrrolidon (NVP) ausgehend von biogenen Carbonsäuren.

## Unser Profil

Die Arbeitsgruppe Energiesystemtechnik beschäftigt sich mit der Methodenentwicklung zur rechnergestützten Analyse und Optimierung von Energiesystemen sowie der energetischen und ökologischen Bewertung industrieller Produktionsprozesse. Zur ökologischen Bewertung von Produkten wird die Methode Ökobilanz (engl. Life Cycle Assessment) verwendet.

## Hintergrund

Polyvinylpyrrolidon (PVP) ist ein etabliertes Spezialpolymer, das aufgrund seiner günstigen Eigenschaften (wasserlöslich, ungiftig, farblos) vielseitige Anwendungen, insbesondere in der Pharma- und Kosmetikindustrie findet. Das entsprechende Monomer (N-Vinyl-2-Pyrrolidon = NVP) ist historisch gesehen ein Folgeprodukt der Acetylenchemie nach Walter Reppe (BASF) und wird bis heute in einer Reihe von Gasphasenreaktionen aus fossilen Rohstoffen produziert. In aktuellen Forschungsprojekten

Arbeitsbeginn: ab sofort  
weitere Informationen unter [www.ltt.rwth-aachen.de](http://www.ltt.rwth-aachen.de)

Benedikt Winter, M. Sc  
[benedikt.winter@ltt.rwth-aachen.de](mailto:benedikt.winter@ltt.rwth-aachen.de)

konnte jedoch gezeigt werden, dass die Chemikaliengruppe der Pyrrolidone auch von biogenen Plattformchemikalien abgeleitet werden kann. Insbesondere wurden an der RWTH zwei neue Prozessvorschläge zur Herstellung von Monomeren ähnlich dem NVP ausgehend von Carbonsäuren (z.B. Bernsteinsäure und Itakonsäure) entwickelt und im Labormaßstab getestet.<sup>[1]</sup> Die technische Umsetzung dieser Produktionswege könnte einen Beitrag zur Nutzung nachwachsender Rohstoffe in der chemischen Industrie und damit zur Umsetzung der Kohlenstoffkreislaufwirtschaft leisten. Um zu bewerten, ob die bio-basierte Herstellung von Pyrrolidonmonomeren ökonomisch und ökologisch vielversprechend ist, müssen Stoff- und Energiebedarfe der neuen Prozesse berechnet werden. Diese Bedarfe können mit Hilfe einer Prozesssimulation ermittelt werden.

[1] a) Y. Louven, K. Schute und R. Palkovits, *ChemCatChem* **2018**, *11*, 439-442. b) M. O. Haus, Y. Louven and R. Palkovits, *GreenChem* **2019** (accepted).

### **Aufgabenstellung**

In eurer Projektarbeit werdet ihr ein Prozessmodell zur Herstellung von Pyrrolidonen auf Basis von Itakon- und Bernsteinsäure entwickeln. Dazu arbeitet ihr euch zunächst in die Grundlagen des neuen Prozesses ein und erstellt ein Aspen-Modell des Prozesses. Zur Erstellung des Aspen Modelles müsst ihr euch selbständig Gedanken über Möglichkeiten zur Aufreinigung von Zwischen- und Hauptprodukten machen. Im Anschluss an die Prozesssimulation werdet ihr die Ergebnisse der Simulation verwenden um den Prozess mit Hilfe des Life Cycle Assessments ökologisch zu bewerten.

### **Dein Profil:**

- Studienrichtung Maschinenbau/Wirt.-Ing. mit Vertiefung Verfahrenstechnik oder vergleichbar
- Interesse am Forschungsbereich Prozessentwicklung
- Selbstständiges Arbeiten an komplexen Themengebieten

### **Unser Angebot**

Ihr erhaltet im Rahmen dieser Projektarbeit tiefe Einblicke in die Prozessmodellierung. Die Arbeit findet in Zusammenarbeit mit dem ITMC statt. Dadurch erhaltet ihr die Chance in einem interdisziplinären Team die frühen Stadien des Prozessdesigns kennenzulernen. Wenn Du Interesse hast, melde dich bitte per Mail mit Lebenslauf und aktueller Notenübersicht.