Die chemische Industrie im Wandel

Mit Algorithmen und Biomasse zu nachhaltigen Prozessen

Kleidung, Cremes und Kunststoffe – viele Alltagsprodukte stammen aus der chemischen Industrie. Da die meisten Chemikalien noch immer auf Erdölbasis unter hohen CO_2-Emissionen hergestellt werden, ist ein Umstieg auf erneuerbare Rohstoffe wie Biomasse nötig. Zwar können Bioraffinerien Chemikalien aus Biomasse gewinnen, aber die dafür benötigten Lösungsmittel sind oft selbst erdölbasiert und hochgiftig. Letztendlich entscheiden die eingesetzten Lösungsmittel, ob ein Bioraffinerieprozess in der Industrie angewandt wird, da sie auch die Ausbeute und Kosten maßgeblich beeinflussen. In meiner Forschung habe ich computergestützte Methoden entwickelt, um die Lösungsmittelauswahl mittels Quantenchemie und künstlicher Intelligenz gezielt nach gewünschten Eigenschaften zu optimieren. Damit konnte ich nachhaltige Bioraffinerieprozesse für Mikroalgen und Holz unter Einsatz „grüner“ Lösungsmittel entwickeln, welche Grundbausteine für die Produktion von Bio-Plastik, Fettsäuren und Pigmenten liefern.

Laura König-Mattern hat an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg im Fachgebiet Verfahrenstechnik promoviert.

Laura König-Mattern

Deutscher Studienpreis
2. Preis Sektion Natur- und Technikwissenschaften

Körber Stiftung

Der vorliegende Beitrag wurde beim Deutschen Studienpreis 2025 mit dem 2. Preis in der Sektion Natur- und Technikwissenschaften ausgezeichnet. Er beruht auf der 2024 an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg eingereichten Dissertation „Systematic Solvent Screening and Design for Biomass Fractionation Processes“ von Dr. Laura König-Mattern.

Die chemische Industrie im Wandel:

Mit Algorithmen und Biomasse zu nachhaltigen Prozessen

Warum eine Transformation der chemischen Industrie notwendig ist

Im Alltag verwenden wir ganz selbstverständlich eine Vielzahl verschiedener Chemikalien – sei es Nylon in Kleidung, Pigmente und Emulgatoren in Kosmetika, Tenside in Waschmitteln, Wirkstoffe in Medikamenten, Treibstoffe oder Verpackungen. Für die Herstellung all dieser Produkte werden sowohl Basis- als auch Feinchemikalien benötigt. Die chemische Industrie ist für etwa 15 % der deutschen CO_2-Emissionen verantwortlich, und rund 90 % der dort verarbeiteten Rohstoffe stammen aus fossilen Quellen, insbesondere Erdöl und Erdgas.[1] Bis zum Ende dieses Jahrhunderts werden diese Quellen jedoch weitgehend erschöpft sein. Ein Umstieg auf andere fossile Quellen, wie Kohle, muss aufgrund der damit verbundenen schädlichen CO_2-Emissionen vermieden werden. Die Folgen einer starken Abhängigkeit von fossilen Rohstoffen wurden uns spätestens durch die Gaskrise Ende 2022 vor Augen geführt, die durch den Angriffskrieg Russlands auf die Ukraine ausgelöst wurde: Sie führte nicht nur zu drastisch steigenden Heizkosten, sondern auch zum Ausfall wichtiger Rohstoffe für die chemische Industrie. So musste die Produktion von Ammoniak, das Erdgas als Rohstoff benötigt, gedrosselt oder in einigen Fällen sogar komplett gestoppt werden – die Produktion kam zum Erliegen, und zahlreiche Arbeitsplätze waren in Gefahr.[2, 3] Um diese Abhängigkeit und damit sozioökonomische wie auch ökologische Risiken zu verringern, ist ein tiefgreifender Wandel in der chemischen Industrie erforderlich, der die Umstellung der Rohstoff- und Energieversorgung auf erneuerbare Alternativen – auch als Defossilisierung bezeichnet – umfasst. Bislang werden im gesellschaftlichen Diskurs insbesondere die energetischen Aspekte der Defossilisierung diskutiert, während die Defossilisierung der Rohstoffströme noch eine untergeordnete Rolle spielt.

Bioraffinerien: Wie die Wahl des Lösungsmittels den Prozess bestimmt

Biomasse stellt eine erneuerbare Kohlenstoffquelle dar und kann zur Produktion einer ganzen Bandbreite verschiedener Chemikalien und Materialien eingesetzt werden.

Da die Nutzung von Biomasse mehreren Nutzungskonflikten ausgesetzt ist, wie zur Herstellung von Nahrung, Tierfutter, Möbeln, aber auch für die energetische Nutzung, gilt Biomasse als knappe Ressource.[4, 5] Daher muss sie auch bei der Herstellung von Chemikalien so ressourceneffizient wie möglich genutzt werden.

Um das volle Potenzial der für die Produktion von Chemikalien vorhandenen Biomasse auszuschöpfen, habe ich in meiner Doktorarbeit an der Entwicklung und Verbesserung neuartiger „Zero-Waste"-Bioraffinerieprozesse geforscht. Das Ziel dieser Bioraffinerieprozesse ist es, die eingesetzte Biomasse komplett in ihre chemischen Grundbausteine zu zerlegen und diese wiederum als Ausgangsstoffe für die Herstellung verschiedener biobasierter Chemikalien zu nutzen. In Analogie zu Erdölraffinerien entstehen dabei vielfältige Produkte – jedoch auf Basis nachwachsender Rohstoffe. Im Gegensatz zu heutigen Bioraffinerieprozessen, die günstige, aber giftige Lösungsmittel benötigen, möchte ich ausschließlich „grüne" Lösungsmittel einsetzen.

Aus prozesstechnischer Sicht findet in einer Bioraffinerie ein Separationsprozess statt, die sogenannte Biomassefraktionierung. Dieser Separationsprozess besteht aus einer Abfolge von Trenneinheiten, die die Grundbausteine aus der Biomasse extrahieren und das extrahierte Gemisch weiter auftrennen. Für diese Trennungen werden in der Regel Lösungsmittel eingesetzt. In Abhängigkeit der Polarität des gewählten Lösungsmittels können jeweils andere Zielmoleküle extrahiert werden. Nach Zugabe eines oder mehrerer weiterer Lösungsmittel bilden sich, ähnlich wie bei der Mischung von Wasser und Öl, zwei flüssige Phasen aus. Die extrahierten Zielmoleküle haben aufgrund ihrer unterschiedlichen chemischen Strukturen jeweils unterschiedliche Affinitäten, sich in einer dieser Phasen anzulagern. Dies erlaubt eine weitere Auftrennung des Gemischs. Häufig eingesetzte Lösungsmittel sind zwar günstig, aber oft selbst erdölbasiert und äußerst giftig. Die Auswahl der Lösungsmittel ist also der Schlüssel zur Entwicklung und Verbesserung neuer Bioraffinerie-Prozesse.

Prinzipiell kann jedes Molekül, das unter Prozessbedingungen flüssig ist und die gewünschten Zielfraktionen effektiv löst, als Lösungsmittel geeignet sein. In einem vollkommen nachhaltigen Bioraffinerieprozess sollte das gewählte Lösungsmittel jedoch weder giftig noch krebserregend sein und keine Gefahr für die Prozesssicherheit oder die Umwelt darstellen. Ein ideales Lösungsmittel muss daher hohe

Umwelt-, Gesundheits- und Sicherheitsstandards erfüllen. Zudem ist es aus ökologischer und ökonomischer Sicht essenziell, das Lösungsmittel nach dem Prozess weitgehend zurückzugewinnen. Der dafür erforderliche Energieaufwand hängt maßgeblich von den physikalisch-chemischen Eigenschaften des Lösungsmittels ab. Auf diese Weise hat die Wahl des Lösungsmittels enorme Auswirkungen auf den Gesamtprozess. Schätzungen zufolge existieren rund 10^{18} bis 10^{20} verschiedene Moleküle, die eine ähnliche Größe wie typische Lösungsmittel haben – das sind mehr Moleküle, als es Sterne in der Milchstraße gibt. Daher lauten die **zentralen Fragen meiner Dissertation: Wie findet man in Anbetracht dieses enormen Suchraums das optimale Lösungsmittel für jeden Trennschritt in einer Bioraffinerie? Und wie können wir diese Erkenntnisse nutzen, um effiziente Bioraffinerieprozesse zu entwickeln?**

Experimentelle Methoden sind aufgrund begrenzter Zeit und Ressourcen nur für eine limitierte Anzahl von Versuchen einsetzbar, da nicht jedes Molekül einzeln getestet werden kann. Zudem drängt die Zeit für die Transformation der chemischen Industrie, da die heutzutage eingesetzten fossilen Rohstoffe voraussichtlich bis zum Ende dieses Jahrhunderts aufgebraucht sein werden. Aus diesem Grund müssen Experimente gezielt und auf die vielversprechendsten Lösungsmittel fokussiert durchgeführt werden. Computergestützte Methoden ermöglichen eine effiziente Durchsuchung des riesigen Raums potenzieller Lösungsmittelmoleküle und liefern präzise Vorhersagen zu deren Löslichkeit und Trenneffizienz. Die Kombination aus computerbasierten und experimentellen Methoden erlaubt eine besonders effektive Suche nach den perfekten Lösungsmitteln.

In meiner Doktorarbeit habe ich zwei computer-basierte Methoden für die Lösungsmittelauswahl in Bioraffinerien entwickelt, diese für Mikroalgen- und Lignocellulose-Bioraffinerien angewendet und anschließend im Experiment getestet. Dabei kann die Auswahl eines geeigneten Lösungsmittels zunächst als mathematisches Optimierungsproblem formuliert werden, welches mithilfe computergestützter Methoden gelöst wird. Ein sogenanntes Lösungsmittelscreening ermöglicht es, eine Datenbank mit über 8.000 Molekülen gezielt nach passenden Eigenschaften zu durchsuchen. Während spezielle Modelle Umwelt, Gesundheits- und Sicherheitsaspekte bewerten, berechnen quantenchemische Verfahren die Löslichkeit der Zielfraktionen. Auf Basis dieser Berechnungen werden ungeeignete Lösungsmittel aussortiert, sodass sich die anschließende experimentelle Arbeit auf die vielversprechendsten Kandidaten konzentrieren kann – ein effizienter Ansatz, der Zeit und Ressourcen spart.

Ein weiterer innovativer Ansatz ist das Lösungsmitteldesign, bei dem geeignete Molekülstrukturen direkt am Computer entwickelt werden. Anders als beim

Screening wird beim Design nicht aus bestehenden Lösungsmitteln ausgewählt, sondern es werden gezielt neue Strukturen mit den gewünschten Eigenschaften entworfen. Der Prozess beginnt mit einer anfänglichen, noch nicht optimierten Lösungsmittelstruktur, die durch zufällige Mutationen schrittweise verändert wird. Nach dem Prinzip des „Survival of the fittest“ setzen sich jene Lösungsmittel durch, deren strukturelle Anpassungen zu einer verbesserten Performance führen. KI-gestützte Modelle bewerten dabei kontinuierlich die Leistungsfähigkeit der potenziellen Lösungsmittel, sodass ihre chemische Struktur schrittweise den gewünschten Zielkriterien angepasst wird.

Das Lösungsmittelscreening kann zwar die Lösungsmittelstruktur nicht exakt auf den spezifischen Prozess zuschneiden, ist jedoch in der Lage, geeignete Lösungsmittel zu identifizieren, die in industriell relevanten Mengen kommerziell verfügbar sind. Diese Methode bietet eine gute Möglichkeit, neue Bioraffinerieprozesse zu entwickeln, die schnell auf den industriellen Maßstab übertragen werden sollen. Für bereits bestehende Prozesse, bei denen die Lösungsmittelauswahl aufgrund komplexer Anforderungen stark eingeschränkt ist, kann es jedoch vorkommen, dass keine passenden Kandidaten in der Datenbank gefunden werden können. In solchen Fällen stellt das Lösungsmitteldesign einen besseren Ansatz dar, da die chemische Struktur der Lösungsmittel gezielt auf die Prozessbedingungen abgestimmt wird. Mit dem Design können also ganz neue, bislang unbekannte Lösungsmittelstrukturen entdeckt werden. Während dies aus wissenschaftlicher Sicht unheimlich spannend ist, kann es jedoch sein, dass diese Lösungsmittel industriell noch nicht in ausreichender Menge verfügbar sind oder möglicherweise erst synthetisiert werden müssen. In meiner Doktorarbeit habe ich beide Methoden auf verschiedene Arten von Biomasse – Mikroalgen und Holz – angewendet und mit den ausgewählten Lösungsmitteln neue Bioraffinerieprozesse mithilfe von Experimenten entwickelt.

Innovativer Bioraffinerie-Ansatz für die Fraktionierung feuchter Algenbiomasse

Mikroalgen sind einzellige Mikroorganismen mit einer Größe von etwa 25 µm, die unter extremen Bedingungen wie intensiver Sonneneinstrahlung und hohen Salzkonzentrationen gedeihen können. Sie werden in Bioreaktoren kultiviert und können somit auch auf nicht landwirtschaftlich nutzbaren Flächen wachsen. Dadurch steht die Mikroalgenkultivierung nicht mit dem Anbau von Pflanzen für die Lebensmittelproduktion in Konkurrenz. Neben hochpreisigen, mehrfach ungesättigten Omega-6-Fettsäuren und antioxidativen Pigmenten, die als Nahrungsergänzungsmittel eingesetzt werden, enthalten sie auch Proteine und Kohlenhydrate, die für die Herstellung biobasierter Chemikalien genutzt werden können.

Trotz ihres großen Potenzials gibt es bislang keine industrielle Bioraffinerie, die eine effiziente Separation dieser Komponenten ermöglicht. Insbesondere die Trennung der Pigmente und Fettsäuren ist wirtschaftlich interessant, da sie die hochpreisigsten Inhaltsstoffe der Biomasse darstellen. Diese Trennung gestaltet sich aufgrund ähnlicher Polaritäten jedoch als äußerst schwierig und erfordert häufig toxische oder kostspielige Lösungsmittel. Zudem sind bestehende Mikroalgen-Bioraffinerien meist auf teures Equipment und einen energieintensiven Trocknungsschritt angewiesen, was die wirtschaftliche Rentabilität erheblich mindert.

In meiner Doktorarbeit habe ich mithilfe des entwickelten computerbasierten Lösungsmittelscreenings gezielt nach Lösungsmitteln gesucht, die die Zielkomponenten aus der Biomasse effizient extrahieren und weiter auftrennen können.[6] Dabei erwies sich 2-Butanol als besonders vielversprechendes, ungiftiges Lösungsmittel. Dieses Lösungsmittel ist bis zu einer bestimmten Konzentration mit Wasser mischbar. Überschreitet der Wasseranteil jedoch eine kritische Schwelle, bilden sich zwei separate Flüssigphasen – ähnlich wie bei der Mischung von Öl und Wasser. Diese Eigenschaft ermöglicht einen innovativen Extraktionsmechanismus: Während der Extraktionsphase nimmt 2-Butanol Wasser aus der feuchten Biomasse auf und löst gleichzeitig wertvolle Inhaltsstoffe heraus. Durch die gezielte Zugabe von Wasser bilden sich anschließend zwei getrennte Flüssigphasen, wodurch sich die extrahierten Stoffe effizient auftrennen lassen. Während polare Moleküle wie Kohlenhydrate in die wasserreiche Phase übergehen, reichern sich unpolare Moleküle wie Fette in der lösungsmittelreichen Phase an.

Experimente haben zudem gezeigt, dass sich Fette bei bestimmten 2-Butanol/Wasser-Verhältnissen deutlich einfacher aus der Biomasse extrahieren lassen als Pigmente. Dieses Phänomen ermöglicht die Trennung aller in der Alge vorkommender chemischer Grundbausteine und erlaubt einen völlig neuen Bioraffinerie-Ansatz. Im ersten Extraktionsschritt werden Fette und ein Teil der Kohlenhydrate aus der Algenbiomasse herausgelöst. Durch die anschließende Zugabe von Wasser und die Ausbildung zweier flüssiger Phasen lassen sich diese Fraktionen voneinander trennen. Im zweiten Extraktionsschritt werden die Pigmente sowie die übrigen Kohlenhydrate extrahiert und ebenfalls durch Wasserzugabe separiert. Die Proteine verbleiben als fester Rückstand in der Biomasse und können anschließend weiterverarbeitet werden. Auf diese Weise können Proteine, Kohlenhydrate und sogar die hochpreisigen Pigmente und Fettsäuren voneinander getrennt werden. Da dieser Fraktionierungsansatz ohne vorherige Trocknung, ohne toxische Lösungsmittel und mithilfe von einfachstem Equipment wie einem Becherglas bei milden Prozessbedingungen durchgeführt werden kann, ist er attraktiv für eine zukünftige industrielle Anwendung.[7]

Chemikalien aus Holz: Designer-Lösungsmittel für eine nachhaltige Bioraffinerie

Lignocellulose ist die größte Biomassequelle auf unserem Planeten und kommt in allen Landpflanzen sowie vielen Meerespflanzen vor. Für die chemische Nutzung sind insbesondere Restholz, Sägemehl, Stroh und andere Restströme von Interesse, da ihre Verwertung keine zusätzliche Abholzung erfordert und keine weiteren landwirtschaftlichen Flächen beansprucht. In Lignocellulose-Bioraffinerien wird die Biomasse in ihre drei Hauptbestandteile – Cellulose, Hemicellulose und Lignin – aufgetrennt. Anschließend kann Cellulose für die Papierherstellung oder die Produktion von Bioethanol genutzt werden, während Hemicellulose-Zucker Ausgangsstoffe für die Herstellung von Bioplastik darstellen. Lignin, ein komplexes Biopolymer, besteht aus aromatischen Untereinheiten, deren Zusammensetzung je nach Pflanzenart variiert. Auch der verwendete Extraktionsprozess beeinflusst die Struktur des Lignins erheblich.

Mithilfe eines speziellen Bioraffinerieprozesses, namens Aldehyd-gestützte Fraktionierung, kann Lignocellulose effektiv in seine drei Grundbausteine gespalten werden.[8] Dabei wird das eingesetzte Holz mehrere Stunden lang mit einem Lösungsmittel, einer Säure und einem Aldehyd behandelt. Das Aldehyd reagiert mit dem Lignin und schützt es vor unerwünschten Abbaureaktionen. Im Gegensatz zu anderen Bioraffinerieprozessen kann das stabilisierte Lignin anschließend mit hohen Ausbeuten in seine aromatischen Untereinheiten zerlegt werden. Die gewonnenen Lignin-Untereinheiten ähneln strukturell Molekülen wie Benzin und sind wichtige biobasierte Plattformchemikalien. Trotz der ausgeklügelten chemischen Behandlung hat dieser Prozess einen entscheidenden Nachteil: Er erfordert die Verwendung von Dioxan, einem toxischen und krebserregenden Lösungsmittel. In meiner Doktorarbeit habe ich mithilfe computergestützter Methoden nach umweltfreundlichen Alternativen für dieses Lösungsmittel gesucht.

Dabei kam zunächst das entwickelte Lösungsmittelscreening zum Einsatz. Diese Untersuchung identifizierte zahlreiche Lösungsmittel mit hoher Ligninlöslichkeit, die in den Materialwissenschaften Anwendung finden könnten. Für die Aldehyd-gestützte Ligninfraktionierung war jedoch kein passendes Lösungsmittel vorhanden, da keines stabil gegenüber Säuren und Aldehyden war.[9]

Um ein Lösungsmittel zu finden, das unter den genannten Bedingungen stabil bleibt und dennoch effizient Lignin extrahieren kann, habe ich die im Rahmen meiner Doktorarbeit entwickelte Lösungsmittel-Designmethode angewendet. Diese Designmethode habe ich mit einem sogenannten Graph Neural Network kombiniert,

welches einen molekularen Fingerabdruck des Lösungsmittels generiert, um die Ligninlöslichkeit vorherzusagen. Auf Basis der Löslichkeitsvorhersagen optimiert der Designalgorithmus die molekulare Struktur potenzieller Lösungsmittel gezielt, um eine maximale Ligninlöslichkeit zu gewährleisten. Des Weiteren wurde die für den Bioraffinerieprozess essenzielle Säure- und Aldehydstabilität in die Optimierung der Lösungsmittelstruktur mit einbezogen. Auch Umweltkriterien wurden bei der Lösungsmittelauswahl beachtet. Durch diese computergestützte Methode konnte ich völlig neue Lösungsmittel entdecken, die auch experimentell eine außergewöhnlich hohe Ligninlöslichkeit zeigten. Zum Vergleich: Die Löslichkeit von Salz in Wasser wird mit 37 Ma.% als hoch eingestuft, während die in meiner Doktorarbeit entwickelten Lösungsmittel Ligninlöslichkeiten von bis zu 60 Ma.% erreichten. Diese Lösungsmittel sind besonders vielversprechend für die Herstellung von ligninbasierten Filmen, Beschichtungen oder Nanopartikeln und wurden zuvor in keiner wissenschaftlichen Studie für die Auflösung von Lignin beschrieben.

Darüber hinaus wurden Lösungsmittel designt, die nicht nur Lignin effizient extrahieren, sondern auch unter den Prozessbedingungen stabil bleiben. Diese wurden in der Aldehyd-gestützten Lignocellulosefraktionierung getestet. Das extrahierte Lignin konnte anschließend erfolgreich in seine aromatischen Untereinheiten zerlegt werden, die für die nachhaltige Produktion von Benzin-artigen Molekülen nötig sind. Die erzielte Ausbeute der Untereinheiten lag zwar leicht unter der des Vergleichslösungsmittels Dioxan, jedoch stellen die designten Lösungsmittel ein deutlich geringeres Risiko für die Prozesssicherheit, für die Umwelt und die Gesundheit dar – eine wichtige Verbesserung des Prozesses, auch wenn sie mit einer geringfügigen Einbuße der Ausbeute einhergeht.[10]

Bioraffinerien an der Schnittstelle von Wissenschaft, Industrie und Politik

In meiner Doktorarbeit konnte ich zeigen, dass innovative Bioraffinerieprozesse für Mikroalgen und Lignocellulose mithilfe intelligenter Algorithmen in kürzester Zeit entwickelt werden können. Die Beschleunigung durch diese Methoden ist angesichts der dringenden Notwendigkeit der Defossilisierung besonders wichtig, da fossile Ressourcen in naher Zukunft zunehmend erschöpft sein werden. **Die in meiner Doktorarbeit entwickelten Bioraffinerieprozesse liefern chemische Grundbausteine für die Herstellung von benzinartigen Aromaten und biobasiertem Kunststoff.** Auch wertvolle Feinchemikalien, wie essenzielle Fettsäuren, die für die Herstellung von Säuglingsnahrung benötigt werden, oder Pigmente für die Lebensmittel- und Kosmetikindustrie, können auf Grundlage der entwickelten

Prozesse hergestellt werden. Auf diese Weise tragen die entwickelten Algorithmen zu nachhaltigen Bioraffinerieprozessen bei und unterstützen die Defossilisierung – **ein wichtiger Beitrag für die chemische Industrie von morgen.** In meiner Doktorarbeit habe ich insbesondere die technologischen Herausforderungen der Entwicklung von Bioraffinerieprozessen beleuchtet. Durch technologische Fortschritte in diesem Bereich hat Deutschland die Möglichkeit, bei der Defossilisierung eine führende Rolle einzunehmen, was enorme wirtschaftliche Potenziale für den Standort mit sich bringt. Dieses Potenzial wird zunehmend von der Politik erkannt und gefördert. Als Gruppenleiterin am Center for the Transformation of Chemistry werde ich weiter an innovativen Bioraffinerieprozessen forschen, um deren Entwicklung voranzutreiben. Da Chemikalien in unserem Alltag nahezu überall präsent sind, betrifft dieser Wandel aber uns alle. Um das Thema weiter in die gesellschaftliche Debatte einzubringen, schreibe ich diesen Essay – denn darüber zu diskutieren, erlaubt es, den Wandel aktiv mitzugestalten!

Literaturnachweise

(1) Bazzanella, A. M.; Ausfelder, F.; DECHEMA Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V. *Technology Study: Low Carbon Energy and Feedstock for the European Chemical Industry*; Frankfurt am Main, Germany, 2017.

(2) Haus, M. AdBlue-Versorgung: Produktion bei SKW Piesteritz steht still. *Deutsche Presse-Agentur*. September 1, 2022. https://www.verkehrsrundschau.de/nachrichten/nfz-fuhrpark/adblue-versorgung-produktion-bei-skw-piesteritz-steht-still-3225515#:~:text=Die%20Luft%20f%C3%BCr%20den%20D%C3%BCngemittel,mittlerweile%20ein%20kompletter%20Produktionsstopp%20vor (letzter Zugriff: 2025-02-20).

(3) Zinke, O. BASF legt Ammoniak-Produktion still und baut 2600 Stellen ab. *agrarheute*. February 27, 2023. https://www.agrarheute.com/management/agribusiness/basf-legt-ammoniak-produktion-still-baut-2600-stellen-ab-603952 (letzter Zugriff: 2025-02-20).

(4) Verband der Chemischen Industrie e.V. (VCI). *Biomass as a Resource for the Chemical Industry*; Frankfurt am Main, Germany, 2007.

(5) Biomass in the EU, 2022. https://knowledge4policy.ec.europa.eu/publication/infographics-biomass-sources-uses-eu-27-2017-data_en (letzter Zugriff: 2025-02-20).

(6) König-Mattern, L.; Linke, S.; Rihko-Struckmann, L.; Sundmacher, K. Computer-Aided Solvent Screening for the Fractionation of Wet Microalgae Biomass. *Green Chemistry* **2021**, 10.1039.D1GC03471E. https://doi.org/10.1039/D1GC03471E.

(7) König-Mattern, L.; Rihko-Struckmann, L.; Sundmacher, K. Systematic Solvent Selection Enables the Fractionation of Wet Microalgal Biomass. *Separation and Purification Technology* **2025**, *354*, 129462. https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.129462.

(8) Shuai, L.; Amiri, M. T.; Questell-Santiago, Y. M.; Héroguel, F.; Li, Y.; Kim, H.; Meilan, R.; Chapple, C.; Ralph, J.; Luterbacher, J. S. Formaldehyde Stabilization Facilitates Lignin Monomer Production during Biomass Depolymerization. *Science* **2016**, *354* (6310), 329–333. https://doi.org/10.1126/science.aaf7810.

(9) König-Mattern, L.; Komarova, A. O.; Ghosh, A.; Linke, S.; Rihko-Struckmann, L. K.; Luterbacher, J.; Sundmacher, K. High-Throughput Computational Solvent Screening for Lignocellulosic Biomass Processing. *Chemical Engineering Journal* **2023**, *452*, 139476. https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.139476.

(10) König-Mattern, L.; Sanchez Medina, E. I.; Komarova, A. O.; Linke, S.; Rihko-Struckmann, L.; Luterbacher, J.; Sundmacher, K. Machine Learning-Supported Solvent Design for Lignin-First Biorefineries and Lignin Upgrading. *Chemical Engineering Journal* **2024**, *495*, 153524. https://doi.org/10.1016/j.cej.2024.153524.