

FUELS JOINT
RESEARCH GROUP



Band 40

7. Tagung der Fuels Joint Research Group
am 11. und 12. Juni 2026 in Lemgo

KRAFTSTOFFE FÜR DIE MOBILITÄT VON MORGEN

Herausgeber: Jürgen Krahl, Axel Munack, Peter Eilts, Jürgen Büniger



Cuvillier Verlag Göttingen

Kraftstoffe für die Mobilität von morgen



7. Tagung der Fuels Joint Research Group
am 11. und 12. Juni 2026 in Lemgo

KRAFTSTOFFE FÜR DIE MOBILITÄT VON MORGEN

Herausgeber: Jürgen Krahl, Axel Munack, Peter Eilts, Jürgen Bünger



Cuvillier Verlag Göttingen

Impressum

Reihe: FJRG, Band 40

Titel des Werkes: Kraftstoffe für die Mobilität von morgen

Herausgeber: Jürgen Krahl, Axel Munack, Peter Eilts, Jürgen Büniger

Cuvillier Verlag GmbH

Nonnenstieg 8

37075 Göttingen

Telefon: 0049-551-547240

Webseite: www.cuvillier.de

E-Mail: info@cuvillier.de

Bibliografische Informationen der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.dnb.de> abrufbar.

1. Auflage, Göttingen. 2026

Diese Publikation wurde durch Mittel aus dem Publikationsfonds Niedersachsen-OPEN unterstützt, der von [zukunft.niedersachsen](http://www.zukunft.niedersachsen.de) finanziert wird.

© Cuvillier Verlag GmbH, Göttingen

Dieses Werk ist lizenziert unter einer Creative Commons Namensnennung 4.0 International Lizenz (CC BY 4.0). <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>
Sie können das Material frei weiterverbreiten und bearbeiten, auch für kommerzielle Zwecke, sofern Sie die Quelle ordnungsgemäß angeben. Sie müssen außerdem einen Link zur Lizenz angeben und auf Änderungen hinweisen. Alle Rechte an Inhalten, die nicht unter diese Lizenz fallen, bleiben vorbehalten.

Gedruckt auf umweltfreundlichem, säurefreiem Papier aus nachhaltiger Forstwirtschaft.

ISSN 2943-8292 (Print)

eISSN 3053-8971 (Online)

ISBN 978-3-68952-529-3

eISBN 978-3-68952-530-9

DOI 10.61061/ISBN_9783689525293

Vorwort

Wie sieht die Mobilität von morgen aus? Mehr ÖPNV oder doch mehr Individualität? Alles elektrisch oder wieder mehr Verbrenner?

Während die Diskussion um die richtigen Antriebe und Konzepte der Mobilität nach wie vor sehr polarisiert ist, kann derzeit gleichzeitig beobachtet werden, dass das wichtige Ziel des Klimaschutzes in der gesellschaftlichen Debatte und politischen Priorisierung zunehmend an Bedeutung verliert. Dabei sollte gerade der steigende gesellschaftliche und ökonomische Druck sowie die sich verändernde weltpolitische Situation klarmachen, dass es für die Energieversorgung und den Klimaschutz keine singuläre Lösung geben kann.

Die zukünftig unvermeidbare Umstellung auf eine postfossile, klimaneutrale Mobilität und Energieversorgung kann nur gelingen, wenn Antworten auf entscheidende Fragestellungen gegeben werden, wie z. B. die langfristige Speicherbarkeit und der interkontinentale Transport von Energie, die Versorgung kritischer Infrastruktur und der Langstreckenmobilität sowie des Flug- und Schiffverkehrs und der Landwirtschaft. Auch eine Reduktion der CO₂-Emissionen in den Bestandsflotten ist notwendig, um frühzeitig Effekte erzielen zu können.

Während elektrische Antriebe mit Speicherung der Energie in Batterien in vielen Fällen eine gute Lösung sind, können die genannten Herausforderungen nicht ohne flüssige oder gasförmige Energieträger gemeistert werden.

Hier liegt der Fokus der Tagungsreihe "**Kraftstoffe für die Mobilität von morgen**", die alle zwei Jahre von der **Fuels Joint Research Group (FJRG)** organisiert wird. Die FJRG ist eine aus Ingenieuren, Naturwissenschaftlern und Medizinern interdisziplinär zusammengesetzte Forschergruppe auf dem Gebiet der Kraftstoffforschung.

So dürfen wir am 11. und 12. Juni 2026 die Teilnehmerinnen und Teilnehmer zur nunmehr **7. Tagung Kraftstoffe für die Mobilität von morgen** der FJRG ganz herzlich in Lemgo in Ostwestfalen-Lippe begrüßen.

In diesem Tagungsband wurden alle Beiträge sowie die eingereichten Poster des Nachwuchsförderwettbewerbs zusammengefasst.

Einen großen Einfluss auf die Mobilität der Zukunft haben die technischen, politischen, ökonomischen und ökologischen Rahmenbedingungen für zukünftige Kraftstoffe. Diese Themen werden bei der Tagung traditionell in Keynote-Beiträgen behandelt. Als diesjährige Trendthemen wenden wir uns insbesondere der Bereitstellung von Flug-

und Schiffskraftstoffen, den gesellschaftlichen Implikationen und gesundheitlichen Aspekten, der Wasserstoffgewinnung und -nutzung sowie E-Fuels, Ammoniak als Kraftstoff und dem Fuel-Design und der Fuel-Herstellung zu.

Der Tagungsband gibt technisch-wissenschaftlichen Expertinnen und Experten, betrieblichen Entscheidern, Vertretern aus Verbänden und Politik sowie Promovierenden und Studierenden einen guten und aktuellen Überblick über Anforderungen und Entwicklungen für alternative Kraftstoffe.

Wir wünschen Ihnen im Namen der Fuels Joint Research Group eine anregende Lektüre des Tagungsbandes und – sofern Sie in Lemgo dabei sind – eine intensive, lehrreiche und angenehme Teilnahme an der 7. Tagung "Kraftstoffe für die Mobilität von morgen".

Prof. Dr. Jürgen Krahl
(Präsident der TH OWL)

Prof. Dr. Thomas Schulte
(Tagungsleitung)

Die Sponsoren und Förderer der 7. FJRG-Tagung

UFOP

Die Union zur Förderung von Oel- und Proteinpflanzen e. V. (UFOP) vertritt die politischen Interessen der an der Rohstoffproduktion, Verarbeitung und Vermarktung heimischer Öl- und Eiweißpflanzen beteiligten Unternehmen, Verbände und Institutionen. Der Förderauftrag schließt neben der Nahrungs- und Futtermittelverwendung auch die Nutzung von Rapsöl zur stofflichen und energetischen Nutzung ein. Wir sind überzeugt davon, dass nachhaltige Biokraftstoffe Impulsgeber für Klimaschutz, Ernährungsvorsorge und Wertschöpfung in der Landwirtschaft sind. Deshalb fördert die UFOP im Rahmen ihrer Möglichkeiten anwendungsnahe Vorhaben sowie die ebenso wichtige Netzwerkbildung mit Experten aus Wissenschaft und Wirtschaft. Die Tagungen der Fuels Joint Research Group sind hierfür eine ideale Plattform, zumal das Programm auch gezielt an Studierende gerichtet ist.



BDBe

Der Bundesverband der deutschen Bioethanolwirtschaft e.V. setzt sich für die Senkung der Treibhausgasemissionen im Verkehr durch den Einsatz von Bioethanol als erneuerbare Beimischungskomponente zu Benzin sowie für die Verwendung von Bioethanol als nachhaltiger Rohstoff in der chemischen und pharmazeutischen Industrie ein. Mit einem gesamtheitlichen Ansatz bilden die Mitglieder des BDBe die gesamte Wertschöpfungskette ab – vom Acker bis zum Bioethanol. Der BDBe koordiniert die politische Meinungsbildung der deutschen Bioethanolwirtschaft in Berlin und Brüssel und kommuniziert deren Positionen an Politik, Wirtschaft, Wissenschaft, Medien und Öffentlichkeit. Zukunftsorientierte und praxisnahe Fachveranstaltungen wie die der Fuels Joint Research Group setzen Innovationen und leisten einen Beitrag zur Meinungsbildung, folglich werden sie vom BDBe gerne unterstützt.



VDB

Der Verband der Deutschen Biokraftstoffindustrie (VDB) vertritt die wichtigsten deutschen Biodiesel- und Biomethanhersteller auf nationaler und europäischer Ebene gegenüber Politik und Öffentlichkeit. Er setzt sich für verlässliche Rahmenbedingungen für Biokraftstoffe ein, die eine nachhaltigere Mobilität auch bei Fahrzeugen mit Verbrennungsmotoren ermöglichen. Biodiesel, Bioethanol und Biomethan spielen eine überragende Rolle bei der Minderung des Treibhausgasausstoßes der Antriebsenergie im Straßenverkehr, indem sie in Deutschland 11 Millionen Tonnen CO₂ pro Jahr einsparen. Damit leisten Biokraftstoffe heute den mit Abstand größten Beitrag zur CO₂-Reduzierung im Verkehr. Der VDB unterstützt die FJRG-Tagung und freut sich auf den fachlichen Austausch, nicht zuletzt mit Nachwuchsforschern und Studenten.



MVaK

Flüssige Biokraftstoffe mit einer hohen Treibhausgasmin- derung sind für den Verkehrssektor und in Bälde auch für den Wärme- markt unverzichtbar. Dies ist Motivation und Verpflichtung zugleich. Gemeinsam müs- sen wir den Klimabeitrag von Biokraftstoffen weiter steigern und ihre Verwendung op- timieren und diversifizieren. Möglich wird dies durch die Nutzung zusätzlicher Abfall- und Reststoffe, durch eine bestmögliche Kohlenstoffeffizienz der eingesetzten Aus- gangsstoffe und durch eine zielgerichtete Kraftstoffforschung.

Der Mittelstandsverband abfallbasierter Kraftstoffe e.V. (MVaK) repräsentiert 32 Mit- glieder, die geeignete pflanzliche Abfall- und Reststoffe, überwiegend gebrauchte Speiseöle sowie Abfallfettsäuren, sammeln, aufbereiten, zu abfallbasiertem und fort- schrittlichem Biodiesel verarbeiten oder mit den Ausgangsstoffen und Fertigprodukten handeln. Sitz des Verbandes ist Berlin.



Tecosol

Die Tecosol GmbH ist einer der führenden europäischen Pro- duzenten von fortschrittlichen Biokraftstoffen mit hoher Treib- hausgasmin- derung. Dies erfolgt in zwei Werken in Ochsenfurt und Wittenberge mit einer Gesamtkapazität von bis zu 300.000 t/y. Neben der Nutzung von Abfall- und Reststoffen zur Herstellung von Fettsäuremethylestern, entwickelt die Tecosol auch neue innovative Kraftstoffe. Ein Team von qualifizierten Ingenieuren und Wissen- schaftlern beschäftigt sich seit vielen Jahren in enger Kooperation mit Hochschulen mit der Mobilität der Zukunft.



FNR

Die Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e. V. (FNR) ist ein Pro- jektträger des Bundesministeriums für Landwirtschaft, Ernährung und Heimat (BMLEH). Seit 1993 koordiniert sie Forschungs-, Entwicklungs- und Dem- onstrationsprojekte zu nachwachsenden Rohstoffen und biogenen Ressourcen. Dar- über hinaus betreut sie verschiedene Fördermaßnahmen des Bundes in den Berei- chen Humusaufbau, Moorbodenschutz, Torfminderung, Energieeffizienz in Landwirt- schaft und Gartenbau sowie klimaangepasstes Waldmanagement. Zudem ist die FNR gemeinsam mit der VDI/VDE Innovation + Technik GmbH für die Förderrichtlinie „Ent- wicklung regenerativer Kraftstoffe“ des Bundesministeriums für Verkehr (BMV) verant- wortlich.



NOW GmbH

Als bundeseigene Gesellschaft koordiniert und begleitet die NOW (Nationale Organisation für den Wandel in der Mobilität) strategische Projekte der Regierung im Bereich klimafreundlicher Mobilität und nachhaltiger Ener- gieversorgung. Unser Ziel ist es innovative Technologien wie Elektromobilität und La- deinfrastruktur, Wasserstoff- und Brennstoffzellen sowie alternative Kraftstoffe voran- zubringen und damit einen Beitrag zur Erreichung der Klimaziele zu leisten.



Inhaltsverzeichnis

Postfossile, automatisierte und vernetzte Mobilität - OWL als Modellregion für ländliche Räume Stefan Witte	11
Politische Rahmenbedingungen für neue Kraftstoffe Elmar Baumann	19
Implications of RED III and ETS2 on Mobility Decarbonization Pathways - A European Perspective Andreas Kolbeck, Isabella Faddul de Almeida, Erno Scheers	21
Revolution in Efficiency and Scalability of Renewable Fuels Mark Misselhorn	36
Zukünftige Luftfahrt mit alternativen SAF Friedrich Dinkelacker	47
Sustainable Propulsion Concept for the new Polarstern Research Icebreaker Detlef Wilde	56
Overall Energy Situation in Germany, Status 2026 Conclusions for the Transition of Energy and Transport Systems Frank Atzler, Thilo Roß, Ronny Werner	64
Gesundheitsrisiken durch Abgase erneuerbarer Kraftstoffe Jürgen Bünger	79
E-Fuels in der Energiewende: Wo stehen wir und was brauchen wir? Jörg Schröder, Kati Görsch, Stephanie Hauschild	90
Wasserstoff-Direkteinblasung für Retrofit-Motoren im Bahnbereich Philipp Leue, Moritz Beinbauer, Kay Mahler, Christian Reiser	102
Defossilisation Paths of the Large Engine Segment Jens Olaf Stein, Kurt Schratlbauer, Josef Frank, Roland Fortenbach	114
Ammonia in Sustainable Large Engine Applications Nicole Wermuth	125
From Challenging Fuel to Future Energy Carrier: Ammonia in Combustion Process Development Annalena Braun, Thomas Koch, Hinrich Mohr, Torsten Baufeld, Heiko Kubach, Sascha Prehn, Sören Bernhardt	134

Einfluss von C7- und C8-Aromaten auf die Partikelbildung im Abgas von Ottomotoren mit Direkteinspritzung Johanna Klose	145
RSX = R33 2.0 Sustainable Liquid Energy Ralf Türck, Julian Türck, Jürgen Krahl	156
FSC² Fuel Design via Machine Learning and Optimization Philipp Ackermann, Marian Panofen, Jan Pavšek, Jan G. Rittig, Jörn Viell, Manuel Dahmen, Alexander Mitsos	165
Experimentelle Untersuchung der turbulenten heißen Freistrahzündung magerer H₂/Luft-Gemische Jacqueline Höltkemeier-Horstmann	174
Verbesserte Verbrennungsanalyse mittels 3D-Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy an Ammoniak-Gemischen Niklas Warnecke	176
Onboard Multi-Fuel Classification for Diesel Engines — Infrastructure and Methodology Florian Zacherl	178
eMethanol mit erhöhtem Wasseranteil in einem Rangeextender mit Abgasturbolader Maximilian Dobberkau, Frank Atzler, Ronny Werner	180
Validierung eines ternären Diesel-Surrogats in brennerstabilisierten Niederdruckflammen Ewald Keksel	182
2D-GC-basierte Charakterisierung und Modellierung biogener Kraftstoffe Svenja Iserloth, Yasin Incedag, Anika Sievers	184
Autoren und Autorinnen dieses Bandes	186
Mitglieder der Fuels Joint Research Group	188

Postfossile, automatisierte und vernetzte Mobilität OWL als Modellregion für ländliche Räume

Stefan Witte

Abstract

The transformation of the mobility system towards post-fossil, automated and networked structures is crucial for achieving global climate goals and ensuring mobility as a public service – especially in rural areas. This article addresses the challenges facing energy and transport systems and outlines the approaches already being pursued and implemented in the OWL mobility region, as well as the planned next steps.

1. Einleitung

Die globale Energiewende adressiert den Übergang von fossilen zu nachhaltigen Energiesystemen. Allein in Deutschland macht der Anteil fossiler Energien am Primärenergieverbrauch knapp 80% aus, was einem fossilen Primärenergieverbrauch von ca. 31.200 kWh pro Kopf entspricht.

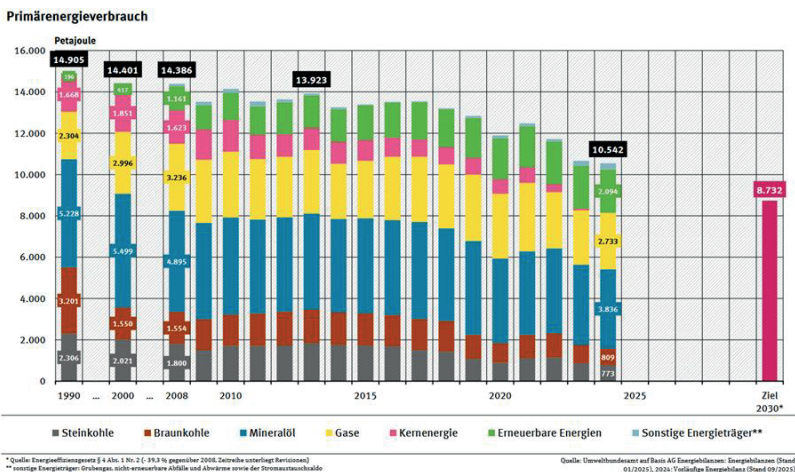


Bild 1: Primärenergieverbrauch in Deutschland nach Energieträgern
(Quelle: <https://www.umweltbundesamt.de>, 23.04.2026)

Der Verkehrssektor hat am Primärenergieverbrauch mit ca. 3.500 PJ einen nicht unerheblichen Anteil von ca. 33%. Diesen dominieren heute mit über 90% fossile Energien¹.

Die Mobilität von Personen und Gütern ist ein grundlegendes Element der Daseinsvorsorge in unserer modernen Gesellschaft und sie muss zukünftig im Kontext globaler Klimaziele durch ein ressourcenschonendes, resilientes und CO₂-neutrales Mobilitätssystem ermöglicht werden.

2. Handlungsrandbedingungen

Stellt man den Ansatz der CO₂-Reduktion, verbunden mit einer nachhaltigen Nutzung von Ressourcen für eine resiliente Mobilität von morgen, in den Fokus, so führt das zu zwei Handlungsfeldern: 1) Senkung des fossilen Primärenergiebedarfs und 2) Umsetzung als möglichst ressourcenschonendes und resilientes Mobilitätssystem.

2.1 Senkung des fossilen Primärenergiebedarfs

Für eine postfossile Mobilität basiert der grundlegende Energieträger für den Antrieb von Fahrzeugen *nicht* auf fossilen Energieträgern. Das kann auf sehr verschiedene Weisen gelöst werden: als grundlegende Energieträger für den Antrieb stehen direkte elektrische Systeme (Oberleitung), batterieelektrische Systeme (mit regenerativ erzeugter elektrischer Energie), Wasserstoff (erzeugt mit regenerativem Strom), Biokraftstoffe (erzeugt aus nachwachsenden Rohstoffen) sowie synthetische Kraftstoffe (PtX, erzeugt mit regenerativem Strom) im Fokus. Diese Ansätze basieren, bis auf die Biokraftstoffe, auf elektrischer (regenerativer) Primärenergie, aus der dann die grundlegenden Energieträger für den Antrieb erzeugt werden. Postfossile Mobilität ist somit als ein technologieoffener Ansatz zu verstehen. Die dem Fahrzeug zur Verfügung gestellte Energie kann für die Mobilität aber nicht komplett in Bewegungsenergie gewandelt werden, wir haben je nach Lösung und Energieträger unterschiedliche Wirkungsgrade. Bei einer direkten elektrischen Einspeisung ist die Wandlung über Elektromotoren am effektivsten; auch batterieelektrische Systeme erreichen einen sehr hohen Wirkungsgrad. Beim Einsatz von Wasserstoff (Elektrolyse) oder daraus abgeleiteten E-Fuels sind die Wirkungsgrade aufgrund der Erzeugung und der Wandlungsverluste in Verbrennungsmotoren jedoch deutlich geringer (ca. 28%).

Alle heute verfolgten Lösungen erreichen eine Senkung des fossilen Primärenergiebedarfs, sie sind jedoch in der Effizienz oder im Wirkungsgrad für die Mobilitätsaufgabe unterschiedlich. Das führt oft zu dem (Trug)schluss, dass deshalb einige Energiewege - wie z.B. Wasserstoff - nicht sinnvoll sind. Aber gerade hier sind die Rahmenbedingungen unter gewissen Prämissen genauer zu betrachten.

- *Wir werden zukünftig nicht alle Antriebe und Mobilitätsarten rein Batterieelektrisch lösen können:* Es gibt zum einen spezielle Anwendungsfelder wo wegen notwendiger großer Reichweiten (z.B. Flugzeuge) sehr hohe Energiespeicherdichten notwendig sind, und es sind zum anderen Fahrzeuge wie Schiffe, Lokomotiven, Kraftfahrzeuge mit Nutzungszeiträumen größer als 50

¹ Vgl. <https://www.umweltbundesamt.de/daten/energie/energieverbrauch-nach-energietraegern-sektor>, 23.4.2026

Jahre vorhanden. Diese Fahrzeuge erfordern weiterhin klassische Kraftstoffe - aber postfossil. Das bedeutet, es werden hierfür mehr Biokraftstoffe und mehr synthetische Kraftstoffe notwendig, um fossile Anteile signifikant zu reduzieren.

- *Wir haben zukünftig genügend regenerativ erzeugte elektrische Energie zur Verfügung²:* Trifft diese Prämisse langfristig zu, dann ist es nicht mehr kritisch, wenn wir aus der primären elektrischen Energie andere, sehr gut speicherbare und transportierbare Energieträger erzeugen. Diese Bedingung ist auch heute schon im Kleineren der Fall, wenn wir z.B. Windanlagen abschalten müssen, weil die elektrische Energie nicht mehr in das Transportnetz eingekoppelt werden kann. Aber solange dieser Aspekt nicht ganzheitlich gegeben ist, sind eine möglichst effektive Nutzung der elektrischen Energie und von Biokraftstoffen für die Mobilität nötig, weil das dann die größte Einsparung fossiler Primärenergie bedeutet.

Für die Mobilitätsantriebe der Zukunft gilt aus Sicht des Autors:

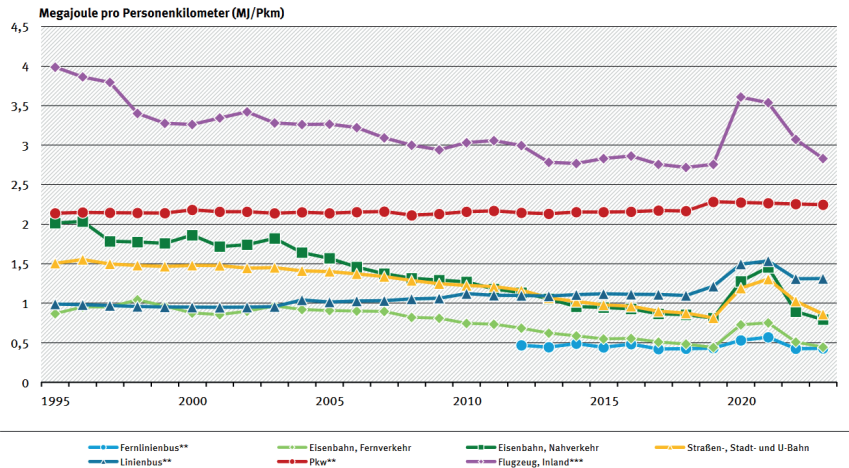
- Direkte und batterieelektrische Systeme mit sehr hohem Wirkungsgrad wo möglich und postfossile Kraftstoffe wo immer nötig einsetzen. Hierzu haben wir technologische Herausforderungen (Herstellung, Lagerung, Transport, Tanken, Laden) aber auch die Qualitätsabsicherung (wirklich postfossil) durch Sensorik und Technologie zu lösen.
- Mit dem Verständnis der Mobilität als Daseinsvorsorge ist die Verfügbarkeit der Energieträger für die Mobilität abzusichern. Der Einsatz verschiedener Antriebslösungen kann hier im Sinne einer Redundanz helfen, erfordert jedoch mit Blick auf Versorgungssicherheit dezentrale (ggf. mobile) Erzeugungs- und Speichersysteme.
- Neben einer technischen Lösung selbst, ist die Akzeptanz für die Antriebstechnologien (z.B. Wasserstoff) herzustellen, was ein fundiertes Verständnis von Ansätzen erfordert. Wir müssen hierzu den Wissenschaftsdialog stärken.

2.2 Umsetzung ressourcenschonendes und resilientes Mobilitätssystem

Wie wir gesehen hatten macht der Energiebedarf für die Mobilität in Deutschland heute etwa 33% aus. Wenn wir davon ausgehen, dass der Primärenergiebedarf sinken soll (vgl. Bild 1) sind wir gut beraten, eine möglichst effiziente und ressourcenschonende Energienutzung für die Mobilität anzugehen. Hier sind Optimierungen durch Sektorkopplungen, Erhöhung von Wirkungsgraden bei der Wandlung (z.B. DC Industries) und Speicherung aber eben auch die Reduktion der insgesamt für die Mobilität aufgebrauchten Energie relevant - auch durch Änderung des Mobilitätssystems. Betrachtet man dazu z.B. die heutigen Energieverbräuche für Personenkilometer in Bild 2, so zeigt sich, dass Einsparungen und Effizienz insbesondere durch Bündelung von Mobilitätswünschen, wie bei den ÖPNV-Angeboten, entstehen.

² Vgl. Idee der "All Electric Society": <https://www.phoenixcontact.com/en-pc/company/all-electric-society>

Entwicklung des spezifischen Energieverbrauchs im Personenverkehr * (inkl. Vorkette)



*inkl. Emissionen aus Bereitstellung & Umwandlung der Energieträger in Strom, Benzin, Diesel, Flüssig- & Erdgas sowie Kerosin
 **ab 2019 Methodenwechsel in der Vorkettenmodellierung, Werte ab 2019 daher nur eingeschränkt mit den Vorjahren vergleichbar
 ***ausgewählte Flughäfen in Deutschland, nur Kerosin
 Quelle: Umweltbundesamt, Daten und Rechenmodell TREMOD, Version 6.61d

Bild 2: Entwicklung des spezifischen Energieverbrauchs pro Personenkilometer im Personenverkehr. (Quelle: <https://www.umweltbundesamt.de>, 23.04.2026)

Aber gerade hier ergibt sich für ländliche Räume ein Dilemma, denn eine Bündelung von Mobilitätsbedürfnissen erfordert immer eine hohe Nachfrage und einen guten Zugang zum Mobilitätssystem, versehen mit einer hohen Zuverlässigkeit und einer hohen Taktung (quasi on Demand). Diese Lösungen der Bündelung sind in urbanen Räumen sehr gut gegeben, in den ländlichen Räumen deutlich weniger, und sie werden dort deshalb durch einen individuellen Autoverkehr gelöst. Das sieht man z.B. unmittelbar an der Fahrzeugdichte: Im Kreis Lippe gibt es z.B. 641 PKW auf 1000 EW, in Berlin sind es mit 334 PKW knapp die Hälfte³. Will man also die Energieeffizienz durch Bündelung stärken, muss man Taktung und Zuverlässigkeit der Angebote ausbauen. Das erfordert eine automatisierte und vernetzte Mobilität, weil nur so wirtschaftlich tragfähige Lösungen (z.B. ohne Fahrer) entstehen. Automatisierung und Vernetzung für einen digitalen Informationsfluss fungieren somit als zentrale Effizienz- und Integrationshebel für eine postfossile Mobilität, insbesondere in ländlichen Räumen.

3. Arbeiten zu postfossilen Mobilitätssystemen in OWL

Gerade für den in ländlichen Räumen notwendigen individuellen Verkehr werden heute neue Lösungen gedacht, wie kleine, automatisierte Straßenfahrzeuge und Busse, Lösungen zur Reaktivierung von Bahntrassen für OnDemand-Verkehre auf der Schiene

³ Vgl. <https://regionalatlas.statistikportal.de/?BL=DE&TCode=AI1013-1&Icode=AI1301&LYR=K&scl=4622324&E=597187&N=5674902>

oder auch drohnenbasierte Flugtaxi. Es entstehen somit aktuell in Forschung und Entwicklung neue Fahrzeuge, neue Schnittstellen zwischen den Verkehrsträgern, aber auch neue, postfossile Energie- für Antriebssysteme.

In OWL wird an den genannten Fragenstellungen sehr intensiv gearbeitet. Dies fand schon früh Niederschlag in der Mobilitätsstrategie OWL. So entstehen in der Region neue Radfahrschnellwege, es werden S-Bahn-Konzepte für OWL neu gedacht und SmartCity-Konzepte (z.B. Lemgo Digital⁴) umgesetzt. In der Forschung wird beispielsweise am RailCampus OWL⁵ das System Bahn intensiv gestärkt, auch im Rahmen des vom BMDV geförderten DZM-Projekts enableATO⁶, um automatisiertes Fahren auf der Schiene zu forcieren. Aber auch verschiedene Energieträger und Antriebssysteme, wie z.B. Wasserstofffahrzeuge, werden dort durch die DB-Systemtechnik geprüft. Mit dem MONOCAB wird ein Einschienenfahrzeug, primär zur Reaktivierung von Bahnstrecken, durch NRW- und Bundesförderung erforscht und entwickelt. Das schmale Einschienenfahrzeug MONOCAB erlaubt zur Reaktivierung vorhandener Bahngleise mit einem bidirektionalen Verkehr ganz neue Konzepte.



Bild 3: Automatisiert fahrende MONOCABs als eine ergänzende OnDemand-Mobilitätslösung zur Reaktivierung von Bahnstrecken

Das Elektrofahrzeug ist für bis zu 10 Personen und 70 km/h ausgelegt. Neben der Fahrzeugentwicklung selbst ist eine intelligente Infrastruktur mit KI-basierten Wahrnehmungs- und Entscheidungssystemen wichtig, um Verkehrsströme zu erfassen, zu bewerten und in digitale Mobilitätsplattformen zu integrieren. Wir sind in der Modellregion OWL auf dem Weg, das MONOCAB in einen Testregelbetrieb zu bringen.

Mit dem Projekt NEMO⁷ entsteht im Kreis Paderborn ein automatisiertes Mobilitätssystem mit kleinen Straßenfahrzeugen. Im Kreis Herford erfolgt eine Erprobung autonomer Busse⁸. Es wird an Optimierungen der Entwicklungsprozesse für Mobilitätssysteme gearbeitet, wie z.B. im Kontext emissionsfreier Fahren im Schiffsverkehr⁹. In

⁴ Vgl. <https://www.i0sb-ina.fraunhofer.de/de/geschaeftsbereiche/future-city-solutions.html>

⁵ Vgl. <https://railcampus-owl.de/>

⁶ Vgl. <https://railcampus-owl.de/dzm/dzm-projekt/>

⁷ Vgl. <https://nemo-paderborn.de/>

⁸ Vgl. <https://stadtverkehr.herford.de/ultimo>

⁹ Vgl. <https://www.iem.fraunhofer.de/de/newsroom/presse-und-news/gruene-schiffahrt-emissionsfreie-fahren-70-prozent-schneller-entwickeln.html>

Bielefeld wird am Aufbau einer automatisierten Quartiersmobilität¹⁰ geforscht und mit dem Innovationsflughafen Paderborn¹¹ werden in der Region Automatisierungen auf dem Flughafenvorfeld und in Luftverkehrssystemen weiterentwickelt.

Darüber hinaus werden mit dem Mobilitätszentrum UrbanLand¹² und dem Kraftwerk-Land an der TH OWL die Themen der Energie- und Antriebssysteme für postfossile Mobilität adressiert. Und auch Unternehmensaktivitäten wie der „All Electric Society Park“ bei PhoenixContact in Blomberg¹³ oder das Wasserstoffprojekt „Schlafender Riese“ von Westfalen Weser für den Bau des 10-Megawatt-Elektrolyseurs in Lichtenau adressieren den Umbau der Energiesysteme.

Diese Beispiele zeigen: OWL ist schon heute eine „Hidden“ Mobilitätsregion für Post-fossile, automatisierte und vernetzte Mobilität.

4. Was streben wir in OWL an?

Eine Transformation des Mobilitätssystems braucht Akzeptanz und das Vertrauen der Nutzerinnen und Nutzer in die neuen Mobilitätslösungen. Dies wird nur durch reales Erleben und quasi einen „Alltagseinsatz“ in konkreten Einsatzbereichen erreicht werden. Hierzu sind Modellregionen und Experimentierräume zwingend notwendig.

Die Region Ostwestfalen-Lippe (OWL) als typische Region mit zwei Oberzentren, Mittelstädten und vielen sehr ländlich strukturierten Bereichen soll zu einer innovativen Modell- und Testregion für automatisierte, vernetzte und postfossile Mobilität weiterentwickelt werden. Durch technologische, organisatorische und regulatorische Ansätze für nachhaltige Mobilität im ländlichen Raum sollen neue Mobilitätslösungen im Rahmen von durchgängigen Experimentierklauseln für Straße, Schiene, Wasser und Luft real erprobt und erforscht werden können. Mit einer starken Fokussierung auf die Themen Sichtbarkeit, Akzeptanz, Forschung und Demonstration von Projekten wird OWL als eine führende Mobilitätsregion sichtbar.

¹⁰ Vgl. <https://www.hsbi.de/presse/pressemitteilungen/hsbi-erhaelt-foerderbescheid-paketzustellung-auf-der-letzten-meile-ein-roboter-ist-bald-im-duerkopp-quartier-unterwegs>

¹¹ Vgl. <https://innovationsflughafen.de/>

¹² Vgl. <https://www.icl-owl.de/orte/mobilitaetszentrum-urbanland-in-planung>

¹³ Vgl. <https://www.phoenixcontact.com/en-pc/company/all-electric-society/all-electric-society-park>

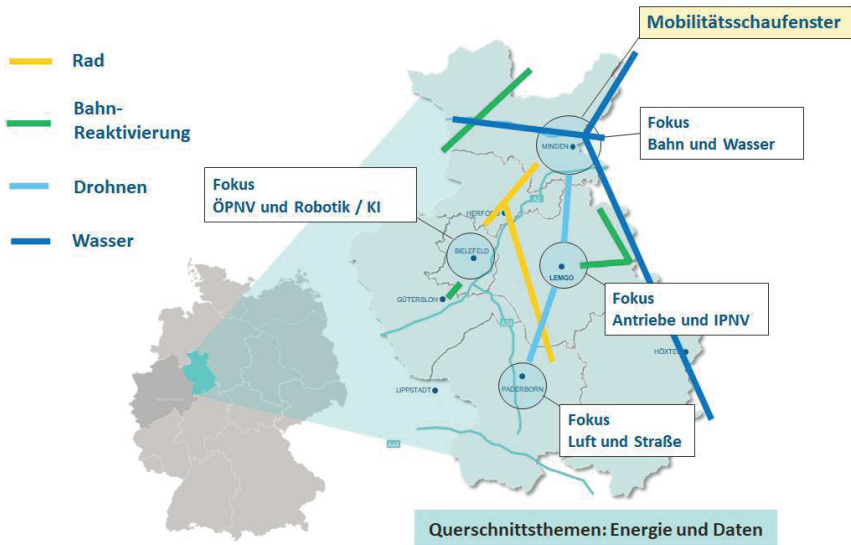


Bild 4: Region OWL und verschiedene Aktivitäten im Kontext der postfossilen, automatisierten und vernetzten Mobilität.

Inhaltlich streben wir wegweisende Demonstrations- und Infrastrukturprojekte an: Erste Ideen hierzu sind:

- Demonstration von MONOCAB-Verkehren durch Streckenreaktivierungen Rahden/Ströhen und im Extertal. Diese dienen zur Erforschung der Akzeptanz automatisierter Bahnverkehre.
- Umsetzung einer „E-AutoBahn“ in der kleine Straßen-Elektrofahrzeuge (z.B. aus NEMO) im Zug für lange Strecken auf der Schiene in einem Modellverkehr (z.B. Minden-Hamm) transportiert werden können.
- Entwicklung einer Hub-Schnittstelle Rad/Bahn am Radschnellweg zur Förderung der intermodalen Mobilität und Stärkung von Mobilitätsprojekten im Kontext Rad.
- Einrichtung eines Experimentier-Luftkorridors für Drohnen, um Drohnenverkehre für Logistik Anwendungen (und Personentransporte) zu testen.
- Demonstration und Entwicklung trimodaler Container-Schnittstellen am Hafen Minden (Wasser, Straße, Schiene). Hier ist mit dem RegioPort OWL¹⁴ eine Infrastruktur der Binnenschifffahrt vorhanden, auf der automatisierte Umladeprozesse zwischen Bahn, Straße und Schiff entwickelt, erprobt und demonstriert werden könnten.

¹⁴ Vgl. <https://www.regioport-owl.de/>

- Demonstration des in NEMO entwickelten Mobilitätsansatzes in weiteren Gemeinden in OWL, verbunden mit dem Ausbau von SmartCity-Aktivitäten.
- Kombination des NEMO-Ansatzes (Kolonnenbildung auf der Straße) mit Entwicklungen zu einem Zweibegefahrzeug¹⁵ (NEMO-Fahrzeug auf die Schiene).
- Präsentation und Erforschung postfossiler Energieträger und ihrer Versorgungsketten. Hierzu kann OWL für Akzeptanzuntersuchungen und Impact-Analysen im Bereich nachhaltiger Kraftstoffe als Modellregion etabliert werden, um so CO₂-Einsparungen auch auf Basis von Verbrennungsmotoren für Straße, Schiene und Wasser - auch kurzfristig - zu erreichen und zu erforschen. Dies wird eine besondere Bedeutung gerade für Schiffe (auch Binnenschiffe) erreichen, bei denen ein Umstieg auf postfossile Energieträger nötig ist. Mit dem Hafensband¹⁶ entlang des Mittellandkanals steht hier ein potenzielles Testfeld bereit, an das auch Tankstellenkonzepte (eFuel, Wasserstoff, Gas) angebunden, erprobt und getestet werden können.

Wir streben in OWL gemeinsam mit Forschung, Wirtschaft, Verwaltung und Politik die Transformation des Mobilitätssystem an und diese als Vorreiterregion für eher ländlich strukturierte Räume mitzugestalten und erlebbar zu machen.

5. Fazit

Die Umsetzung eines postfossilen Mobilitätssystems ist sehr komplex. Es müssen die Energieträger für den Antrieb sowie die Antriebssysteme als Basis entstehen und es müssen die durch Automatisierung und Vernetzung von Mobilitätssystemen erreichbaren Potenziale gehoben werden, um ein leistungsfähiges, effizientes und resilientes Mobilitätssystem im Sinne der Daseinsvorsorge überall – auch in ländlichen Räumen – sicherstellen zu können. Dieser Transformationsprozess wird aber Jahrzehnte in Anspruch nehmen.

Die Netzwerk-Region OWL hat sich gemeinsam auf den Weg gemacht, das Themenfeld der postfossilen, automatisierten und vernetzten Mobilität als ein strategisches Feld zu stärken und in der Region sichtbar und erlebbar zu machen. Wir wollen zeigen, wie Mobilitätssysteme der Zukunft gerade für ländliche Räume aussehen können.

¹⁵ Vgl. <https://www.hsbi.de/forschung/forschungsprojekte/aktuelle-projekte-fb-3/naumann-autorail>

¹⁶ Vgl. <https://www.hafensband.de/home.html>

Politische Rahmenbedingungen für neue Kraftstoffe¹

Elmar Baumann

1. Ausgangslage

Der Verkehrssektor verfehlt seit Jahren seine Klimaziele, die sich aus dem deutschen Klimaschutzgesetz und der EU-Effort Sharing Regulation (ESR, dt. Lastenteilungsverordnung) ergeben. Auch ein optimaler Hochlauf der E-Mobilität (insbesondere im Straßenverkehr) ändert nichts an der Notwendigkeit, mehr erneuerbare Kraftstoffe in Fahrzeugbestand und Neufahrzeugen mit Verbrennungsmotor einzusetzen. Neue Kraftstoffe, die geringere CO₂-Emissionen im Vergleich mit ihren fossilen Pendanten aufweisen, werden also zwingend benötigt.

2. Politische Präferenzen in Brüssel und Berlin

Sind neue Kraftstoffe politisch erwünscht? Verfolgt man die Diskussion auf europäischer und nationaler Ebene, wird man diese Frage kaum uneingeschränkt bejahen können: Erneuerbare Kraftstoffe werden häufig als Konkurrenz zur E-Mobilität verstanden und abgelehnt. Aus diesem Missverständnis erwachsen Zweifel in der Industrie, inwiefern Investitionen in die Produktion neuer Kraftstoffe mit Potenzial zur Minderung der CO₂-Emissionen beim mit Abstand größten Verkehrsträger, der landgebundenen Mobilität, zukunftssicher sind. Luftverkehr und Schifffahrt sind die politisch erwünschten Einsatzorte für erneuerbare Energieträger, wobei die Bedeutung mehrerer Rahmenbedingungen nicht ausreichend berücksichtigt wird: Koppelproduktion (Treibstoff/Kraftstoff), unterschiedliche Zahlungsbereitschaft der Kunden, Carbon Leakage sowie Anteil der Verkehrsträger an Energiebedarf und THG-Emissionen.

3. Regulierung

Welche Regularien bewirken die Nachfrage nach erneuerbaren Kraftstoffen, die in der Regel teurer als ihre fossilen Pendanten sind? Der EU-Emissionshandel für Straßenverkehr und Gebäudewärme (ETS II) wird aus heutiger Sicht wirkungslos bleiben, da man den CO₂-Preis - politisch gewollt - unterhalb der CO₂-Vermeidungskosten der Kraftstoffe halten wird. Auch die CO₂-Flottengrenzwerte bewirken in ihrer jetzigen Form keine zusätzliche Nachfrage nach erneuerbaren Kraftstoffen; der Kompromissvorschlag der Europäischen Kommission im Kontext der Diskussion über das Ende der Zulassung verbrennungsmotorisch angetriebener Fahrzeuge hätte ebenfalls keine Auswirkung auf die Nachfrage nach erneuerbaren Kraftstoffen.

¹ Der Begriff „neue Kraftstoffe“ umfasst hier sowohl Reinkraftstoffe als auch Blends (Mischungen erneuerbarer Kraftstoffe oder Mischungen erneuerbarer und fossiler Kraftstoffe). Die Einstufung als „neu“ kann sich darüber hinaus auf das Herstellungsverfahren, den Rohstoff und/oder die in der Produktion eingesetzte Energie beziehen. „Kraftstoff“ wird als flüssiger oder gasförmiger Energieträger zum Einsatz im Straßenverkehr (inklusive Off-Road), in der Schifffahrt (eigentlich: Brennstoff) oder im Luftverkehr (Treibstoff) verstanden.

Das wirksame Instrument zur Förderung des Markthochlaufs neuer Kraftstoffe ist die Treibhausgas-minderungs (THG)-Quote. Die THG-Quote regelt die Minderung der CO₂-Emissionen der Antriebsenergie im Straßenverkehr. Dabei können alle technischen Optionen zur Erfüllung der THG-Quote beitragen: Biokraftstoffe aller drei Rohstoffkategorien (Anbaubiomasse, Anhang IX Teil B, Anhang IX Teil A), RFNBO (Renewable Fuels of Non-Biological Origin, strombasierte Kraftstoffe) sowie batterieelektrische Fahrzeuge. Heute gibt es dezidierte Unterquoten für fortschrittliche Biokraftstoffe gemäß Anhang IX Teil A der Richtlinie sowie für RFNBO. Zukünftig könnte die Regulierung um Unterquoten für andere Kraftstoff- oder Antriebskategorien ergänzt werden.

Für die Schifffahrt und den Luftverkehr regeln zwei EU-Verordnungen den Einsatz erneuerbarer Energie: die FuelEU Maritime macht verbindliche Vorgaben zur THG-Minderung der Antriebsenergie, während die ReFuelEU Aviation eine volumetrische Quote für erneuerbares Kerosin mit einer Unterquote für RFNBO-Kerosin beinhaltet. Die Zielwerte beider Verordnungen für die Zeit nach 2030 erscheinen aus heutiger Sicht sehr ambitioniert.

4. Voraussetzungen für den Marktzugang neuer Kraftstoffe

Die technische Standardisierung (Normung) ist Voraussetzung für das Inverkehrbringen eines neuen Kraftstoffs. Dazu ist es erforderlich, dass die Europäische Kommission ein Mandat zur Normung an die CEN erteilt bzw. dass der Kraftstoff in der Fuel Quality Directive (FQD, dt. Kraftstoffqualitätsrichtlinie) genannt wird. Auf die Normung folgt die nationale Umsetzung. In Deutschland ist dies die Aufnahme des neuen Kraftstoffs in die 10. BImSchV.

Zusätzlich ist die Nachhaltigkeitszertifizierung gemäß Biokraftstoff-Nachhaltigkeitsverordnung (Biokraft-NachV) verbindliche Marktzugangsvoraussetzung für marktgängige und neue Kraftstoffe, sowohl für Biokraftstoffe als auch für RFNBO.

5. Politische Akzeptanz der Mehrkosten neuer Kraftstoffe

Unter welchen Bedingungen werden die Mehrkosten erneuerbarer Kraftstoffe politisch akzeptiert? Die Akzeptanz ist u. a. abhängig von Höhe und Sichtbarkeit der Mehrkosten: Der geringe Mehrpreis infolge niedriger Beimischungshöhen (< 15%) hat politische Kritik an den Kosten der Quotenregelungen der vergangenen Jahre (ab 2007: Biokraftstoffquote, ab 2015: THG-Quote) faktisch verhindert.

Die Kompensation des Mehrpreises für höhere Beimischungen und Reinkraftstoff kann die politische Akzeptanz sichern: durch CO₂-Bepreisung (nationaler Emissionshandel/nETS, zukünftig: EU-Emissionshandel/ETS II), eine CO₂-bezogene Besteuerung (Revision der ETD/Energy Tax Directive, dt. Energiesteuerrichtlinie und/oder Änderung des EnStG/Energiesteuergesetz) und/oder den so genannten Quotenhandel im Rahmen der THG-Quote. Auch eine Begünstigung neuer Kraftstoffe bei der Energiesteuer eine Kompensation des Mehrpreises erlauben, wobei dauerhafte Steuermindereinnahmen erfahrungsgemäß politisch nicht akzeptiert werden.

Implications of RED III and ETS2 on Mobility Decarbonization Pathways - A European Perspective

Andreas Kolbeck, Isabella Faddul de Almeida, Erno Scheers

Executive Summary

The presentation examines how the evolving European regulatory framework — most notably the *Renewable Energy Directive (RED III)* and the *EU Emissions Trading System for road transport and buildings (ETS2)* — will shape cost-effective decarbonization pathways for road mobility on the path to the EU's legally binding *net-zero by 2050* objective. While both instruments pursue emissions reduction, they operate under fundamentally different mechanisms, creating both opportunities and challenges for fuel suppliers, OEMs, and consumers.

RED III focuses on renewable energy deployment and greenhouse gas (GHG) intensity reduction, placing the obligation on fuel suppliers to blend renewable fuels and energy into the transport pool. Compliance is technology-neutral but bounded by *feed-stock eligibility, minimum sub-quotas, and maximum caps* for different fuel categories (e.g., food/feed biofuels, Annex IX waste-based fuels, advanced biofuels, RFNBOs, and renewable electricity). Fuels are differentiated based on their *actual carbon intensity*, rewarding lower-CI pathways but constraining scalability through sustainability criteria and competing demand, particularly from aviation (SAF).

ETS2, which will apply from 2028, introduces a cap-and-trade system covering road transport, buildings, and small industry. Fuel suppliers must surrender allowances for verified emissions associated with fuel placed on the market. In contrast to RED III, all RED-compliant renewable fuels are treated as *zero-rated*, regardless of their individual carbon intensity. ETS2 therefore provides a strong economic signal via carbon pricing but limited differentiation between renewable fuel pathways, with allowance price uncertainty adding complexity to compliance planning.

Using Germany as a case study, the presentation highlights how RED III will be implemented through the national *GHG quota system*, with steadily increasing reduction targets, defined penalties, and detailed eligibility rules. The transition from Germany's national emissions trading system (nEHS) to ETS2 in 2028 marks a shift from fixed CO₂ prices to a market-based system, increasing both flexibility and exposure to price volatility.

From a system perspective, the analysis shows that *electrification alone is insufficient*. Rising BEV penetration reduces fossil fuel demand and the ETS2 obligated pool which is supporting compliance. However, Biofuels therefore risk declining in absolute terms unless *higher blend levels* are enabled. A key example is ethanol: the *E10 blend wall* limits volumes as gasoline demand shrinks, while a move to E20 could maintain ethanol volumes, to support RED and ETS2 compliance, and leverage ethanol's octane

value to implement other renewable fuel streams — but E20 is subject to *FQD revision* and OEM vehicle approval.

For heavy-duty transport, BioLNG expands the feedstock base and provides a scalable decarbonization option, as demonstrated by initiatives such as the *Tour d'Europe*. Overall, the clear message is: *no single technology pathway can deliver transport decarbonization* on an ambitious timeline.

The presentation concludes that achieving EU climate targets requires a *mosaic of vehicles and fuels*, including BEVs, renewable fuels, and hydrogen for e-fuels. Policies must become more consistent across RED, ETS2, and vehicle CO₂ standards, with greater recognition of renewable fuels, technology neutrality, and joint advocacy between OEMs and fuel suppliers to unlock cost-efficient, scalable decarbonization of road transport.

Zusammenfassung

Die Präsentation untersucht, wie der sich wandelnde europäische Rechtsrahmen – insbesondere die Erneuerbare-Energien-Richtlinie (RED III) und das EU-Emissionshandelssystem für den Straßenverkehr und Gebäude (ETS2) – kosteneffiziente Wege zur Dekarbonisierung der Straßenmobilität auf dem Weg zum rechtsverbindlichen Ziel der EU, bis 2050 Netto-Null-Emissionen zu erreichen, prägen wird. Obwohl beide Instrumente auf eine Emissionsminderung abzielen, funktionieren sie nach grundlegend unterschiedlichen Mechanismen, was sowohl Chancen als auch Herausforderungen für Kraftstofflieferanten, OEMs und Verbraucher mit sich bringt.

RED III konzentriert sich auf den Einsatz erneuerbarer Energien und die Verringerung der Treibhausgasintensität (GHG) und verpflichtet Kraftstofflieferanten dazu, erneuerbare Kraftstoffe und Energie in den Verkehrspool einzumischen. Die Einhaltung der Vorschriften ist technologieneutral, unterliegt jedoch Einschränkungen hinsichtlich der Zulässigkeit von Rohstoffen, Mindestanteilen und Obergrenzen für verschiedene Kraftstoffkategorien (z. B. Biokraftstoffe aus Nahrungs- und Futtermitteln, Kraftstoffe auf Abfallbasis gemäß Anhang IX, fortschrittliche Biokraftstoffe, RFNBOs und erneuerbarer Strom). Kraftstoffe werden anhand ihrer tatsächlichen Kohlenstoffintensität differenziert, wobei Wege mit niedrigerer Kohlenstoffintensität belohnt werden, die Skalierbarkeit jedoch durch Nachhaltigkeitskriterien und konkurrierende Nachfrage, insbesondere aus dem Luftverkehr (SAF), eingeschränkt wird.

ETS2, das ab 2028 gelten wird, führt ein Cap-and-Trade-System ein, das den Straßenverkehr, Gebäude und die Kleinindustrie abdeckt. Kraftstofflieferanten müssen Emissionszertifikate für verifizierte Emissionen abgeben, die mit dem auf den Markt gebrachten Kraftstoff verbunden sind. Im Gegensatz zu RED III werden alle RED-konformen erneuerbaren Kraftstoffe unabhängig von ihrer individuellen Kohlenstoffintensität als emissionsfrei behandelt. ETS2 sendet daher über die CO₂-Bepreisung ein starkes wirtschaftliches Signal, unterscheidet jedoch nur begrenzt zwischen den verschiedenen Pfaden für erneuerbare Kraftstoffe, wobei die Unsicherheit hinsichtlich der Zertifikatspreise die Planung der Einhaltung der Vorschriften erschwert.

Anhand einer Fallstudie zu Deutschland verdeutlicht die Präsentation, wie RED III über das nationale Treibhausgas-Quotensystem umgesetzt wird, mit stetig steigenden Reduktionszielen, festgelegten Strafen und detaillierten Zulassungsregeln. Der Übergang vom deutschen nationalen Emissionshandelssystem (nEHS) zu ETS2 im Jahr 2028 markiert einen Wechsel von festen CO₂-Preisen zu einem marktbasiereten System, was sowohl die Flexibilität als auch die Anfälligkeit gegenüber Preisschwankungen erhöht.

Aus systemischer Sicht zeigt die Analyse, dass Elektrifizierung allein nicht ausreicht. Die steigende Verbreitung von BEVs verringert die Nachfrage nach fossilen Brennstoffen und den ETS2-Verpflichtungspool, der die Einhaltung der Vorschriften unterstützt. Biokraftstoffe laufen daher Gefahr, in absoluten Zahlen zurückzugehen, sofern keine höheren Beimischungsanteile ermöglicht werden. Ein wichtiges Beispiel ist Ethanol: Die E10-Beimischungsgrenze schränkt die Mengen ein, da die Benzinnachfrage schrumpft, während eine Umstellung auf E20 die Ethanolmengen aufrechterhalten könnte, um die Einhaltung der RED- und ETS2-Vorgaben zu unterstützen und die Oktanzahl von Ethanol zur Einführung anderer erneuerbarer Kraftstoffströme zu nutzen – allerdings unterliegt E20 einer Überarbeitung der FQD und der Zulassung durch die Fahrzeughersteller.

Im Schwerlastverkehr erweitert BioLNG die Rohstoffbasis und bietet eine skalierbare Option zur Dekarbonisierung, wie Initiativen wie die „Tour d'Europe“ zeigen. Insgesamt lautet die klare Botschaft: Kein einzelner Technologiepfad kann die Dekarbonisierung des Verkehrs innerhalb eines ehrgeizigen Zeitrahmens leisten.

Die Präsentation kommt zu dem Schluss, dass die Erreichung der EU-Klimaziele ein Mosaik aus Fahrzeugen und Kraftstoffen erfordert, darunter BEVs, erneuerbare Kraftstoffe und Wasserstoff für E-Kraftstoffe. Die Politik muss in Bezug auf RED, ETS2 und Fahrzeug-CO₂-Standards konsistenter werden, wobei erneuerbare Kraftstoffe stärker anerkannt werden müssen, Technologieneutralität gewährleistet sein muss und eine gemeinsame Interessenvertretung zwischen OEMs und Kraftstofflieferanten erforderlich ist, um eine kosteneffiziente, skalierbare Dekarbonisierung des Straßenverkehrs zu ermöglichen.



Implications of RED and ETS2 framework on mobility decarbonization pathways

A European Perspective

Dr. **Andreas Kolbeck**, Head of Strategic R&D and OEM liaison
Isabella Faddul de Almeida, Global T&S Strategy Lead
Erno Scheers, Senior P&A Advisor Mobility

7. FJRG Tagung, June 11th, 2026

Copyright of Shell International B.V.

1

Agenda

- 1 European Regulatory Framework
- 2 RED3 & ETS2 → Use case Germany
- 3 Implications on Decarbonization Pathways
- 4 Conclusions

Copyright of Shell International B.V.

3

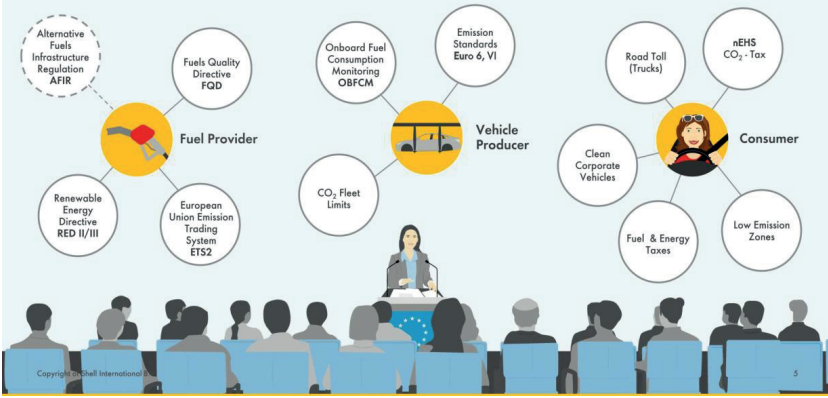
European Regulatory Framework

1

Copyright of Shell International B.V.

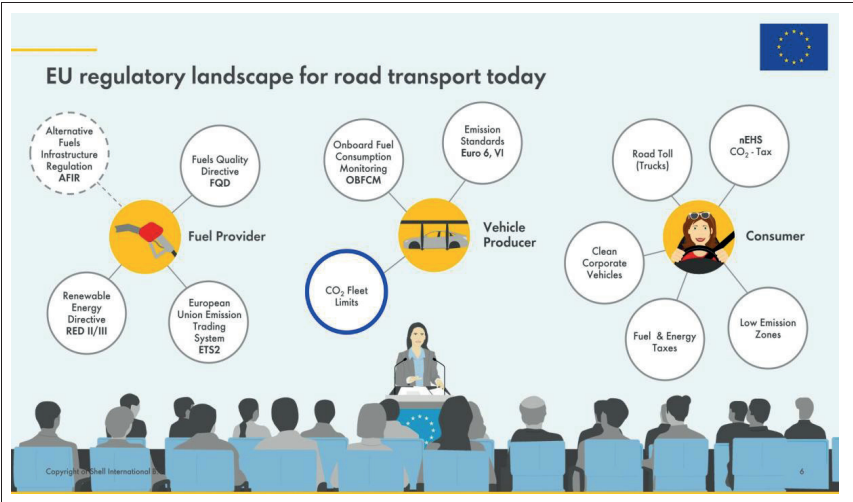
4

EU regulatory landscape for road transport today



Copyright of Shell International B.V.

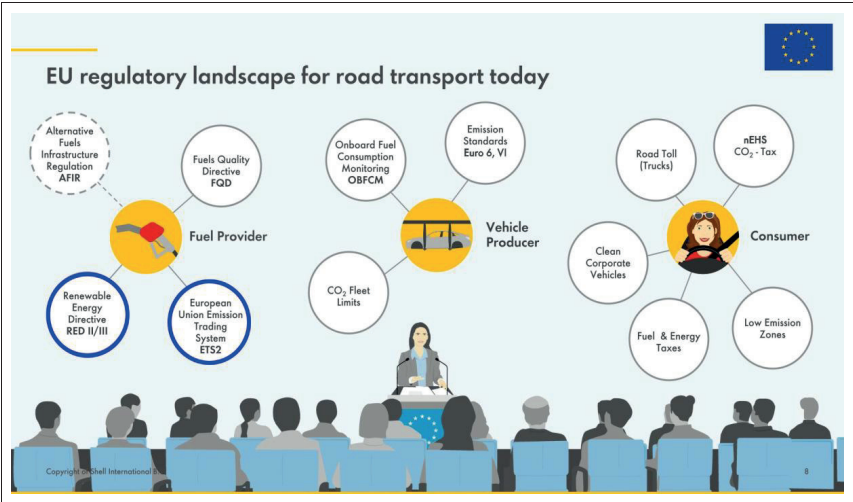
5



The Commission proposed revised LDV CO₂ emission standards do not deliver the anticipated flexibilities, though recognize biofuels

Commission proposal (Dec. 16th 2025)

beyond 2035	CO ₂ TTW emission reduction target drops from 100% to 90% OEMs to compensate by covering upstream emissions using "low carbon steel" and "biofuels"
	Flexibilities capped at 7% (low-carbon steel 'Made in EU') and 3% (2G biofuels & RFNBO, max 1% Annex 9B) vs. 2021 fleet-wide CO ₂ emission targets
up to 2035	OEMs can average out compliance over the 2030-2032 period instead of having to meet it by year
	CO ₂ TTW emission reduction interim target for vans in 2030 drops from 50% to 40%
Not considered	Small (<4.2m length) affordable electric cars 'Made in the EU' generate "super-credits", count 1.3 vehicles
	CNF-only vehicle category
	CCF or fuel flexibility prior to 2035 targets
	Freeze of utility factor for PHEV



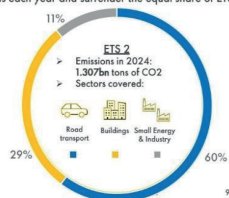
Principles of RED III vs. ETS2

RED III – Renewable Energy Directive

- Obligated entity for road: Suppliers of fossil fuel to the transport sector
- Obligation to blend renewable fuel/energy
- One obligation pool for transport (road, aviation, marine)
- Each renewable fuel is treated based on the individual carbon intensity (CI)
- Actual emission factors: fossil diesel = 95.1 g CO_{2e}/MJ and fossil gasoline = 93.3 g CO_{2e}/MJ
- Measures in case of non-compliance to be defined by the member states.

ETS 2 – Emission Trading System (from 2028)

- Obligated entity: Suppliers of fuels which are used for combustion in the relevant sector (e.g. Road)
- Obligation to surrender ETS2 allowances for their verified emissions corresponding to the quantities of fuels they have released for consumption
- One obligation pool for road, buildings & small industry (aviation & marine are part of ETS1)
- All renewable fuels that comply with RED criteria are 'zero rated' (CI=0) regardless of the individual carbon intensity
- Supply: set amount of ETS2 allowances are auctioned by the European Commission each year.
- Demand: Obligated entities must report their emissions each year and surrender the equal share of ETS2 allowances by 31st of May of the following year.



Copyright of Shell International B.V.

EU Renewable Energy Directive: RED III*

Renewable Type Fuel	Examples	Min energy based	Max energy based
1G Food/feed crop-based biofuels	Biodiesel produced from rapeseed; Ethanol produced from sugar beet, Corn or sugar cane		7.0%
2G Biofuels from UCO and waste fats (Annex IX Part B)	Biodiesel from used cooking oils and waste fats		1.7%
2G advanced Advanced biofuels (Annex IX Part A)	Biofuels or biogas from forestry & agricultural waste, algae or biomass from municipal & industrial waste	5.5%	
RFNBO	Renewable fuel from non-biological origin e.g., green H2, e-fuels	(min. 1.0% RFNBO in 2030)	
Renewable Electricity	Wind & solar energy		

*As per Directive [EU] 2023/2413

Copyright of Shell International B.V.

Proposal by EU Commission for RED III

- At least 14.5% reduction in greenhouse gas intensity or at least 29% renewable energy in the transport by 2030

GHG savings threshold:

- 65% for installations from 2021
- (lower targets for older installations)



ISCC_EU_203_Greenhouse_Gas_Emissions_v4.2.pdf

10

Biofuel Options

1st GEN. BIOFUELS

CROP BIOFUEL

- Biofuel made from food crop on farmland
- Palm oil is being restricted in several countries



Sugarcane Corn Wheat



Rape Seed Palm Oil Soy bean

Diesel blending

- Rape seed oil ME (RME)
- Soy bean oil ME (SME)
- Palm oil ME (PME)
- Coccos oil ME
- HVO

Gasoline blending

- Bio-ethanol made from plant sugars (e.g. wheat, sugar beet, sugarcane, corn kernels)
- Bio-naphtha

2nd GEN. BIOFUELS

WASTE BIOFUEL

- Biofuel generated from used cooking oils and animal fats
- Feedstock listed in RED II Annex IX Part B



Used cooking oils



Animal fats

Diesel blending

- UCOME
- Tallow oil ME
- HVO

Gasoline blending

Bio-naphtha

2nd GEN. ADVANCED BIOFUELS

ADVANCED BIOFUEL

- Biofuel generated from advanced feedstock
- Feedstock listed in RED II Annex IX Part A



POME

Brown Grease

SBE0



Algae

Animal Manure

Straw

Diesel blending

Feedstock selection from Annex IX Part A

Gasoline blending

Cellulosic ethanol

Copyright of Shell International B.V. ME = Methyl Ester
Complete list of advanced feedstock from Annex IX Part A here

POME (Palm oil mill effluent)
SBE0 (Spent bleaching earth oil)

RED III & ETS2 → Use case Germany

2

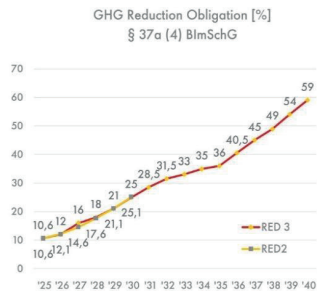
Copyright of Shell International B.V.

12

GHG Reduction Obligation (“GHG Quota”) – RED III Mandate Overview

- All information referring to the cabinet draft, further changes possible
 - Publication of final official legislation: maybe beginning of Q2/2026
 - Intended Implementation date: The day after the public announcement
- Obligated parties for road: Suppliers of fossil petrol and diesel
 - Fuels supplied to Armed Forces, police (federal and state), federal criminal police, customs service, fire brigades, disaster control and to National Petroleum Stockpiling Agency does not create an obligation
- GHG savings exceeding the obligation can be carried into the next year
- Fossil reference GHG value for all obligated fuels from 2026: 94g CO_{2eq}/MJ

Penalty:	Area	Amount
	GHG	600 EUR/ton CO _{2eq}
	Advanced quota (Annex IX Part A)	45 EUR/GJ
	RFNBO	120 EUR/GJ
	ReFuelAviation	4,700 EUR/ton SAF 17,000 EUR/ton RFNBO/e-SAF



Copyright of Shell International B.V.

13

Eligible Fuels and Feedstocks for Biofuels in Germany

Biofuels

- Blended Biofuels (e.g. biodiesel in B7/B10 or ethanol in E10)
- "Pure" Biofuels (including HVO100)
- Co-processed biofuels (only from Annex IXA and Annex IXB)
- Biogenic hydrogen (only for road) only if produced from Annex IX A feedstocks
- Biofuels from soy

Biomethane/BioLNG

- Natural gas taken from grid considered biomethane if quantity of gas taken from grid equals injected quantity. Gas can be taken
 - (1) from EU grid, or
 - (2) 3rd country grid physically connected to EU grid, and all operators registered transactions in UDB (Union Database)

Low carbon hydrogen

- From obligation year 2031, low carbon hydrogen produced through electrolysis and used as intermediate for the conventional fuel production

EV:

- Electricity used in road vehicles (public and private charging)

RFNBOs

- Liquid or gaseous RFNBOs even if they are generated by co-processing
- Liquid or gaseous RFNBOs if they are used as intermediate to produce conventional fuels or biofuels (GHG reduction achieved through RFNBOs must not be considered for GHG savings of biofuels)

NOT ELIGIBLE

- Biofuels from palm (directly excluded, not only indirectly through high iLUC)
- Biofuels from high iLUC biomass
- When brought into market from 2027 onwards:
 - Biofuels from w/r from palm production (incl. POME*, EFBs*, palm fronds&trunks, palm sludge oil, PFAD)
 - Biofuels and RFNBOs for which an on-site inspection of the production plant by competent authority of EU MS was not enabled
- Biofuels produced from raw materials of animal fat origin category 3
- Denatured Bioethanol

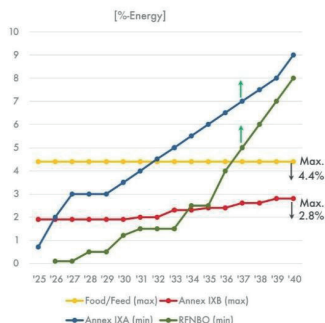
Copyright of Shell International B.V.

14

RED III min/max requirements for Biofuels

- Food/feed biofuels (1st Gen Biofuels): capped at max. 4.4% (energy)
- Annex IXB (2nd Gen Waste): capped at 2.8% in 2040, high iLUC-risk feedstocks are excluded (according to Art. 3 Regulation (EU) 2019/807) currently this is palm
- Annex IXA (2nd Gen Advanced): obligation for a min. blend quota
 - comply with the adv sub-quota and GHG quota at the same time, **except** POME and EFB (advanced sub-quota, but not to GHG quota)
 - excess amounts can be carried into next obligation year
- RFNBO: obligation for a min. blend quota from 2026
 - can be flexibly fulfilled across all modes of transport
 - excess amounts can be carried into next obligation year
 - can be used as intermediates for the biofuels production (refinery route)
 - multiplier on energy basis (GHG quota, but not for sub-quota):

2024	2036	2037	2038	2039	From 2040
3x	2.5x	2x	1.5x	1x	1x



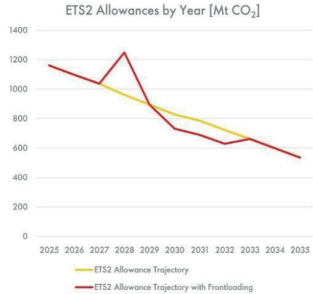
Copyright of Shell International B.V.

EFB (palm Empty Fruit Branches); POME (Palm Oil Mill Effluent)

15

The German national fuel emissions trading system (nEHS) under the BEHG will transition into EU-ETS2 beginning January 1st 2028

- BEHG fully applies (pricing + reporting + certificate surrender) until end of 2027
 - fixed price corridor of 55-65 €/t CO₂
 - Buy-out the remainder at 68 €/t or in the following year at 70 €/t
- ETS2 uses cap-and-trade system with market-driven certificate prices
 - ETS2 certificates can be banked and carried over across years
 - 30% more allowances frontloaded to provide liquidity in the market. These will be taken away in later years.
- An additional 600 million allowances are held in a market stability reserve (MSR) in case of excessive price increase until 2030 (capped at 18%; MSR usage not shown in graph)

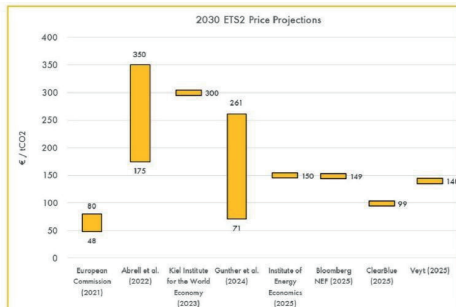


Copyright of Shell International B.V.

16

Various studies have assessed the potential future development of the ETS2 certificate price

- EU Commission considers a price range of 48 – 80 €/t CO₂
- Price range in various studies: 71 – 350 €/t CO₂



Copyright of Shell International B.V.

17

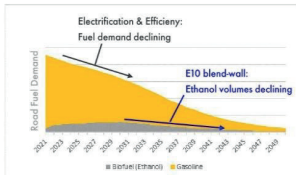
Implications on Decarbonization Pathways

3

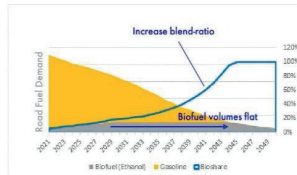
Copyright of Shell International B.V.

18

With BEV market share growth, road fuel demand will decline as will Ethanol blending because of E10 blend-wall. Move to E20 allows to maintain current Ethanol volumes supporting RED/ETS2 compliance



Simplified Model



- Maintaining the Ethanol/Biofuel production volumes constant beyond 2030, the gasoline pool would gradually decarbonize
- E20 grade to mitigate volume erosion & leverage Ethanol-Octane as enabler for further bio-blending (e.g. Naphtha, MTG, ETG)
 - E20 Technical Specification has been approved in November 2025
 - ➔ Key next step: FQD review needed
 - ➔ OEM approval for EU vehicles

Copyright of Shell International B.V.

19

Shell participated “Tour d’Europe” to promote and future-proof BioLNG as Fleet Decarbonization Solution for HD-Trucks

- Tour d’Europe is a collaborative initiative by 24 companies, associations and institutions from the fuels and automotive value chain in Europe, led by FuelsEurope.
- Purpose of the initiative was to show the *availability of 100% renewable fuels* across the EU market already today, and to demonstrate the practicality of *tracking sustainability criteria* along the fuel supply chain using a digital tool.
- Besides BioLNG, fuels demonstrated were HVO100 and B100 in cars & trucks, and 100% renewable gasoline and E85 in gasoline & hybrid cars.
- IVECO organized the BioLNG tour from Rom via Berlin & Paris to Brussels. One IVECO truck was fueled with BioLNG at the Shell Mittenwald station near Berlin.
- Closing event for the tour was in Brussels at the EU parliament together with EU representatives from the Parliament and the Commission.



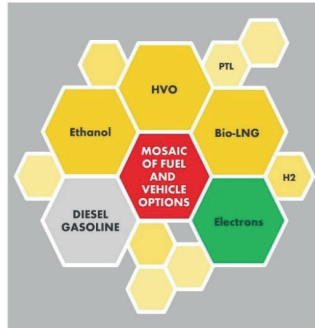
“Tour d’Europe” road trip proves significant GHG reductions from use of renewable fuels Publications - FuelsEurope

Conclusions

4

All technology options are needed to reduce transport CO₂ Emissions

- **RED & ETS2:**
Regulatory framework is very complex, with many specific/national constraints
- **HVO/HEFA:**
considered to be the marginal compliance option – constrained by feedstock availability & competing demand from aviation (SAF)
- **BioLNG & Ethanol:**
enable widening the feedstock pool for compliance
- **Vehicle CO₂ Regulation:**
BEV penetration supports compliance by credit generation (RED3) & lowering the obligated pool (ETS2)



Copyright of Shell International B.V.

22

Shell's draft position on LD/HD vehicle CO₂ standards

To meet the proposed CO₂ reduction trajectory in the CO₂ standards, Shell believes the technology pathway should enable further solutions to contribute in addition to BEV and H₂

Shell calls for an increased recognition for the role of renewable fuels under the CO₂ standards

- A carbon correction factor (CCF) to reflect the increasing share of renewable fuels in the EU fuel pool
 - CCF should be introduced as of 2030 compliance targets
 - CCF should ensure different factors for different fuels (e.g. HVO vs BioLNG)
- A carbon neutral fuel vehicle class to register vehicles running exclusively on renewable fuels as ZEV
- A revision of the Renewable Energy Directive should set renewable fuel volumes + feedstock eligibility

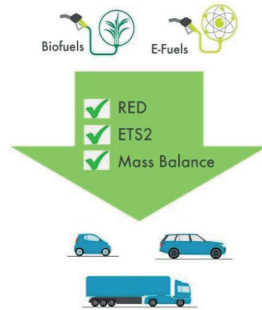
We believe joint advocacy between OEMs and fuel suppliers is needed to move this forward

Copyright of Shell International B.V.

23

Shell view on carbon-neutral fuels in EU road transport

- **Consistent Policy:** Carbon-neutral fuels (CNF) should not be restricted to RFNBOs only but also include renewable fuels that are compliant with the Renewable Energy Directive (RED)
- **Consistent Policy:** CNF should qualify for credits under RED and enabled via ETS2.
- **Market Driven:** No sectoral prioritization across the hard-to-abate sectors (investment security)
- **Technology Neutral:** Electrification will take a significant share in road transport but carbon neutral fuels, including biofuels and biogas, can contribute to meeting the CO2 targets
- **Economically feasible:** Mass balance approach for CNF to avoid dedicated and costly supply chain, infrastructure or vehicles



Revolution in Efficiency and Scalability of Renewable Fuels

Mark Misselhorn

Abstract

Decarbonizing the global transport sector represents a monumental challenge, constrained by the physical limitations of direct electrification for heavy-duty applications and the prohibitive costs and inefficiencies of conventional synthetic fuel production pathways. A novel technological solution is required to bridge the gap between climate targets and industrial reality. This paper introduces the CAPHENIA Power-and-Biogas-to-Liquid (PBtL) technology, a breakthrough process centered on a proprietary multi-zone Plasma Boudouard Reactor (PBR). This integrated system achieves a syngas production energy efficiency of 86% with 100% selectivity, eliminating process-immanent by-products and material losses. The resulting fuels offer a greenhouse gas reduction of up to 92% compared to their fossil counterparts. By fundamentally rethinking the chemistry of syngas production, the CAPHENIA process offers a viable, highly efficient, and economically scalable pathway for producing renewable liquid fuels, poised to accelerate the energy transition in hard-to-abate sectors.

1. The Imperative for a Global Energy and Molecular Transition

The global energy transition is a defining imperative of the 21st century. While decarbonization is the primary objective, the world's deep-seated reliance on fossil fuels, coupled with the inherent limitations of direct electrification, has created a critical gap in our ability to achieve climate neutrality. This gap is most pronounced in the hard-to-abate sectors such as aviation, shipping, and heavy-duty transport, where energy density requirements far exceed the capabilities of current battery technology. This section analyzes the scale of this global challenge, quantifies the limitations of an electricity-only approach, and establishes the scientific and economic rationale for developing advanced, sustainable liquid fuels to power a carbon-neutral future.

1.1 The Scale of the Decarbonization Challenge

The task of achieving global carbon neutrality by 2050 is unprecedented in its scale and complexity. With annual worldwide CO₂ emissions currently at approximately 36 billion tonnes, the global community is tasked with reversing 170 years of emissions growth in just three decades. Despite significant investments in renewable energy, fossil fuels continue to dominate the global energy landscape, providing the vast majority of primary energy consumed worldwide. Figure 1, with data derived from Our World in Data, the Energy Institute, and Smil [1-3], summarizes the global primary energy consumption for 2024 and underscores the immense gap that must be closed.

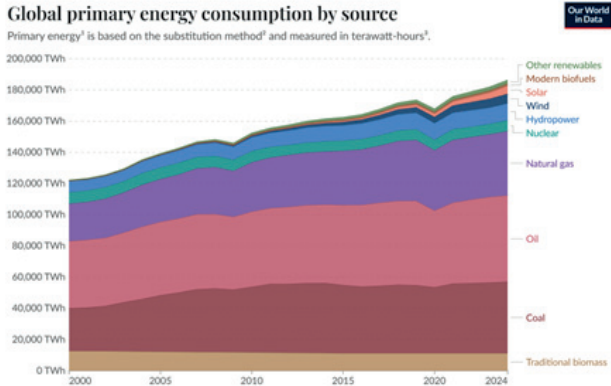


Figure 1: Global Primary Energy Consumption by Source (2024)

1.2 The Dominance of Fossil Fuels and Limitations of Renewable Electricity

Globally, over 80% of final energy consumption originates from fossil or nuclear sources [4]. This dependency persists even in nations leading the energy transition. In Germany, for example, oil remained the single most important energy carrier in 2020, accounting for 33.7% of primary energy consumption, while the combined contribution of wind and solar energy was merely 6% [4].

This disparity highlights a critical structural problem with renewable electricity: the lack of baseload capacity. The intermittent nature of wind and solar power jeopardizes supply security, as these sources cannot guarantee power generation during periods of low wind or sunlight. A study by the Deutsche Energie-Agentur (dena) found that photovoltaics contribute nothing to secured peak load capacity, while onshore wind contributes just 1% of its installed capacity [5]. This phenomenon necessitates reliance on dispatchable power sources to maintain grid stability, fundamentally limiting the reach of direct electrification.

1.3 The Infeasibility of Battery Technology for Hard-to-Abate Sectors

For sectors requiring high energy density and long-range capabilities, such as aviation, battery-electric solutions are not just impractical but physically unfeasible. A quantitative analysis of a modern long-haul aircraft, the Airbus A350-900, illustrates this starkly. The aircraft has a maximum take-off weight of 280 tonnes and can carry 112.8 tonnes of kerosene [6], [7]. To provide the same energy content, a state-of-the-art lithium-ion battery system would weigh approximately 3,630 tonnes – more than thirteen times the aircraft's maximum take-off weight [7], [8].

This disparity is rooted in the fundamental physics of energy storage. As shown by data from the German Aerospace Research and the Fraunhofer Institute [6], [8], the

energy density of kerosene is 40 to 60 times greater than that of a modern lithium-ion battery.

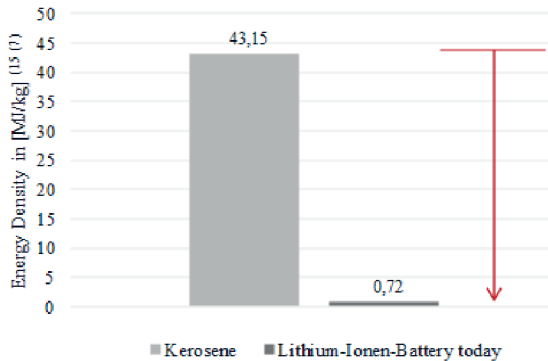


Figure 2: Comparison of the energy densities of kerosene and batteries

Furthermore, the potential for improvement is limited. As Professor Robert Schlögl, Director at the Max Planck Institute for Chemical Energy Conversion, states, "The performance of batteries can, at best, be doubled" [9]. This assessment underscores that even with optimistic technological advancements, batteries will remain orders of magnitude behind the energy density of liquid fuels, precluding their use in long-haul aviation, maritime shipping, and other heavy-duty applications.

1.4 The Scientific Case for Sustainable Molecules

The preceding analysis builds a conclusive case for the necessity of renewable liquid fuels. These "sustainable molecules", chemically identical to their fossil-based counterparts but derived from renewable sources, are the only viable solution for decarbonizing sectors where direct electrification is not feasible. They are essential for powering aviation, shipping, heavy-duty road transport, and construction machinery.

Beyond their role as a transportation fuel, sustainable molecules are critical for ensuring national energy security and enabling a fully renewable energy system. For a country like Germany, which imports over 80% of its energy, liquid fuels provide a practical medium for transporting renewable energy over vast distances, from regions with abundant sun and wind to centers of consumption. They also offer a means for large-scale, long-duration energy storage, balancing the intermittency of renewable electricity.

Crucially, these fuels are "drop-in" ready. They can be used with the existing global fleet of 1.6 billion vehicles, 28,400 aircraft, and 6,500 container ships, as well as the established distribution and refueling infrastructure [10]-[12]. This compatibility allows for immediate and large-scale CO₂ savings without requiring a costly and time-consuming overhaul of the world's transport systems. To fully appreciate this solution, it is

necessary to first understand the fundamental components of these advanced fuels and the syngas from which they are derived.

2. Foundational Concepts: Synthesis Gas and Renewable Fuels

To properly evaluate advanced fuel technologies, it is essential to understand the fundamental chemistry of the fuels themselves and their primary chemical precursors. Liquid fuels are complex molecular structures, but they are synthesized from simple, versatile building blocks. This section will define the chemical nature of common liquid fuels and introduce synthesis gas as a critical platform chemical. This context provides the necessary scientific framework for the subsequent analysis of the CAPHENIA process.

2.1 The Chemical Composition of Liquid Fuels

At their core, liquid fuels such as gasoline, kerosene, and diesel are mixtures of hydrocarbon chains – molecules composed of carbon (C) and hydrogen (H) atoms. The length of these carbon chains determines the physical properties and applications of the fuel.

Table 1: The chain length determines the fuel type

Fuel Type	Carbon Chain Length
Gasoline	C5 to C10
Kerosene	C10 to C16
Diesel	C14 to C20

2.2 Synthesis Gas (Syngas) as a Key Platform Chemical

Synthesis gas, or "syngas," is a mixture of hydrogen (H₂) and carbon monoxide (CO). It is not a final product but rather a highly versatile platform chemical, a fundamental building block from which a vast array of chemicals and fuels can be synthesized. Its key applications include:

- **Liquid Fuels:** Syngas is the primary input for the Fischer-Tropsch (FT) synthesis process, which converts H₂ and CO into long-chain hydrocarbons to produce renewable kerosene, diesel, and gasoline.
- **Basic Chemicals:** It serves as a feedstock for producing methanol, a crucial intermediate for countless chemical products, as well as other foundational chemicals like ethylene and propylene.
- **Industrial Processes:** In the steel industry, syngas is increasingly used as a reducing agent for the direct reduction of iron ore, offering a pathway to decarbonize steel production [13].

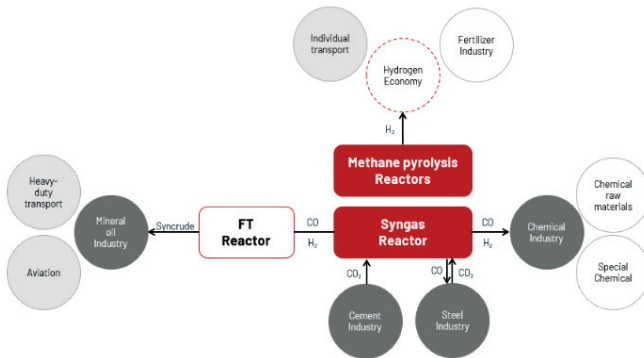


Figure 3: CAPHENIA's syngas process, has far-reaching implications for entire industries

The efficiency and sustainability of the syngas production method is therefore the most critical factor in the entire renewable fuel value chain, illustrated in figure 3.

3. Critical Review of Syngas Production Technologies

The production of synthesis gas is the technical and economic heart of any synthetic fuel process. The choice of technology for this crucial step dictates the overall efficiency, production cost, and environmental impact of the final fuel. To appreciate the novelty of emerging solutions, it is necessary to first evaluate the established industrial landscape. This section will critically review both incumbent fossil-based methods and emerging sustainable alternatives, identifying the specific technological gaps that innovative processes like CAPHENIA's were designed to address.

3.1 State-of-the-Art Fossil-Based Processes and Inherent Emissions

For decades, the global chemical industry has relied on processes that convert fossil fuels into syngas. While mature and scalable, these technologies are characterized by significant process-immanent CO₂ emissions, carbon dioxide that is released as an unavoidable chemical by-product of the reaction itself.

These processes are fundamentally incompatible with a net-zero future, as their reliance on fossil feedstocks and inherent CO₂ emissions make them a primary source of industrial greenhouse gases.

Table 2: CO₂ Emissions from Conventional Syngas Production [14–17]

	Description	Process-Immanent CO ₂ Emissions (kg per tonne syngas)
Steam Methane Reforming (SMR)	Reacts natural gas with steam at high temperature.	~160
Partial Oxidation (POX)	Reacts natural gas with pure oxygen.	~220
Autothermal Reforming (ATR)	A hybrid process combining SMR and POX in a single reactor.	~150
Coal Gasification	Gasifies coal at high temperatures to produce syngas.	~1500

3.2 Emerging Sustainable Alternatives and Their Technical Barriers

In response to the climate imperative, several CO₂-neutral syngas production technologies are under development. However, these emerging alternatives face significant technical and economic barriers that have so far prevented their widespread commercial adoption.

- Power-to-Liquid (PtL): The most discussed e-fuel pathway suffers from very low overall energy efficiency. The process requires an energy-intensive electrolysis step to produce hydrogen, followed by a separate reverse water-gas shift (rWGS) reaction to convert CO₂ into carbon monoxide. This multi-stage approach results in a cumulative energetic efficiency of only 45%-60% for syngas production [18], [19].
- Co-electrolysis: This technology aims to produce syngas directly from water and CO₂ in a single high-temperature electrolysis cell. While promising, it is at a lower technology readiness level and faces significant technical challenges, including rapid catalyst degradation and fouling, which limit operational lifetime and reliability [20].
- Thermochemical Cycles: These processes use concentrated solar heat to drive a series of chemical reactions that split water and CO₂. However, they are hampered by very low solar-to-fuel conversion efficiencies, low yields, and the need for extremely large plant footprints, making them difficult to scale economically [21].

The high energy losses, technical immaturity, and poor scalability of these alternatives mean they are not yet economically viable replacements for conventional methods. This analysis reveals a critical need for a technology that merges high energetic efficiency with a robust, scalable design, a challenge directly addressed by CAPHENIA's novel reactor architecture.

4. The CAPHENIA Solution: The Plasma Boudouard Reactor (PBR)

The CAPHENIA technology is a direct and innovative response to the efficiency and scalability limitations of existing syngas production methods. The core of this breakthrough is the proprietary, catalyst-free Plasma Boudouard Reactor (PBR), a multi-zone system that uniquely integrates three established chemical reactions into a single, seamless process. This design allows for the production of high-quality syngas with unparalleled efficiency, zero by-products, and a minimal environmental footprint.

4.1 The Three-Zone Integrated Reaction Process

The PBR's innovation lies in its intelligent process design, which orchestrates a sequence of high-temperature reactions within distinct but connected zones of a single reactor vessel.

1. **Plasma Zone (Methane Pyrolysis):** In the first zone, a thermal plasma arc operating at very high temperatures provides the intense energy required to split methane (CH_4) directly into its constituent elements: an aerosol of solid carbon (C) and hydrogen gas (H_2). This step generates the first key component of the syngas.
2. **Boudouard Zone (CO_2 Reduction):** The hot gas stream containing the newly formed carbon aerosol flows immediately into the second zone. Here, input carbon dioxide (CO_2) is introduced and reacts with the hot carbon via the Reverse Boudouard Reaction. This reaction ($\text{C} + \text{CO}_2 \rightarrow 2\text{CO}$) efficiently converts the solid carbon and input CO_2 into two units of carbon monoxide (CO), the second key component of the syngas. This step utilizes the thermal energy from the plasma zone, converting it directly into chemical energy.
3. **Carbon-Steam Zone (H_2 :CO Ratio Adjustment):** In the final zone, steam (H_2O) is introduced. It reacts with any remaining solid carbon to produce additional CO and H_2 . This step allows for precise tuning of the final syngas composition, enabling the H_2 :CO ratio to be adjusted anywhere from 1:1 to 3:1 to meet the exact specifications required for various downstream synthesis processes (e.g., Fischer-Tropsch).

4.2 The Power-and-Biogas-to-Liquid (PBtL) Pathway

The CAPHENIA process is strategically designed to leverage biogas as an ideal feedstock with renewable electricity, creating the highly efficient Power-and-Biogas-to-Liquid (PBtL) pathway. Raw biogas is a natural mixture of methane (CH_4) and carbon dioxide (CO_2). The research and development team is working on the technology to ensure that the PBR is uniquely capable of processing these two main components simultaneously and directly.

This elegant process integration extends to resource management; the steam required for the Carbon-Steam zone is supplied by the downstream Fischer-Tropsch synthesis unit, making the overall system a net producer of syngas. This integrated approach, as shown in Fig. 4, streamlines the value chain from advanced biomass to the final synthetic crude oil (syncrude), which can then be refined into drop-in fuels.

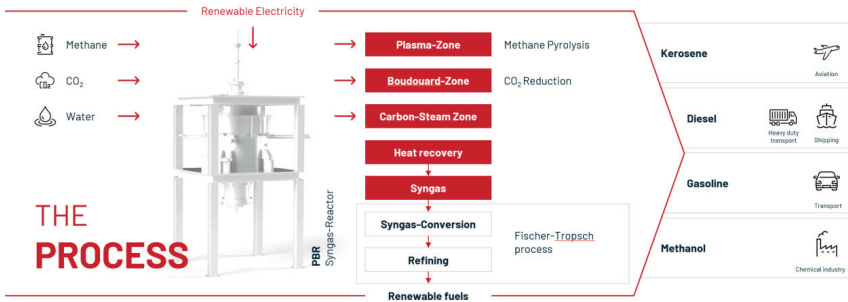


Figure 4: Schematic of the CAPHENIA PBtL Process

5. CAPHENIA: From Vision to Industrial Implementation

A breakthrough technology's value is ultimately measured by its successful transition from concept to real-world application. CAPHENIA has established a clear and strategic path to commercialization, backed by strong partnerships and tangible progress. This section details the company's corporate mission, the development of its first industrial pilot plant, and its strategic vision for addressing the burgeoning global market for renewable fuels.

5.1 Mission and Strategic Partnerships

CAPHENIA's mission is to revolutionize the renewable fuels industry and enable the deep decarbonization of hard-to-abate sectors, including aviation, shipping, and heavy-duty transport. To achieve this, the company has cultivated a robust ecosystem of world-class partners:

- **Manufacturing:** MAN Energy Solutions now Everllence, a global leader in industrial engineering, is the primary partner for manufacturing the Plasma Boudouard Reactors.
- **Project Implementation:** Just recently, the partnership with Siemens AG was announced, in which CAPHENIA is collaborating on automation and simulation tools. Long-standing partners also include InfraServ Höchst, BEST, Emerging Fuels Technologies (EFT), Griesemann, HPI, JEMA, Bilfinger.
- **Research & Development:** The German Aerospace Center (DLR) and the Max Planck Institute for Chemistry (MPIC) provide critical scientific expertise and validation, investigating reaction kinetics and optimizing process efficiency. The following institutes were also involved, TUM, ETH Zürich, INP, HBRS, FfE, TUHH, Tresch+Kieliger

5.2 The "Germany I" Pilot Project

The "Germany I" project represents the first industrial-scale implementation of the CAPHENIA technology, serving as the blueprint for future commercial plants.

- Location: The plant is strategically located at Industriepark Höchst in Frankfurt, Germany, a leading industrial park with state-of-the-art infrastructure and proximity to Frankfurt Airport, a major aviation hub.
- Annual Capacity: The facility is designed to produce 1,420 tonnes of syngas, which can be converted into 500 tonnes of renewable fuels annually.
- Project Timeline: Construction began in March 2024, and the PBR, built by MAN, was delivered to the site in August 2024. Mechanical completion and commissioning are scheduled for the beginning of 2026, with the start of syngas production planned for 2026.

5.2 Global Potential and Market Outlook

The CAPHENIA PBtL technology is poised to address a massive global market. The potential global availability of biomethane feedstock is estimated to be up to 576 million tonnes annually. If fully leveraged via the PBtL pathway, this could yield approximately 518 million tonnes of renewable fuel – a volume capable of making a significant impact on global transport emissions.

The strong market demand for such a solution is already evident. CAPHENIA has secured Sustainable Aviation Fuel (SAF) offtake agreements with major airlines and fuel distributors, signalling clear commercial validation and a robust pipeline for future growth.

6. Conclusion

The global energy transition is at a critical juncture. The physical and economic limitations of direct electrification and conventional Power-to-Liquid (PtL) processes have created a persistent bottleneck, hindering the decarbonization of essential transport sectors like aviation and shipping. A technological paradigm shift is required to produce sustainable fuels at the scale, efficiency, and cost necessary to meet ambitious climate goals.

The CAPHENIA Power-and-Biogas-to-Liquid (PBtL) technology, centered on its innovative Plasma Boudouard Reactor, decisively overcomes these barriers. By integrating three chemical reactions into a single, catalyst-free process, it fundamentally re-engineers the production of synthesis gas. The demonstrated performance, including an 86% syngas efficiency, a 7.6-fold lower electricity consumption for hydrogen production compared to electrolysis, 100% selectivity, and a 92% CO₂ reduction potential, sets a new benchmark for the industry. Coupled with a superior 3D scaling mechanism that promises significant economies-of-scale, the CAPHENIA process is not merely an incremental improvement but a transformative leap. It stands as a leading technological solution poised to accelerate the production of sustainable fuels on a globally relevant scale.

Literature

- [1] H. Ritchie, M. Roser, and P. Rosado, "Energy Production and Consumption," Our World in Data, 2022. [Online]. Available: <https://ourworldindata.org/energy-production-consumption>
- [2] Energy Institute, Statistical Review of World Energy, 2025.
- [3] V. Smil, Energy and Civilization: A History. Cambridge, MA, USA: The MIT Press, 2017.
- [4] Deutsche Bank Research (07. Juni 2021) „Klimapolitische Ansprüche treffen auf energiepolitische Hürden“
- [5] "Dena-Leitstudie Integrierte Energiewende," Deutsche Energie-Agentur (dena), Berlin, Germany, 2018.
- [6] "Zero Emission Aviation – Emissionsfreie Luftfahrt", White Paper, Deutsche Luftfahrtforschung, 2020.
- [7] "A350-900," Airbus. Accessed: Nov. 28, 2025. [Online]. Available: <https://www.airbus.com/en/products-services/commercial-aircraft/passenger-aircraft/a350-family/a350-900>
- [8] "Revolutioniert der Elektroantrieb die Luftfahrt?", DLR-Magazin, 2019.
- [9] A. Thielmann et al., "Batterien für Elektroautos: Faktencheck und Handlungsbedarf," Fraunhofer Institute for Systems and Innovation Research ISI, Karlsruhe, Germany, 2020.
- [10] K. Wolfenstein, "Giants of the Seas: How 6,500 Container Ships Really Keep Global Trade Running," Xpert.Digital, Sep. 26, 2025. [Online]. Available: <https://xpert.digital/en/container-ships/>.
- [11] E. Ortiz-Ospina and M. Roser, "Data Page: Registered vehicles per 1,000 people," Our World in Data, May 19, 2025. [Online]. Available: <https://ourworldindata.org/grapher/registered-vehicles-per-1000-people>.
- [12] B. Prentice, A. DiNota, and L. Hayes, "Global Fleet and MRO Market Forecast 2024-2034," Oliver Wyman, Feb. 2024. [Online]. Available: <https://www.oliver-wyman.com/our-expertise/insights/2024/feb/global-fleet-and-mro-market-forecast-2024-2034.html>.
- [13] N. Lossau, "So geht CO₂-neutral," DIE WELT, Aug. 24, 2019.
- [14] "Innovationen auf dem Weg zu grünem Stahl," SMS Group, 2023. [Online]. Available: <https://www.sms-group.com/de-de/insights/all-insights/innovationen-auf-dem-weg-zu-gruenem-stahl>

- [15] J. Baltusaitis and W. L. Luyben, "Methane Conversion to Syngas for Gas-to-Liquids (GTL): Is Sustainable CO₂ Reuse via Dry Methane Reforming (DMR) Cost Competitive with SMR and ATR Processes?", *ACS Sustainable Chem. Eng.*, vol. 3, no. 9, pp. 2100–2111, 2015, doi: 10.1021/acssuschemeng.5b00368.
- [16] CAPHENIA GmbH, internal calculation, 2023.
- [17] "Gas Production, 2. Processes," in *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, Weinheim, Germany: Wiley-VCH, 2012.
- [18] S. P. Filippov and A. V. Keiko, "Coal Gasification: At the Crossroads. Economic Outlook," *Therm. Eng.*, vol. 68, no. 5, pp. 347–360, 2021, doi: 10.1134/S0040601521050049.
- [19] A. Schreiber, A. Peschel, B. Hentschel, and P. Zapp, "Life Cycle Assessment of Power-to-Syngas: Comparing High Temperature Co-Electrolysis and Steam Methane Reforming," *Front. Energy Res.*, vol. 8, 2020, doi: 10.3389/fenrg.2020.533850.
- [20] "CO₂-Bilanz des CAPHENIA Prozesses," Forschungsstelle für Energiewirtschaft e.V., Munich, Germany, 2019.
- [21] A. Lidor, Y. Aschwanden, J. Häseli, P. Reckinger, P. Haueter, and A. Steinfeld, "High-temperature heat recovery from a solar reactor for the thermochemical redox splitting of H₂O and CO₂," *Applied Energy*, vol. 329, p. 120211, Jan. 2023, doi: 10.1016/j.apenergy.2022.120211.
- [22] McKinsey (2023). Sustainable fuels market scan: Project documentation (CAPHENIA GmbH).

Zukünftige Luftfahrt mit alternativen SAF

Friedrich Dinkelacker

Abstract

Future aviation should contribute to sustainability targets. Here carbon dioxide (CO₂) is commonly counted as greenhouse gas contributor. One discussed approach is to replace the fossil aviation fuel by synthetically produced so called Sustainable Aviation Fuel (SAF), which consists out of the same chemical composition, but, if the energy for its production is from sustainable sources and the carbon is gained from the biosphere (atmosphere or from plants or from waste), it can be counted as carbon neutral. However, the non-CO₂ impact on the environment remains similar to that of fossil fuel, which contributes also significantly to the greenhouse effect. Better would be energy carriers like battery-based electric propulsion, or green hydrogen-based fuel-cells with electric propulsion, or green hydrogen combustion approaches. All of them lack from lower volumetric energy content, leading to strongly reduced flight range. We therefore propose a concept based on alternative sustainable liquid fuels, which allow a very clean nearly premixed combustion mode. This would allow CO₂ neutral, ultra-low soot and ultra-low NO_x combustion with minimised environmental impact. The approach and its challenges are described.

1. Situation von Luftfahrtantrieben und bisherige Alternativen

Die Luftfahrt trägt 2,5 - 3 Prozent der direkten CO₂-Emissionen zum Treibhausgasereffekt bei [1]. Dies klingt gering. Allerdings wächst der Bedarf am Luftverkehr - auch nach der Corona-Pandemie - weltweit mit 4 Prozent. Und es wird ja in vielen anderen Sektoren die CO₂-Emission gesenkt. Damit wird die relative Bedeutung der Luftfahrt auf den Treibhausgasereffekt wachsen. Dazu kommt, dass auch die Nicht-CO₂-Emissionen der Luftfahrt einen direkten negativen Einfluss auf die Treibhausgaswirkung haben, die zwar stark auch von den Bedingungen der Flugebene abhängen, aber nach Abschätzungen von Lee et al. 2021 [2] etwa doppelt so hoch wie der direkte CO₂-Einfluss sind, kommend einerseits von Stickoxid-Emissionen (NO_x) und andererseits aus der Kombination von Rußpartikeln und Wasser, wodurch die Bildung längerlebiger Kondensstreifen angeregt wird.

Die CO₂- und emissionsfreie Alternative wäre das elektrische Fliegen bei Beladung der Batterien mit nachhaltig erzeugtem Strom. Allerdings ist die Speicherung der elektrischen Energie in Batterien mit gegenwärtiger Batterietechnik auf Reichweiten von unter 400 km und mit erwarteter Verdreifachung der Energiespeicherdichte in zukünftigen Batterien auf knapp 1000 km limitiert [3].¹

¹ Die Reisefluggeschwindigkeit ist hier mit Ma = 0.42 angenommen, bei den Mittelstreckenjets sind dagegen mindestens doppelt so hohe Geschwindigkeiten üblich, z.B. beim Airbus A350 Ma = 0,85 (ca. 910 km/h), was einen viel höheren Verbrauch oder eine entsprechend niedrigere Reichweite bedeuten

Eine weitere nahezu emissionsfreie Alternative kann die Energiespeicherung in flüssigem Wasserstoff sein, welcher über Brennstoffzellen in elektrische Energie gewandelt wird [4]. Hier sind zahlreiche technologische Herausforderungen zu meistern, wie die Luftversorgung der Brennstoffzelle unter variablen Umgebungsdruckbedingungen, die Kühlung der Brennstoffzelle, aber auch das Systemgewicht davon [5]. Zudem hat Wasserstoff selbst in supergekühlter flüssiger Form nur eine volumetrische Energiespeicherdichte von 8,4 MJ/L, so dass sehr große Tanks notwendig sind, wohingegen Kerosin hier mit 37 MJ/L mit Tanks auskommt, die weitgehend in die Flügel passen.

Eine weitere Option sind Gasturbinen-Antriebe, die mit Wasserstoffverbrennung betrieben werden. Auch wenn das Tankproblem hier ebenfalls besteht, ist diese Alternative schon etwas näher an der Realisierbarkeit als die Brennstoffzellen-basierte Luftfahrt. Eigene Forschung hierzu wird nachfolgend dargestellt.

Gerade für die Mittel- und Langstreckendistanzen der Luftfahrt sind aber die physikalischen Vorteile der flüssigen Energieträger (Kerosin oder Alternativen dazu) aufgrund ihrer hohen volumetrischen und auch ihrer hohen gravimetrischen Energiespeicherdichte (Kerosin mit 43 MJ/kg) und den vergleichsweise einfachen Tanks so groß, dass diese absehbar weiterhin benötigt werden, um solche Flüge überhaupt zu ermöglichen. Hier geht es also darum, die Kraftstoffe möglichst gut in Richtung Nachhaltigkeit zu entwickeln.

Eine diskutierte Ansatzrichtung spricht hier von "Sustainable Aviation Fuels" (SAF). Hierunter versteht man Kraftstoffe, die zwar bei der Verbrennung weiterhin CO₂ erzeugen (die chemische Zusammensetzung des Fuels bleibt in erster Ordnung gleich), die aber so hergestellt werden, dass hierbei der Kohlenstoff aus der Biosphäre entnommen wird. Dies kann aus Biomasse (wie bei Biokraftstoffen) oder aus Abfallstoffen oder mittels "direkt air-capturing" aus dem CO₂ der Luftatmosphäre geschehen. Weiterhin wird angenommen, dass der ebenfalls nötige Wasserstoff mittels nachhaltiger Verfahren wie Elektrolyse aus Wasser geschieht und die erheblichen Energieaufwendungen der nötigen Umwandlungsschritte mittels Strom aus nachhaltigen Quellen erfolgen. Ist dies alles erfüllt, sind solche SAFs immerhin CO₂-neutral und gehören dann zu den "eFuels". Dahinter steckt in Analogie zur elektrischen Speicherung der Energie in Batterien nun die elektrische Speicherung in diesen energetisch hochwertigen Fuels.²

Flüge, die in Beifügungen oder sogar mit 100 Prozent SAF betrieben werden, konnten realisiert werden [6]. Der Preis für SAF-Kerosin ist bisher deutlich teurer als für fossiles Kerosin. Der kostengünstigste Weg ist hierbei die Nutzung von gebrauchten Speiseölen (hydrogenated vegetable oil, HVO), die relativ leicht in Flugbenzin umgewandelt werden können. Allerdings ist die Verfügbarkeit davon recht begrenzt.

würde. Zusätzlich müssen die Landefahrwerke stabiler ausgelegt werden, weil die schweren Batterien auch bei der Landung dabei sind, während der bisher übliche flüssige Kraftstoff dann weitgehend verbraucht ist.

² Sehr vorteilhaft für SAF-Kerosin ist die etablierte Transportform als flüssiger Energieträger. Damit ist dies eine gute Handelsware, die weltweit am geeignetsten Ort produziert werden kann, die gut transportierbar und speicherbar ist, und die mit der nahezu vorhandenen Flugzeug- und Flughafeninfrastruktur auskommen würde, im Gegensatz beispielsweise zu Wasserstoff oder anderen Lösungen.

Sofern solche synthetisch hergestellten SAFs dieselbe chemische Zusammensetzung haben wie fossil erhaltenes Kerosin, können sie direkt in existierenden Flugtriebwerken eingesetzt werden. Das hat auf der einen Seite den sehr wichtigen Vorteil, dass die existierenden und sehr kapitalintensiven Flugtriebwerke weiter genutzt werden können, von denen es grob geschätzt weltweit mindestens 70.000 im Verkehrsflugzeugbereich gibt und deren Neuentwicklung weit mehr als 10 Jahre benötigt. Auf der anderen Seite bleiben die "Non-CO₂"-Emissionen bestehen, so dass der Treibhausgas-Impakt aufgrund der erwarteten CO₂-Neutralität des eFuels zwar sinkt, aber bei weitem nicht verschwindet.

Für einen effektivere Reduktion davon sind also weitere Ansätze nötig. Hier können drei Ansätze gesehen werden, die im Folgenden kurz angesprochen werden.

2. Wasserstoff-Gasturbinen für die Luftfahrt

Zunächst wird kurz auf Wasserstoff-Verbrennung in Flug-Gasturbinen eingegangen. Sie hat den direkten Vorteil der CO₂-freien Verbrennung. Allerdings bleibt die Stickoxid-Emission als Restproblem für die Umwelt und die Flammenstabilisierung als verbrennungstechnische Herausforderung bestehen.

Da die Wasserstoff/Luft-Verbrennung deutlich reaktiver ist als die Kerosin/Luft-Verbrennung und da die Flammentemperaturen deutlich höher sind, müssen hier insbesondere die Injektoren im Brenner geändert werden. Prinzipiell konnte gezeigt werden, dass dies in manchen Verbrennungsanwendungen möglich ist. Bei Flugtriebwerken bestehen aber noch so viele Fragen, dass beispielsweise im europäischen Verbundprojekt HESTIA derzeit von vielen Forschungseinrichtungen in Europa gemeinsam mit sechs führenden europäischen Flugtriebwerksherstellern fundamentale Grundlagenfragen erforscht werden [7]. Gerade die Zumischung des Wasserstoffes in die durch die Verdichtung erhitzte Verbrennungsluft stellt eine Herausforderung dar. Die Flammen dürfen weder direkt am Brenner aufsitzen, weil dieser dann schmelzen würde, noch dürfen sie zu weit abheben und verlöschen. Gleichzeitig muss der Wasserstoff möglichst gut auf kurzer Strecke mit dem Sauerstoff der Luft vermischt werden. Drittens gilt es, die Flammentemperatur an jedem Ort der Flamme reduziert zu halten, weil hier die Stickoxide (NO_x) entstehen würden.

Es gibt verschieden Forschungsansätze, unserer ist in Abbildung 1 gezeigt, in dem wir den Wasserstoff über zahlreiche sehr kleine Bohrungen aus der zentralen Brennstofflanze seitlich in die Luftströmung einmischen. Diese Multi-Jet-in-Crossflow Konfiguration verspricht eine gute Vermischung auf kleinstem Raum, um so die NO_x-Emissionen sehr effizient auf ein sehr niedriges Niveau zu bringen. Selbst hier mussten wir feststellen, dass die Flammenstabilisierung sehr herausfordernd bleibt. Die Betriebsbedingungen müssen so geschickt gewählt werden, dass hier der Typ IV-Fall von 5 beobachteten Flammenmoden erreicht wird, bei dem die Flamme stabil, aber abgehoben brennt (Abbildung 2) [8][9].

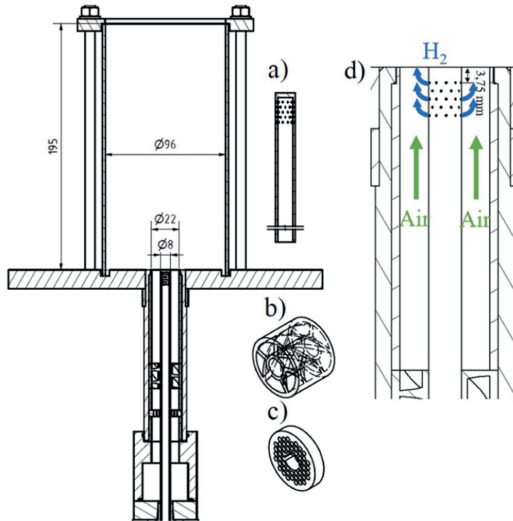


Abbildung 1: Experimenteller Aufbau eines Wasserstoff-Luft-Brenners für die Luftfahrt mit einem Multi-Jet-in-Crossflow-Ansatz zur Einmischung von Wasserstoff in Luft (Koch et al. 2025 [8]).

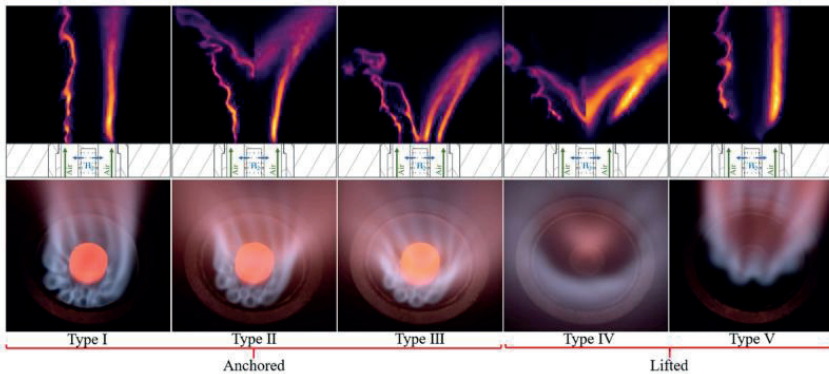


Abbildung 2: Wasserstoff-Luft-Verbrennung mit dem Multi-Jet-in-Crossflow-Brenner mit 5 verschiedenen Stabilisierungsmoden (Koch et al. 2025 [8]).

Im Rahmen des Forschungskonsortiums übernehmen Partner diese sehr genau gemessenen Laborbrennerdaten, um modernste numerische Berechnungsmethoden zu entwickeln und daran zu validieren [7]. Damit können sie dann zu realen Flugtriebwerkskonfigurationen extrapolieren, ein wichtiger Schritt für ihre zukünftige Auslegung.

Im Entwicklungskontext der Luftfahrt wird von den Technology-Readiness-Leveln gesprochen, die von TRL 1 (erste Idee) bis zu TRL 9 (Seriensreife) reicht. Die Forschung im EU Projekt HESTIA erreicht TRL 3 und in ersten Versuchen der Industriepartner TRL 5 [10]. Und das vorher schon angesprochene H₂-Tankproblem ist durchaus auch eine Herausforderung. Damit kann leider noch nicht erwartet werden, in den nächsten Jahren schon wasserstoffgetriebene Flugzeuge im großen Rahmen nutzen zu können.

3. Schadstoffreduzierte Ansätze für die Luftfahrt

Die oben angesprochene Ansatzrichtung der Sustainable Aviation Fuels hat hingegen den TRL 8 bis 9 erreicht, was ein sehr großer Vorteil ist. Nachteilig sind die verbleibenden und leider auch sehr wichtigen Schadstoff-Emissionen. Hier werden weltweit zahlreiche Forschungsanstrengungen unternommen, die sich in drei Richtungen aufteilen lassen:

Erstens kann bei synthetisch hergestellten SAF die Zusammensetzung des Kraftstoffes geändert werden, weil hier neue Herstellungsfreiheitsgrade bestehen. Ganz besonders interessant ist hier die Verringerung der Rußpartikel-Emission, weil dies für die Kondensationsbildung des Wassers und damit für die Kondensstreifenbildung einen großen Einfluss darstellt. Ohne hier ins Detail zu gehen, kann versucht werden, gerade die aromatischen Bestandteile im Kraftstoff zu reduzieren, die, vereinfacht gesagt, prädestinierte Rußvorläufer sind. Die Prozesse dazu sind im Detail sehr komplex (siehe beispielsweise Koob et al. 2024 [11]). Versuchsmessungen an fliegenden Flugzeugen zeigen hier ein eindrucksvolles Potential (beispielsweise [6]).

Zweitens werden Flugtriebwerke kontinuierlich weiterentwickelt. Die Rußentstehung geschieht beispielsweise überwiegend in der ersten fetten Zone einer Brennkammer, um die Flamme bei relativ niedriger Temperatur ohne Stickoxidbildung zu stabilisieren. Durch die Entwicklung besser homogener Injektoren können die lokal fetten Zonen zumindest vermindert werden, wie dies beispielsweise beim TAPS II Brennverfahren von GE angestrebt wird [12]. Die Details sind aber schwierig, so dass noch widersprüchliche Ergebnisse erreicht werden [13].

Drittens wird die Bildung und Vermeidung der Kondensstreifen nun sehr viel genauer auch aus atmosphärenphysikalischer Sicht untersucht. Es ist hier durchaus denkbar, dass die Flugrouten mit leichten Umwegen oder mit Wahl anderer Flughöhen saisonal angepasst werden, um diesen Einfluss schon mal zu vermindern. Hier ist noch wenig Detailwissen bekannt, aber der Hebel erscheint sehr groß, um schon erhebliche Verbesserungen der Umweltauswirkungen bei konventioneller SAF-Nutzung und selbst bei fossilen Kerosinflügen zu erreichen.

4. Der Ansatz der Advanced SAF zur schadstofffreien Luftfahrt

Als radikale Alternative zu konventionellen Flugantriebskonzepten schlagen wir die Mager-Vorverdampfungs-Vormischverbrennung vor (englisch: Lean Prevaporized Premixed LPP Combustion). In den 1990er Jahren wurden zu diesem Brennverfahren etliche auch größere Versuchsreihen durchgeführt, bei denen das damals fossile Ke-

rosin eingesetzt werden sollte [14, 15]. Dies gelang jedoch nicht befriedigend; was verständlich ist, weil Kerosin zu einem großen Teil aus langkettigen Kohlenwasserstoffen besteht, die sich bei den hohen Kompressionstemperaturen in einem Flugtriebwerk bereits nach sehr kurzer Zeit zersetzen und zur zu frühen Selbstzündung führen (z.B. [16]).

Beim LPP Verfahren wird der zunächst flüssige Brennstoff bereits vor der eigentlichen Brennkammer in die komprimierte Luft zugemischt, um sich bis zur Brennkammer mit der Luft zu mischen. Dies homogenisiert das Brennstoff-Luft-Gemisch und vermeidet inhomogene Bereiche, die für die Schadstoffbildung verantwortlich sind.

Ein LPP-Brennverfahren hätte im Idealfall sehr große Vorteile:

- Keinerlei Ruß-Partikelbildung, weil in der Brennkammer keine fetten Zonen mit Sauerstoffmangel auftreten, in denen in konventionellen Brennkammern die Rußpartikel entstehen.
- Nahezu keine Stickoxid-Bildung, weil durch die vorgemischte magere Verbrennung fast keine stöchiometrischen Flammenzonen auftreten, die für den Großteil typischer Stickoxid-Bildungsmechanismen in Flugtriebwerken relevant sind.

Obwohl auch die LPP-Verbrennung die Hauptprodukte CO₂ und Wasser erzeugt, ist die Umweltwirkung hier sehr viel geringer, weil keine Rußpartikel dabei sind, so dass die Kondensstreifenbildung ohne Kondensationskeime sehr viel geringer ist [2]). Zudem ist die NO_x-Emission aufgrund der fehlenden heißen Temperaturbereiche sehr viel geringer, bei stationären Gasturbinen oft unter 50 ppm, so dass auch dieser Impact-Anteil nahezu vernachlässigbar gering ist.

Wenn sowieso synthetische Ersatzkraftstoffe als SAF erzeugt werden sollen, dann, so ist unsere Forschungsvision, können hier anstelle von Kerosin auch andere synthetische eFuels gesucht werden, bei denen die Eigenschaften für das sehr saubere LPP Brennverfahren viel geeigneter als für Kerosin sind [17].

Im Bereich großer stationärer Gasturbinen zur Stromerzeugung ist der Übergang zur dort als "Dry-LOW-NO_x"-Verbrennung bezeichneten fast schadstofffreien Verbrennung bereits in den 1990er Jahren vollzogen worden, weil das dort überwiegend verwendete Erdgas mit seinem sehr hohen Methan-Anteil sehr gut für eine Vormischverbrennung auch unter den entsprechend hohen Kompressionstemperaturen der Luft verwendet werden kann [18].

Im Rahmen unserer Forschungsarbeiten im Excellence Cluster "Sustainable and Energy Efficient Aviation" (TU Braunschweig, Leibniz Universität Hannover, PTB Braunschweig und DLR) erforschen wir zusammen mit den Partnern insbesondere von der PTB Braunschweig, ob es andere flüssige Energieträger gibt, die als synthetisch und nachhaltig herstellbares eFuel solche Eigenschaften haben, dass hier eine sichere Anwendung in einem LPP-Brennverfahren möglich wäre. In unseren ersten Forschungsarbeiten haben wir zunächst ein Screening potentieller synthetisch erzeugter flüssiger Kohlenwasserstoffe durchgeführt [17] und dann typische Zündverzugszeiten und typische Reaktionsraten (in Form laminarer Brenngeschwindigkeiten) untersucht. Ergebnisse dieser mit der PTB Braunschweig gemeinsam durchgeführten Arbeiten sind in [19, 20] veröffentlicht. Sie zeigen, dass beispielsweise kurzkettige Alkohole wie

Propanol oder Butanol potentiell viel besser für LPP-Brennkammern geeignet sind als langkettige Kohlenwasserstoffe, wie sie im Kerosin enthalten sind. Mit Hilfe eines neu entwickelten Reaktionsmechanismus wurden Flammgeschwindigkeiten und Zündverzugszeiten bei triebwerksrelevanten Bedingungen (860 K und 36 atm) berechnet und schließlich hinsichtlich ihrer Eignung als LPP-Brennstoff bewertet.

Ebenso wurden die Zündverzugszeiten berechnet, die für den LPP-Einsatz hinreichend groß sein müssen (mindestens größer als die Verweilzeit im Mischbereich eines LPP-Brenners, die im Bereich einiger ms liegt). Besonders das Iso-Propanol und das Iso-Butanol erscheinen als gute Kandidaten für einen erfolgreichen Einsatz als LPP-Kraftstoff, weil hier die Zündverzugszeiten hinreichend hoch sind, während die Daten für Jet A1 viel zu kurze Zündverzugszeiten zeigen. In [20] sind hierzu auch experimentelle Daten zu Zündverzugszeiten dargestellt, die in der Hochdruck-Zündverzugs-kammer (High Pressure Shock Tube) der PTB Braunschweig im Bereich bis 40 bar sehr genau vermessen werden konnten.

Im nächsten Forschungsschritt haben wir in einer vorheizbaren vereinfachten LPP-Anordnung die direkte Einmischung verschiedener Brennstoffe experimentell untersucht und hier die Flammenrückschlagsgrenzen genauer bestimmt. Hierzu wurde eine Versuchsanlage aufgebaut, in der die Vorverdampfung, Vermischung und Flammenstabilisierung für flexibel wählbare Kraftstoffe möglich ist. Wir konnten nun detaillierte Stabilitätsmessungen für diese Alkohol-Fuels bei erhöhten Temperaturen durchführen (Zimmermann et al. 2023 [21]). Die Ergebnisse zeigen sehr schön sogar die Einflüsse der isomeren Struktur des Alkohols auf die Flammenrückschlagsgrenzen, und die theoretischen Modelle zur Beschreibung davon können deutlich verbessert werden (Bajrami et al. 2024 [22]).

In geplanten Folgevorhaben soll es nun um die technologische Realisierung der LPP Einmischung in den Luftstrom gehen und es sollen zudem Versuche unter erhöhtem Druck durchgeführt werden, um einer Realisierung der ultrasauberen LPP Verbrennung auch unter Flugtriebwerksbedingungen näher zu kommen.

Ganz klar sind diese Versuche noch weit am Anfang, im Bereich von TRL 3, angesetzt. Denn wenn sie realisiert werden könnten, würde dies eine erhebliche Neuauslegung von Flugtriebwerken bedeuten, was auch sicherheitstechnische Untersuchungen nach sich ziehen wird. Gleichwohl wäre diese Option unter all den Anforderungen der Luftfahrt eine sehr lohnende, denn hier könnten nahezu alle konträr erscheinenden Anforderungen gleichzeitig realisiert werden.

5. Zusammenfassung

Wie wird nun die Luftfahrt der Zukunft wirklich aussehen? Diese Eingangsfrage ist nach der Darstellung der verschiedenen Alternativen schwieriger als vorher zu beantworten. Es zeigt sich, dass es so verschiedene Anforderungen gibt, die mit vielen der Alternativen nur in Teilbereichen erfüllbar sind; beispielsweise ist das emissionsfreie elektrische Fliegen auf sehr kurze Strecken beschränkt. Wir arbeiten an einem ultimativ sauberen Ansatz, der eine magere Vorvermischung von flüssigen Energieträgern mit der Luft erlauben würde, der aber noch eine sehr niedrige Entwicklungsreife hat.

Vermutlich wird die Weiterentwicklung bisheriger Triebwerke verbunden mit neuer Flugroutenwahl absehbar den größten Umweltfortschritt ermöglichen bei gleichzeitig möglicher Weiternutzung der bisherigen Triebwerke, die gleichzeitig aber auch deutlich weiterentwickelt werden.

Danksagung

Ich danke den Mitarbeitern unserer Forschung, insbesondere A. Goldmann, P. Zimmermann J. Bajrami und L. Koch am ITV Hannover, S. Nadiri und L. Sane unter der Leitung von R. Fernandes und B. Shu an der PTB Braunschweig und F. Ahrendt und F. Ferraro an der TU Braunschweig.

Wir danken der DFG für die Förderung im Rahmen des Excellence Clusters EXC 2163/1 "Sustainable and Energy Efficient Aviation" (SE²A), welches von der TU Braunschweig in Zusammenarbeit mit der Leibniz Universität Hannover, der PTB Braunschweig und weiteren Partnern durchgeführt wird. Wir danken weiterhin der EU für die Förderung im Rahmen des HESTIA Projektes. Die Forschungsarbeiten werden hier am ITV von L. Koch durchgeführt.

Literatur

- [1] *IATA Fact Sheet: Industry Statistics*, <https://www.iata.org/en/iata-repository/pressroom/factsheets/industry-statistics/> [Abruf: 15.08.2021].
- [2] Lee D.S., Fahey D.W., Skowron A., et al., *The contribution of global aviation to anthropogenic climate forcing for 2000 to 2018*, Atmospheric environment, 117834, 2021. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2020.117834.
- [3] Karpuk, S.; Elham, A. *Influence of Novel Airframe Technologies on the Feasibility of Fully-Electric Regional Aviation*. Aerospace 2021, 8, 163. DOI: 10.3390/aerospace8060163
- [4] Eiselin, S.: *Airbus will 2025 erstmals mit Wasserstofftanks abheben*. In: aeroTelegraph 14. Juni 2021. Abgerufen 04.05.2022.
- [5] Stoewer, M, Meyer, P, Nozinski, M, Lück, S, Kabelac, S, Friedrichs, J, Goeing, J, & Mimic, D. *Design of Fuel Cell Systems in Aviation – Part I: Modelling and Component Design*. Proc. ASME Turbo Expo 2025, Memphis, Tennessee, USA, GT2025-151607. DOI:10.1115/GT2025-151607.
- [6] Dischl, R., Sauer, D., Voigt, et al.: *Measurements of particle emissions of an A350-941 burning 100 % sustainable aviation fuels in cruise*, Atmos. Chem. Phys., 24, 11255–11273, 2024. DOI: 10.5194/acp-24-11255-2024.
- [7] HESTIA - HydrogEn combuSTion in Aero engines. <https://www.hestia-project.eu> (access 24.04.2026).
- [8] L. Koch, J. Bajrami, F. Dinkelacker, *Flame characteristics and lift-off dependencies of flames stabilized on a multi hydrogen jet in swirled crossflow burner*, Proceedings of the Combustion Institute, 41, 105878, 1-7, 2025. DOI: 10.1016/j.proci.2025.105878.
- [9] L. Koch, F. Dinkelacker, *Effect of Flame Stabilization on the NOx Emissions of a Hydrogen Multi Jet in Swirled Crossflow Burner*, ASME Turbo Expo Milano 2026, GT2026-175739, Accepted, in print.

- [10] Clemen, C., Ravikanti, M., La Bianca, N., Eggels, R., Wurm, B., Young, K., *Considerations for hydrogen fueled aerospace gas turbines combustion sub-system design*. ASME Turbo Expo London 2024, GT2024-122593.
- [11] Koob, P., Ferraro, F., Nicolai, H., Eggels, R., Stauffer, M., and Hasse, C.; *Large Eddy Simulation of Soot Formation in a Real Aero-Engine Combustor Using Tabulated Chemistry and a Quadrature-Based Method of Moments*. ASME. *J. Eng. Gas Turbines Power*. 2024; 146(1): 011015. DOI: 10.1115/1.4063376.
- [12] Stickls, R, Barrett, J., *TAPS II Technology Final Report - Technology Assessment Open Report*, Federal Aviation Administration, Washington, DC, USA, Report DTFAWA-10-C-00046, June 2013
- [13] Voigt, C., Märkl, R., Sauer, D. et al. *Substantial aircraft contrail formation at low soot emission levels*. *Nature* 652, 112–118 (2026). DOI 10.1038/s41586-026-10286-0
- [14] Marek C.J., Papathakos, LC; Verbulecz, PW, *Preliminary Studies of Autoignition and Flashback in a Premixing-Prevaporizing Flame Tube Using Jet-A Fuel at Lean Equivalence Ratios*, NASA Technical Memorandum, 1977.
- [15] Penanhoat O., *Low Emissions Combustor Technology Developments in the European Programmes LOPOCOTEP and TLC*, 25th International Congress of the Aeronautical Sciences, 2006.
- [16] Schäfer O., Koch R., Wittig S., *Flashback in Lean Prevaporized Premixed Combustion: Nonswirling Turbulent Pipe Flow Study*, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 3, 670–676, 2003. DOI: 10.1115/1.1581897.
- [17] Goldmann A., Sauter W., Oettinger M., Kluge T., Schröder U., Seume J., Friedrichs J., Dinkelacker F., *A Study on Electrofuels in Aviation*, *Energies*, 2, 392, 2018. DOI: 10.3390/en11020392.
- [18] Lechner, C., Seume, J., *Stationäre Gasturbinen*, 3. Auflage, Springer Vieweg, 2019.
- [19] Zimmermann, P., Nadiri, S., Sane, L., Shu, B., Fernandes, R., Dinkelacker, F., *Numerical investigations on the combustion characteristics of propanol and butanol isomers for sustainable aviation application*, 30. Deutscher Flammentag - für nachhaltige Verbrennung, Hannover-Garbsen, Tagungsband S. 1126-1133, 2021.
- [20] Nadiri, S., Zimmermann, P., Sane, L., Fernandes, R., Dinkelacker, F., Shu, B., *Kinetic modeling study on the combustion characterization of synthetic C3 and C4 alcohols for lean premixed prevaporized combustion*, *Energies*, 2021, 14, 5473. DOI:10.3390/en14175473.
- [21] P. Zimmermann, J. Bajrami, F. Dinkelacker, *Validation of a generic non-swirled multi-fuel burner for the measurement of flame stability limits for research of advanced sustainable aviation fuels*, *Energies*, 16, 7480, 1-17, 2023. DOI: 10.3390/en16227480.
- [22] J. Bajrami, P. Zimmermann, F. Dinkelacker, *Experimental investigation and modeling of boundary layer flashback for non-swirling premixed prevaporized n-propanol/air and iso-propanol/air flames*, *Proc. Combust. Inst.* 40 (2024) 105567. DOI: 10.1016/j.proci.2024.105567.

Sustainable Propulsion Concept for the new Polarstern Research Icebreaker

Detlef Wilde

Kurzfassung

Die Polarstern, 1982 in Dienst gestellt, ist ein deutscher Forschungs- und Versorgungseisbrecher im Besitz des Bundesministeriums für Forschung, Technologie und Raumfahrt (BMFTR), der vom Alfred-Wegener-Institut (AWI) [2] verwaltet und von der Reederei F. Laeisz betrieben wird. Ihr Heimathafen ist Bremerhaven, Deutschland.

Seit über 40 Jahren fährt das Forschungsschiff Polarstern in die Arktis und Antarktis und ermöglicht Menschen aus aller Welt, sicher und effektiv in den entlegensten und extremsten Regionen der Erde zu forschen. Um dies auch in Zukunft auf höchstem wissenschaftlichem und technischem Niveau zu gewährleisten, hat das BMFTR dem AWI die Ausschreibung und Koordinierung des Baus eines Nachfolgeschiffs – der Neuen Polarstern – ermöglicht. Das AWI wird nach erfolgreichen Probefahrten auch die Indienstellung im Jahr 2030 koordinieren.

Die neue Polarstern wird den höchsten Standards für die ganzjährige Forschung in den Polarregionen gerecht und erfüllt gleichzeitig höchste Energieeffizienz- (z. B. Dual-Fuel-Motoren, die den Einsatz nachhaltiger Kraftstoffe wie grünes Methanol ermöglichen) und Umweltstandards (z. B. deutlich reduzierte NO_x- und Partikelemissionen sowie die deutsche Nachhaltigkeitszertifizierung „Blauer Engel“). Damit ist sie ein Paradebeispiel für Innovation und Nachhaltigkeit in der Schifffahrt.

Dieser Beitrag befasst sich mit dem nachhaltigen Antriebskonzept der neuen Polarstern, das die CO₂-Emissionen des Schiffes erheblich reduzieren wird. Dies ist besonders wichtig in den sensiblen Einsatzgebieten der Polarregionen. Damit wird das Schiff zu einem Botschafter für nachhaltigen Schiffbau und nachhaltigen Schiffsbetrieb. Der Beitrag wurde auf der 23. Internationalen Konferenz für erneuerbare Mobilität am 20. Januar 2026 in Berlin vorgestellt [1].

Abstract

Polarstern, commissioned in 1982, is a German research and supply icebreaker owned by the Federal Ministry of Research, Technology and Space (BMFTR), managed by the Alfred Wegener Institute (AWI) [2], and operated by the shipping company F. Laeisz. Its home port is Bremerhaven, Germany.

For over 40 years, the research vessel Polarstern has been sailing to the Arctic and Antarctic, giving people from all over the world the opportunity to conduct research safely and effectively in the most remote and extreme regions of the planet. To ensure that this remains possible at the highest scientific and technical level in the future, the BMFTR has enabled the AWI to put out to tender and coordinate the construction of a successor ship - the New Polarstern. The AWI will also coordinate its commissioning in 2030, following successful sea trials.

The new Polarstern will satisfy the highest standards for conducting research year-round in the polar regions, as well as fulfilling highest energy-efficiency (e.g., dual-fuel motors allowing the use of sustainable fuels such as green methanol) and environmental standards (e.g., significantly reduced NO_x and particle emissions as well as the German Blauer Engel sustainability certification). This makes it a prime example of innovation and sustainability in shipping.

This paper discusses the sustainable propulsion concept of the new Polarstern, which will significantly reduce the ship's CO₂ emissions. This is especially important in its sensitive operational polar regions. This will make the ship an ambassador for sustainable shipbuilding and operation. The paper was presented at the 23rd International Conference on Renewable Mobility in Berlin on January 20, 2026 [1].

1. Introduction

Commissioned in 1982, the RV Polarstern, commissioned in 1982, is a German research and supply icebreaker. It is owned by the Federal Ministry of Research, Technology and Space (BMFTR), managed by the Alfred Wegener Institute (AWI), and operated by the shipping company F. Laeisz. It is based in Bremerhaven and still regarded as one of the world's most prominent polar research vessels.

To ensure that the AWI and the international research community can continue to pursue world-class polar and marine research in the decades to come, AWI has ordered and is overseeing the construction of the new Polarstern at TKMS shipyard in Wismar. The AWI will also coordinate its commissioning in 2030 after successful sea trials.

The new Polarstern will satisfy the highest standards for conducting research year-round in the polar regions, as well as fulfilling highest energy-efficiency (e.g., dual-fuel motors allowing the use of sustainable fuels such as green methanol) and environmental standards (e.g., significantly reduced NO_x and particle emissions as well as the German Blauer Engel sustainability certification). This makes it a prime example of innovation and sustainability in shipping.

2. The current Polarstern

The RV Polarstern [3] is a German research icebreaker and the flagship of the Alfred Wegener Institute AWI. This versatile vessel operates year-round in the Arctic and Antarctic, conducting polar research. It can break through ice up to 1.2 metres thick and operate in temperatures as low as -50°C. The current Polarstern will remain in service until its successor has been successfully trailed and tested. To support this, it will receive renewed ship certification in 2027.

Its main characteristics are:

- Home port: Bremerhaven
- In service: December 9, 1982
- Major refurbishment: 1998-2002
- Shipyard:
 - Nobiskrug, Rendsburg
 - Howaldswerke Deutsche Werft, Kiel
- Length: 118 m, Beam: 25 m, Draft: 10.7 m
- Engine power: 19.198 PS (4 engines)

- Total range: > 1.95 Mio. nm
- Days on sea: approx. 310-320 per year
- Classification: will be renewed in 2027
- Ship operator: Reederei F. Laeisz
- Operation until new ship will be available



Figure 1: Polarstern [3]

3. The new Polarstern

The overall objectives of the Polarstern successor are [4]:

- State of the art polar research and resupply icebreaker
- Multi-disciplinary research-platform
- Germany's contribution for the protection of the oceans and polar regions
 - Germany is a member of the Antarctic Treaty since 1979
 - Actual: 'Guidelines German Arctic Policy', Sep 2024
- Fulfil international obligations and continue / extend the scientific and logistics operations & tasks of current Polarstern
- Ambassador for sustainability in shipping

Like the old ship, the new ship will be equipped with multiple laboratories, onboard helicopters and heavy equipment. In addition, it will have equipment for XL sediment coring and cutting-edge robotics for underwater (ROVs and AUVs) and airborne (UAVs) operations. The moonpool will also enable scientific equipment to be deployed directly from below the ship, even when it is surrounded by sea ice.

The new ship (IMO no.: 1116193), which is being developed by TKMS shipyard in Germany, under an AWI contract, is set to replace the Polarstern in 2030. The construction will take place in Wismar, located on the German Baltic Sea coast.

As a modern, high-performance, sustainable research vessel, the new Polarstern will be capable to operate under changing ice and weather conditions as a Polar Class 2 (PC2) ice breaker. With an ice-breaking performance of 1.8 meters with 20% snow cover at 3 knots, it will be able to reach regions that were previously inaccessible (e.g., the southern Weddell Sea in Antarctica and the Last Ice Area north of Greenland).



Figure 2: Artist Impression of the new Polarstern [1]

4. Sustainable Propulsion Concept

The new vessel will feature a sustainable hybrid propulsion system that can run on either diesel or green methanol. This will make it one of the most eco-friendly icebreakers in the world. It will also feature advanced battery storage and exhaust treatment systems. For a modern polar research icebreaker, sustainability plays a major role given that the ship operates in environmentally sensitive areas.

For us it is basically a moral obligation for our ship!

In addition to sustainable production and operation, the main contributors to the sustainability of the new Polarstern are:

- Emission reduction:
 - NO_x reduction (Tier III minus 30%) through catalysators (SCR)
 - Particle filters (low particle mass and number emissions)

- Propulsion & energy supply:
 - Low-emission hybrid propulsion concept (diesel electric / battery pack)
 - Low-sulphur fuels (Maritime Gas Oil - MGO) plus additional use of alternative fuels (methanol)

The propulsion concept of the new Polarstern is illustrated in Figure 3. It employs a highly efficient fuel electric propulsion concept with

- 2 azimuth propellers
- 1 centre shaft propeller at the stern
- 2 bow thrusters at the front of the ship

The engines used to generate the electric energy that powers the propulsion system.

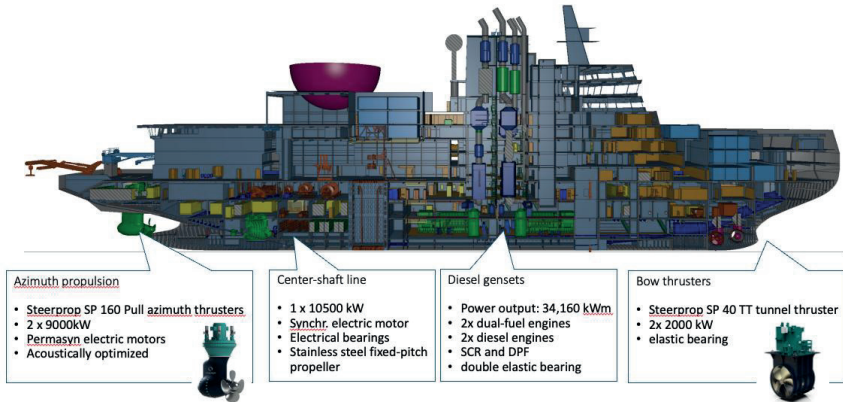


Figure 3: Propulsion concept of the new Polarstern [1]

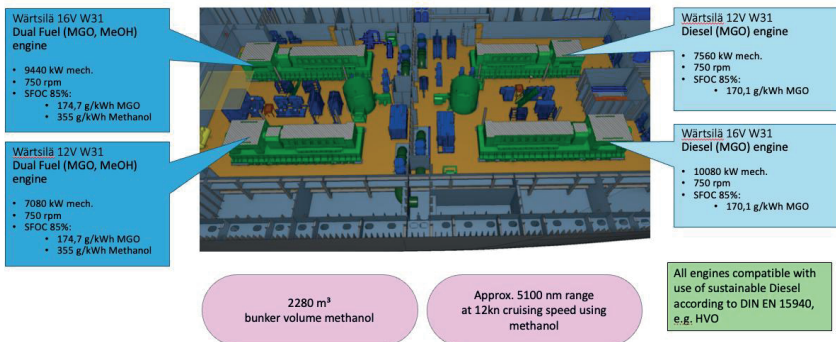


Figure 4: Engines of the new Polarstern [1]

As depicted in Figure 4, the ship will have four main engines. Two of these are pure Diesel (MGO) engines, while two are dual-fuel diesel – methanol engines, which allow for sustainable operation, if green methanol is available. To support the dual-fuel operation, two separate tank systems, one for diesel and one for methanol, will be installed. In addition to their dual fuel capability, all engines will be able to use sustainable fuels such as biodiesel or HVO, in line with DIN EN 15940 standards.

Emission reduction will be ensured by the following main measures:

- NO_x-reduction (Tier III minus 30 %, Urea) through catalysators
- Diesel Particle Filter DPF (low PM- and PN-emissions)
- Temporary „Clean Ship“-Mode (short cycle of emission-free battery mode)
- Use of biologically reducible fats and oils at the ship – water interface
- Waste treatment: separation onboard, avoidance of plastics
- Waste incineration: exhaust treatment according to 17. BImSchG (German Emission Control Law)
- Emission survey in the chimneys
- Abrasion resistant coating

The main reasons to use Methanol are:

- TRL: comparatively high TRL for motors
- Safety: low risk for humans and environment
- Availability is likely to be good on our routes
- Tank arrangement: can be driven directly on outer skin, while partially counter-acting space loss compared to MGO
- Emissions (local): NO_x / SO_x / PM / BC significantly reduced
- Emissions (global): high potential as Bio / e- MeOH to reduce our GHG intensity, i.e., the AWI CO₂ footprint, and to reach Net Zero

However, methanol has a lower energy density (43 %), which leads to much larger tanks (> factor 2) and ship size. Therefore, a compromise is needed between MGO and methanol for icebreakers to have sufficient energy on board, in order to ensure both fuel efficiency and reliability.

With this concept, the new Polarstern will also be ready to fulfil future regulatory frameworks for clean shipping, such as the IMO NZF.

The International Maritime Organisation's (IMO) Net-Zero Framework (NZF) [5] is a proposed regulatory package designed to achieve net-zero greenhouse gas (GHG) emissions from international shipping by or around 2050 (see Figure 5). It combines a global fuel standard to reduce emissions intensity with an economic mechanism to price emissions. Adoption is not expected until late 2026, with the framework due to come into force in 2028. The near-term objective is to implement the 2023 IMO GHG Strategy, which targets at least 5-10% of energy from zero/near-zero GHG sources by 2030.

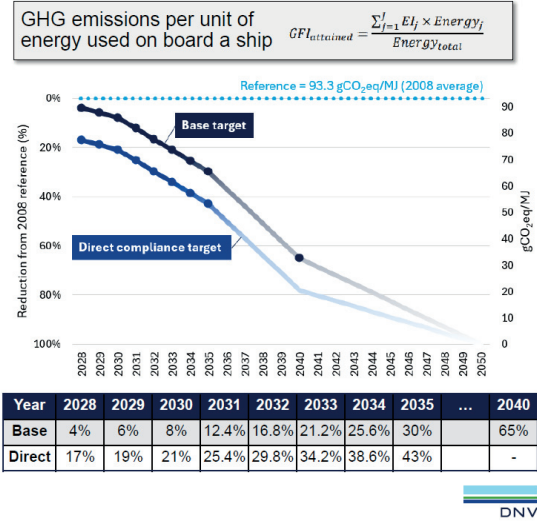


Figure 5: IMO Net Zero Framework [5]

5. Conclusion

The new *Polarstern*, currently under construction at the TKMS shipyard for the Alfred Wegener Institute (AWI), will be a state-of-the-art German research icebreaker. As the successor to the current vessel, it will be one of the most sustainable and advanced icebreakers in operation, featuring green methanol and low-noise propulsion systems, as well as advanced research laboratories for climate science in extreme polar conditions.

The vessel will feature a sustainable hybrid propulsion system, that can run on either diesel or green methanol. This will make it one of the most eco-friendly icebreakers in the world and also enable it to meet future regulatory requirements such as the IMO Net Zero Framework.

Acknowledgements

The development of the new *Polarstern* is funded by the German Ministry for Research Technology and Space BMFTR.

Literature

- [1] Sustainable Propulsion Concept for the new Polarstern Research Icebreaker, Presentation at 23rd International Conference on Renewable Mobility, Detlef Wilde, AWI, 20.01.2026
- [2] AWI homepage: www.awi.de
- [3] Polarstern Wikipedia: Polarstern (Schiff, 1982)
- [4] Polarstern II homepage: polarstern.awi.de
- [5] IMO NZF homepage: www.imo.org

Overall Energy Situation in Germany, Status 2026

Conclusions for the Transition of Energy and Transport Systems

Frank Atzler, Thilo Roß, Ronny Werner

Kurzfassung

Deutschland hatte 2025 einen Primärenergieumsatz von etwa 3000 TWh, in Industrie, Gewerbe, Transport und privaten Haushalten. Seriöse Vorausberechnungen gehen von einer plausiblen Reduzierung auf etwa 2000 TWh/a bis 2050 aus, davon der größte Teil erneuerbar. Heute beträgt der Anteil der Erneuerbaren ca. 20% des Primärenergieumsatzes. Davon werden ca. 2/5 durch Strom aus Photovoltaik und Windkraft gedeckt, 3/5 durch Biomasse, wiederum der größte Teil davon für Heizzwecke.

Heute bestehen fast 70% des Primärenergieeinsatzes aus fossilen Importen! Für 2050 wird der Importanteil immer noch auf ca. 25% geschätzt.

Der zukünftige Weltenergiehandel sollte sich auf Strom und Biomasse stützen. Weil Strom aber schwer zu speichern und zu transportieren ist, wird Wasserstoff elektrolysiert werden. Dieser benötigt aber zur Speicherung entweder sehr hohe Drücke, heute bis ca. 700 bar, oder die Verflüssigung bei -253°C (!). Selbst im flüssigen Zustand hat H_2 aber nur eine geringe volumetrische Energiedichte von 2,34 kWh/L, verglichen mit Diesel von 9,7 kWh/L.

H_2 und CO_2 können recht einfach zu Methanol synthetisiert werden, das bei Umgebungsbedingungen flüssig ist und eine Energiedichte von 4,4 kWh/L besitzt. Das für die MeOH-Synthese benötigte CO_2 kann bei etwa 6 bar und knapp -60°C transportiert werden, also deutlich günstiger als Wasserstoff (oder Flüssig-Methan $\rightarrow -162^{\circ}\text{C}$). Es ist also vorteilhaft, das CO_2 zur Produktionsstätte des H_2 zu transportieren. Wenn es nicht in einer Kreislaufwirtschaft für die Synthese grüner Moleküle verwendet wird, kann CO_2 auch deponiert/verpresst werden. Im Vergleich zu einer reinen Wasserstoff- oder Ammoniak-Wirtschaft kann eine Kohlenstoff-Kreislaufwirtschaft damit nicht nur CO_2 -neutral, sondern sogar Kohlenstoff-negativ werden!

Durch ihre einfache Speicherbarkeit und Handhabung können grüne Moleküle (Methanol, DME, XtG, XtO, eBenzin, eDiesel, eKerosin) während der sogenannten Dunkelflaute für die Rückverstromung verwendet werden, aber auch als geostrategische Reserve oder direkt als Kraftstoff in mobilen Anwendungen.

Keywords: Green Molecules, reFuels, eFuels, renewable, bioFuels, Methanol, Dimethylether, Dunkelflaute, energy storage, energy transport, energy import, electrolysis, photovoltaics PV, wind (energy), levelized cost

1. Introduction: The overall energy situation in industrialised countries. Example: Germany

The baseline today: To understand the implications of the energy transition and, hence, of the transition in the transport sector – a number of boundary conditions need to be made clear. The example of the German energy economy is a placeholder for the situation in many EU member states.

Figure 1 shows on the left the breakdown of energy carriers in the overall energy turnover of Germany in 2024 [1]. This includes all consumers (industry, households, trade, transport, etc.) in Germany. The most important number here is the fraction of renewables of app. 20% in 2024, being far too low to achieve a significant effect on climate change. A frequently published number is that of renewable electricity. This is shown in Figure 2. The fraction of renewable electricity increased from 40% in 2019 to 57% in 2024 and accounts for app. 1/6th of the total energy turnover!

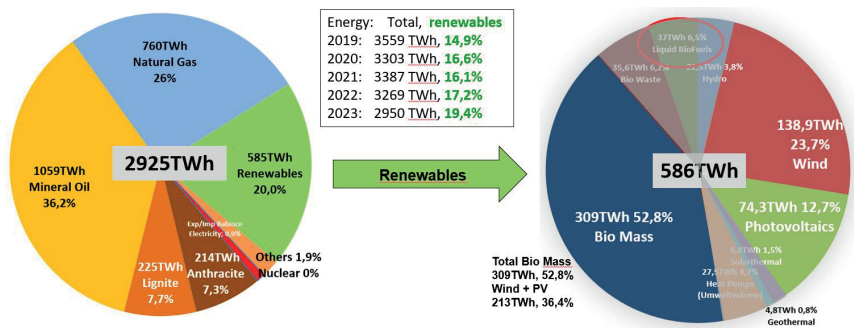


Figure 1: Breakdown of energy carriers in the overall energy turnover from 2019 to 2024 (preliminary data) of Germany (left) and breakdown of renewables (right) [1].

Germany imported from 2000 to 2024 between 60 and nearly 70% of its energy [2]. This situation is similar for the 27 EU members, if on a slightly lower level, as shown in Figure 3. The need of industrialised countries to import energy will be discussed further below.

A view into the future: Figure 4 shows the forecast of primary and final energy demand in Germany for 2050 of Wagner, Elbling and Company, WECOM [3]. The simulated overall primary energy demand agrees well with other forecasts of e.g., the FNR (Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe) 2018 and the “Energiekonzept 2050” of the German Federal Government from 2019, both presented in [4]. WECOM attributes the huge savings mainly to the direct generation of electricity from photovoltaics, PV, and wind turbines (without the losses of steam turbines or large engines), the massively improved insulation of buildings and the use of heat pumps as well as the electric vehicles. Irrespective of whether this scenario is realistic to be achieved, it still predicts remaining imports of app. 25%! This means that the pathways and technologies for energy logistics remain important, both in terms of ecology and cost. Here not only the cost of production of future energy carriers is important, but also that of their long-distance transport, handling and distribution.

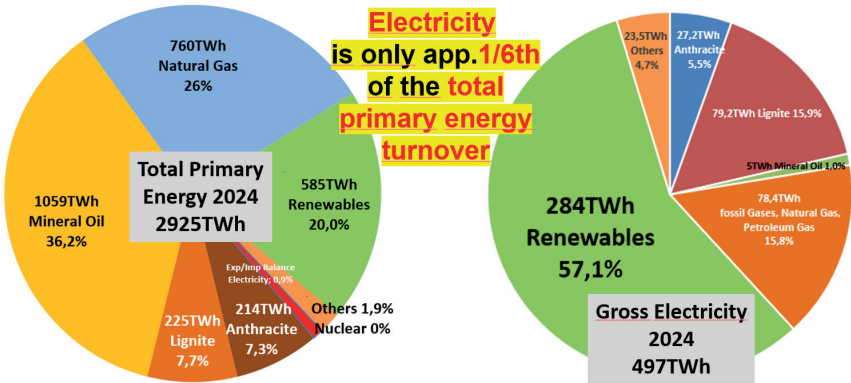


Figure 2: Breakdown of energy carriers 2024 (left) and sources for electricity in Germany (right) [1]

Dependency on energy imports (i.e. primary energy)
<https://www.destatis.de/Europa/DE/Thema/Basistabelle/UmweltEnergie.html>, Status 20.03.2026

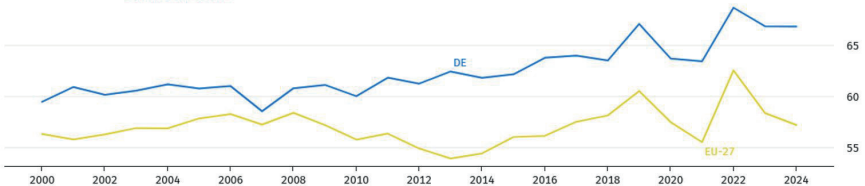


Figure 3: Energy imports for Germany and the average of 27 EU member states [2]

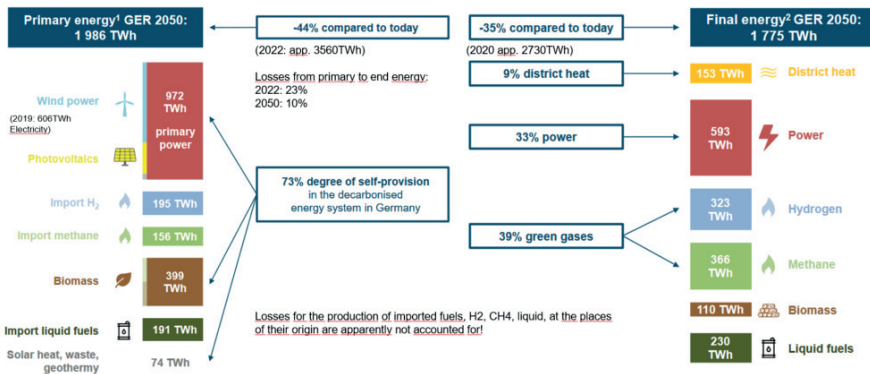


Figure 4: Forecast of primary and final energy demand in Germany for 2050 [3].
 Excl. ambient heat and decentral solar heat (230 prim./186 final TWh) and grid connection losses.

Obviously, these simulations are all based on the supposition, that the results and measures will be implemented in time without political, dogmatic and regulative delays and restraints. In particular the regulation from the Renewable Energies Directive in part are detrimental to this implementation, see also Chapter 6.

If energy imports can be reduced greatly, as assumed in the above quoted studies, the question arises, whether it would even be possible for a country to become completely independent, and this will be discussed in the next Chapter.

2. Energy self-sufficiency?

The evaluation of an energy self-sufficiency of Germany will concentrate on electricity from photovoltaics and wind turbines. The production of energy from waste and biomass was not considered here for simplicity, although these sources will offset a significant fraction of the overall energy demand, in particular biomass, as shown in Figure 4. In the following calculations it is evaluated how much renewable electricity could reasonably be supplied from national land resources.

Table 1 shows an assessment where the number of wind turbines was doubled from app. 30.000 (status 2024) to 60.000. Also, all devices were modernised from an average 3 MW to 6 MW. The full load factor was taken from [5] as approximate average for on- and off-shore applications of app. 23% of 8.760 hours per year. This yields the amount of 725 TWh, which is roughly 20-25% of the annual energy turnover as shown in Figure 1, respectively one third of the demand overall energy forecast for 2050 [3, 4]. Clustered in wind parks with 10 turbines each, this would give 6.000 windfarms. The surface of Germany, 357.000km, divided by 6.000 windfarms yields a surface square of app. 60 km², meaning that the average distance between windfarms would be some 7 to 8 kilometres north-south and east-west.

This improves if off shore facilities are included. The calculated 725 TWh agree well with the forecast of WECOM shown in Figure 4, where app. 2/3rds of 972 TWh electricity (light blue column to the left) are produced from windpower. Although such a scenario seems generally possible, it appears unlikely that this will be realised in the short term. Also, the electric grid needs to be upgraded to allow for an efficient use of renewable electricity! A huge advantage of windpower versus PV is, that wind potentially can blow all year round, whereas PV will work during daylight only, i.e., roughly 4.000 h/a (on average 12 h/d) anywhere in the world, and best during summer.

Table 1: Energy harvest from 60.000 wind turbines in Germany, 6 MW each

No of plants	Full Load Power	Overall Power	Load Factor	Energy harvest
n	MW	MW	for 8760h/a	TWh/a
60000	6	360000	0,23	725
	Turbines per Windpark	Surface of Germany	Surface Square per Park	Distance between Windparks
	-	km ²	km ²	km
60000	10	357000	59,5	7 to 8km

Nevertheless, photovoltaics installations are the second essential measure for future electricity generation. In Germany an average solar irradiation of 1.100 kWh/m²/year

can be assumed [6], which includes long term average weather as well as daily and seasonal sun hours, i.e., the full load factor of roughly 10% is already incorporated in the data. An efficiency of PV modules of app. 20% was supposed, which may improve in the future to 25% or more. Using this efficiency for PV conversion of 20% gives an electric yield of 220 kWh/m²/a. In Table 2 the portion of the German land surface is calculated in km² and in % for the supply of 4 energy scenarios, 1000, 700, 500 and 300 TWh/a, shown in the left column. For each energy quantity three different consumption scenarios are calculated. The top row in each scenario represents the direct consumption of the electricity at a grid efficiency of 90%. The middle row is calculated with a realistic efficiency of app. 35% for the production of H₂ from electrolysis including transport and storage or the production of methanol. The bottom row shows the scenario of electricity generation with the eFuels produced in the middle row, i.e., with an overall efficiency of app. 18%. If it is assumed that all three scenarios will apply simultaneously, the middle row may be taken as representative. The required land surface for a 300 TWh/a, as in the WECOM forecast, scenario is 1.5%. This can be improved to 500 TWh at 2.5% land use, or even an optimistic 700 TWh/a at 3.6% PV surface area. The use of app. 5% of Germany's surface for harvesting 1.000 TWh, appears rather unlikely.

Table 2: Fraction of the German land surface in % to supply the required energy demand in the left column in three different scenarios each from PV

Demand in TWh	Overall energy efficiency	Szenario	Surface fill factor	Effective surface in km2	Effective Surface in % of Germany
1000	0,9	direct consumption	0,70	7055	2,0%
1000	0,35	H2/MeOH prod. & logistics	0,70	18141	5,1%
1000	0,35 x 0,5 = 0,175*	power gen from eFuels*	0,70	36281	10,2%
700	0,9	direct consumption	0,70	4938	1,4%
700	0,35	H2/MeOH prod. & logistics	0,70	12698	3,6%
700	0,175	power gen from eFuels	0,70	25397	7,1%
500	0,9	direct consumption	0,70	3527	1,0%
500	0,35	H2/MeOH prod. & logistics	0,70	9070	2,5%
500	0,175	power gen from eFuels	0,70	18141	5,1%
300**	0,9	direct consumption	0,70	2116	0,6%
300	0,35	H2/MeOH prod. & logistics	0,70	5442	1,5%
300	0,175	power gen from eFuels	0,70	13605	3,8%

* efficiency of MeOH production 35% x efficiency of steam power generation 50%

** 300TWh is the approximate energy harvest forecast by WECOM for 2050

Conclusion: These above derived numbers for wind and PV suggest, that Germany will not become self-sufficient in renewable energies in the mid or long term. The calculations also show quite clearly, that for the energy transition land surface is the single most important resource. Countries with little land resource and dense population will not be able to provide enough energy from their own land, even less so if they are industrialised.

However, the conclusion should by no means be to do nothing. On the contrary: any nation should invest as much as reasonably possibly to support the transition to CO₂-neutral or -free technologies. The emphasis here is on "reasonable" in the sense of ecologically and economically viable and affordable! If the EU countries want to export

these new technologies/systems into the world, they must demonstrate a fully working system at least on a national level.

3. Energy import

The calculations in the previous Chapter demonstrate that the energy self-sufficiency is a question of available surface and the intensity of solar irradiation and wind. Regarding the distribution of solar irradiation onto the world, the “sun belt” of the earth, between app. 40°latitude north and south, receives by a factor of up to 2.3 more sun energy than Germany, i.e., up to 2.500 kWh/m²/year. This offers for the respective countries the perspective to become energy suppliers to the world. For the European Union it would be an interesting perspective to make Portugal, Spain, the South of Italy and Greece the energy producers of Europe. Although it may not be possible to supply all of the needed energy, it would still be a great step forward.

With respect to wind farming, Greenland and Patagonia appear to be extremely suitable for energy harvesting, but also Scotland, Ireland, Denmark and Norway. Also, the Horn of Africa and West Africa apparently could make a viable business from wind farming. Germany again is not a favourable area for this, because the load factor here is just above 20%, while, e.g., in Patagonia load factors can exceed 60% (see e.g. [9]). In Chapter 2 it was established, that countries like Germany are unlikely to become self-sufficient in their renewable energy supply. As laid out in Chapter 3, if energy needs to be imported, the question arises how this should be done best. Intrinsicly linked to the transport of energy is that of storage. Unless electricity can be transported directly and be produced “just in time” according to demand, a method for energy storage is imperative.

In the context of a future renewable energy system, the discussion very often revolves around the most efficient usage of energy. However, a much more sensible approach would regard the whole system, i.e., energy production, storage, transport and usage as well as the cost per unit energy. This must include the imperative of a 100% reliable energy supply, with extremely high resilience against technical failures, geopolitical uncertainties or terrorism etc.. **The energy system must not fail, blackouts are not an option! This needs to be regarded under the undisputed supposition of this paper, that green electricity and electrolysed hydrogen, as well as the extensive use of biomass, are the essential bases of a renewable world energy system.**

Electricity is easily and best transported via cable. Long distance battery transport is out of the question due to the low energy density and charging / discharging losses. Even if the energy density of Lithium-ion batteries is assumed to be 300 Wh/kg, this is minute compared to beyond 11.000 Wh/kg for hydro carbon fuels. 37 ships would be needed instead of one to transport the same energy content. Cost and availability of material resources as well as the CO₂ footprint of battery production are other strong arguments against battery transport storage.

The assessment of the transport of Hydrogen is more complex. The specific volumetric energy content of various reFuels (renewable electricity based synthetic fuels) is given in Table 3. Hydrogen clearly is not a trivial substance in terms of logistics. Liquefaction consumes between 28 and 46% of its heating value, compression to 700 bar app. 12%

[7, 8], depending on the method employed. At 350 bar pressure Hydrogen requires over 11 times the space of Diesel fuel for the same amount of energy transported! Electricity transport via cable is only sensible up to several thousand kilometres without too many losses. A method for this, albeit currently still extremely expensive, is the high voltage direct current transmission, HVDC. Machhammer [9] quotes a technically useful distance of about 6.000 km. In his analysis he counted out the use of pure H₂ in long distance energy logistics with ships due to the low volumetric energy density. With respect to cost, Machhammer in a further investigation [10] compared the combinations “windpower in Patagonia + reFuels transport to Europe” to “wind electricity + BEV” in Germany. He assumed a production of at least 1 GW output, which is a low value in terms of industrialised energy production. 1 GW x 8.670 h/a yields 8.67 TWh (at a load factor of 100%!) compared to 3.000 / 2.000 TWh/a demand for Germany (see Figure 1 and Figure 4). He found, that above a distance of 3.000 km, the price for the unit energy including transport was more expensive for H₂ transported in a pipeline or HVDC transmission than for production and shipping of liquid eFuels.

Table 3: Volumetric and gravimetric energy densities of various renewable energy carriers

Fuel, state of matter	Energy, kWh/Litre*	volumetric Factor with ref. to Diesel	Energy, kWh/kg*
Diesel, liquid at 20°C, 1013 mbar	9,7	1 / 1	11,9
Gasoline, liquid at 20°C, 1013 mbar	8 - 9	0,82-0,93 / 1,08-1,21	11,1-11,6
Methanol, liquid at 20°C, 1013 mbar	4,4	0,45 / 2,2	5,6
Ethanol, liquid at 20°C, 1013 mbar	5,9	0,61 / 1,64	7,4
Ammonia, liquid at 20°C, 8,6 bar	3,17	0,33 / 3	5,2
DME, Di-Methyl-Ether (CH ₃) ₂ O, liquid at 10bar (up to app. 40°C)	5,9	0,61 / 1,64	8
Methane, liquid at -162°C , 1013mbar	5,9	0,61 / 1,64	13,9
Methane, gaseous at 20°C, 200 bar	2,25	0,23 / 3,92	13,9
Hydrogen, liquid at -253°C , 1013 mbar	2,34	0,24 / 4,16	33
Hydrogen, gaseous at 20°C, 700 bar	1,42	0,15 / 6,86	33
Hydrogen, gaseous at 20°C, 350 bar	0,85	0,09 / 11,45	33

For long distance transport, he compared the transport and distribution cost for liquid energy carriers: hydrogen bound in LOHC (liquid organic hydrogen carrier), methanol and synthetic ePetrol and eDiesel. He assumed a transport distance of 14.000 km from Patagonia to Rotterdam, 500 km inland water transport and 200 km road tanker transport. With these prerequisites he compared the combinations “LOHC + tanker + fuel cell” to “eFuel + tanker + internal combustion engine, ICE” to “battery vehicle + electricity generated in Germany”. The result is shown in Figure 5: Specific energy cost in €/t/kWh for different liquid fuels, eMethanol, ePetrol, eDiesel, LOHC-H₂, electricity generated by PV and wind and distributed in Germany [10]. In the cost comparison the grid stabilising measures as well as the infrastructure investment were not included.

Machhammer based his simulation on 3,8 €ct/kWh electricity for wind farming in Patagonia. This agrees with the lowest levelized cost published by Fraunhofer for German field-PV for 2021 [6] of 4 €ct/kWh. For 2024 there was an increase due to higher interest rates and material cost to about 6 €ct/kWh and Off shore appliances are quoted at a minimum of 8 €ct/kWh [11]. This is shown in Figure 6. Prices quoted for electricity from PV in Saudi Arabia are below 1 €ct/kWh, which again indicates, that imported reFuels are a preferred option for low energy unit cost.

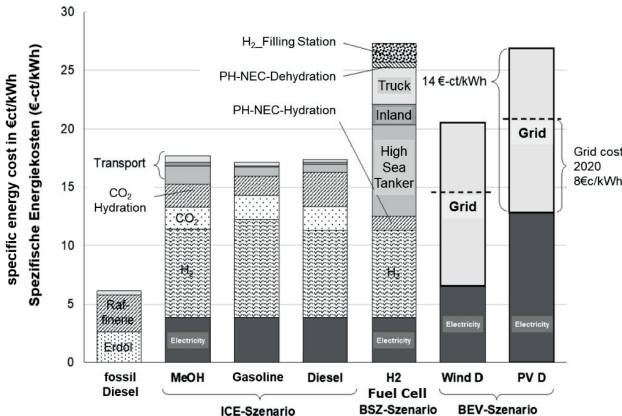


Figure 5: Specific energy cost in €/ct/kWh for different liquid fuels, eMethanol, ePetrol, eDiesel, LOHC-H₂, electricity generated by PV and wind and distributed in Germany [10].

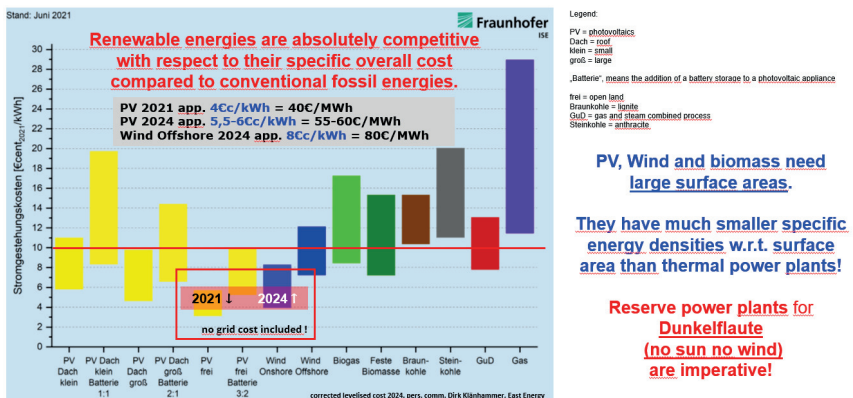


Figure 6: Levelised electricity cost (CAPEX + OPEX) in 2021 and 2024 [6].

The quoted levelized cost for reFuels from Figure 5 of app. 18 €ct/kWh agrees well with a simplified plausibility check. For this simplified calculation the depreciation and the electricity consumption of the electrolysis were taken as the dominant cost of eFuel

production, neglecting CO₂ collection and synthesis as well as fuel transport and distribution. They were assessed as follows:

It was assumed, that a 20 MW electrolyser, running 90% of 8.760 h/a at an efficiency of 70% would produce some 110.000 MWh/a of hydrogen energy. If the efficiency is assumed to be only 55%, for a complete electrolysis plant [12], rather than using a “stack only efficiency” of app. 70%, the output is reduced to app. 87.000 MWh/a, which obviously will increase the depreciation cost as well as the electricity cost per unit H₂ energy.

With these numbers it is now straightforward to calculate the electricity cost and the depreciation and get the “simplified levelized” cost for 1 kWh and 1 kg of H₂, respectively. This is shown in Table 4: Assumed were the prices for free field PV electricity in Germany of app. 6 €/kWh in 2024 (top and middle rows) and of 2 €/kWh for “non-subsidised” PV electricity from Saudi Arabia. For the electrolysis a “mean estimated” value of 1.400 €/kW 2025 and minimum cost of a complete electrolysis plant (not stack only!) of 400 €/kW [12] were assumed. Variations of these key numbers are shown in Table 5.

Table 4: Exemplary calculation of electricity cost (columns 1 to 3 from the left) and depreciation (columns 5 and 6) for “simplified levelized cost” per unit energy, €/kWh, and mass, €/kg, of H₂ (columns 7 to 9).

Specific calculation per 1kW electrolyser power, 55% efficiency, balance of plant							
Electricity CAPEX and OPEX	Electricity consumption for 1kW power	Energy cost per year	Elektrolyser WriteOff	WriteOff per kWh H2 output**	Total cost	Cost / Unit Energy H2	Cost kg H2 (33kWh/kg)
Renewable electricity, 1400€/kW Electrolyser Cost, linear write off 5 years, 45000h --> Bipolar Plates Durability ?							
€/kWh		€	€ total/kW	€/kWh H2		€cent	
6	(90% load)		1400	6,46		17,37	
€/kWh	kWh/year		€/y	€/kWh H2	€/y	€/kWh	€/kg
0,06	7884	473 €	280 €	0,0646	753 €	0,1737	5,73
Renewable electricity, 400€/kW Electrolyser Cost, linear write off 5 years, 45000h --> Bipolar Plates Durability ?							
€/kWh		€	€ total/kW	€/kWh H2		€cent	
6	(90% load)		400	1,84		12,75	
€/kWh	kWh/year		€/y	€/kWh H2	€/y	€/kWh	€/kg
0,06	7884	473 €	80 €	0,0184	553 €	0,1275	4,21
Renewable electricity, 400€/kW Electrolyser Cost, linear write off 5 years, 45000h --> Bipolar Plates Durability ?							
€/kWh***		€	€ total/kW	€/kWh H2		€cent	
2	(90% load)		400	1,84		5,48	
€/kWh	kWh/year		€/y	€/kWh H2	€/y	€/kWh	€/kg
0,02	7884	158 €	80 €	0,0184	238 €	0,0548	1,81

*Energy consumption: 1kW x Load Factor 90% x 8760h/a = 7884kWh; **based on H2 output of 5519kWh H2 = 7884 x 55% efficiency --> "balance of plant"; ***Saudi Arabia, not subsidised

With these numbers it is now straightforward to calculate in a spreadsheet the electricity cost and the depreciation and get the “simplified levelized cost” for 1 kWh / 1 kg of H₂. This is shown exemplarily in Table 4: Assumed were the prices for free field PV electricity in Germany of app. 6 €/kWh in 2024 (top and middle rows) and of 2 €/kWh for “non-subsidised” PV electricity from Saudi Arabia. For the electrolysis an “mean estimated” value of 1.400 €/kW in 2025 and minimum cost of a complete electrolysis plant (not stack only!) of 400 €/kW according to the assessments of REFLAU [12] were assumed. Variations of these key numbers are shown in Table 5.

The calculated minimum hydrogen cost of 70 to 150 €/t agrees well with the announcement of the US Department of Energy of 2021 “to reduce the cost of clean hydrogen by 80% to \$1 per 1 kilogram in 1 decade” (“1 1 1”), i.e., up to 2031 [13].

Table 5: Cost of the unit energy and the unit mass of hydrogen for a variation of the key cost parameters electricity cost, production efficiency, plant cost and depreciation time.

Electricity CAPEX and OPEX	H2 Production efficiency	Cost for 1 kW installed Electrolysis Capacity	Depreciation Time (linear)	Cost per kWh H2	Cost per kg H2
€/kWh	%	€/kW	years	€/kWh H2	€/kg
4	70	2000	5	7,25	4,28 €
4	70	200	5	0,73	2,12 €
1	70	200	5	0,73	0,71 €
6	70	1400	5	5,07	4,50 €
6	70	400	5	1,45	3,31 €
2	70	400	5	1,45	1,42 €
6	55	1400	5	6,46	5,73 €
6	55	400	5	1,84	4,21 €
2	55	400	5	1,84	1,81 €
6	55	1400	10	3,23	4,67 €
6	55	400	10	0,92	3,90 €
2	55	400	10	0,92	1,50 €

In order to estimate the cost of eFuel in a future serial production, the energy cost for the eFuel calculated below are added to the depreciation cost calculated above.

The simplified calculation of the cost per unit energy of the eFuel is explained with the example of very cheap electricity from Saudi Arabia, of app. 1 €/kWh: Methanol contains 4.4 kWh/litre, multiplied by 1 €/kW, and rounded up to 5 €/litre of Methanol. Since the calorific production efficiency of MeOH is between app. 35 and 50%, the above costs are multiplied by 3 for 35%, resp. 2 for 50% efficiency. To compare this to gasoline at app. 9 kWh/litre, i.e., double the energy density of MeOH, the result needs to be doubled again. The results for various calculations are compiled in Table 6. According to this much simplified assessment, in 2025 the litre of ePetrol would cost between 70 €ct in a very optimistic case and 130 €ct in a more realistic scenario, excluding synthesis, transport and storage. Machhammer calculated the levelized cost for the complete chain, with electricity cost of 3.8 €/kWh to be 170 to 180 €/litre of ePetrol, eDiesel or eMethanol. Without synthesis, transport and storage this gives 120 – 140 €/litre, i.e. the agreement of the results is excellent.

In Figure 7 the assessment of this paper and Machhammer's calculations are compared to a study by Frontier Economics [14], which evaluated a large number of studies from well known protagonists of the energy and mobility scene, including CONCAWE, Aramco, Fraunhofer, Agora and others. Due to the large number of the studies and their individual underlying political messages this summary could be called a balanced view on the topic. The red dots mark the simplified assessment of this paper, the orange dot the more comprehensive calculation by Machhammer in 2021. The red dots of the current calculation need to be corrected for synthesis, transport and storage of the eFuel, indicated by the extensions. Excellent agreement is shown.

Table 6: Energy cost for Methanol.
Various cases of electricity and depreciation costs.

	Scenario	Energy €/10kWh	Depreciation €/10kWh	eFuel €/10kWh
2025	best case	20	70	90
2025	realistic	60	70	130
2035?	best case	20	15	35
2035?	realistic	60	15	75

for Gasoline equivalent app. 10kWh/litre
without transport and CO2 separation

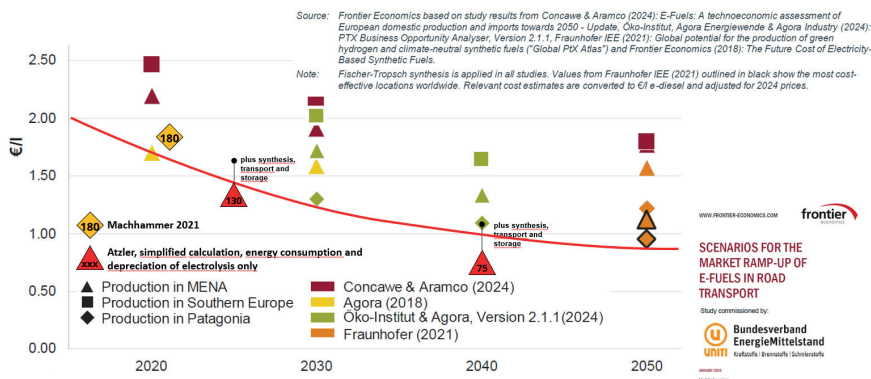


Figure 7: Development of levelised costs of eFuels, determined by Frontier Economics from a large variety of studies, updated in January 2025. The red dots mark the simplified assessment of this paper, the orange dot that of Machhammer in 2021. The red curve demarcates the lower end of the eFuel prices.

4. Industrialisation as key to affordability

To supply goods in high quality and at a low price, an industrialised process with large quantities (volume or mass) or pieces produced is necessary. The costs for the unit produced consist of the invest for the production facility (CAPEX), its operating costs (OPEX), the costs for product development, as well as the desired profit. The total costs are divided by the number of pieces, the volume or mass of produce sold (here the units of energy). This means, that a higher output yields lower costs per unit (or a higher profit). This is shown in Figure 7, where the eFuel levelized costs decrease drastically with the increase in produced volume / the onset of large production and the optimisation of the process. However, the first decisive step that needs to be taken is to begin this large-scale production. The prerequisites for this are discussed in the next Section.

The world's energy turnover was approx. 165,000 TWh/a in 2025. If it is assumed, that 25% of this would need to be supplied from reFuels in the long run, in order to provide energy for high energy process industry and heavy-duty transport, the above sketched robust and cheap process would have to be able to deliver some 4,000 million tons = 40,000 TWh of eFuel per year (Diesel and Gasoline → approx. 10 kWh/kg → 1 Mio t is approx. 10 TWh). The first bottleneck to overcome is the availability of renewable electricity worldwide and in particular in Europe according to the above sketched criteria (full load hours!) and its distribution (in Germany and Europe). The next bottleneck will be the capacity in electrolysis, again worldwide as well as in Europe.

The efficiency plays a secondary role in industrial processes (obviously within certain limits). Reliability and price are dominant parameters. An industrial process must deliver a product for a competitive price reliably in a robust process. If this process requires (some) more energy compared to a highly sophisticated, highly efficient process, which however lacks reliability, with frequent downtimes, then obviously the robust process with a little less efficiency is much preferred. The increased investment due to the lower efficiency will be outweighed by a cheap and reliable production, generating the demanded quantity and a continuous profit!

5. Bankability

The EU has set targets in the Renewables Energy Directive, RED, to further the cause of reFuels for so-called "hard-to-abate" purposes, i.e., applications which can only be electrified with excessive technological effort or not at all. Here especially long-distance air and sea transport often are named, but also heavy-duty agricultural equipment and some other niche applications.

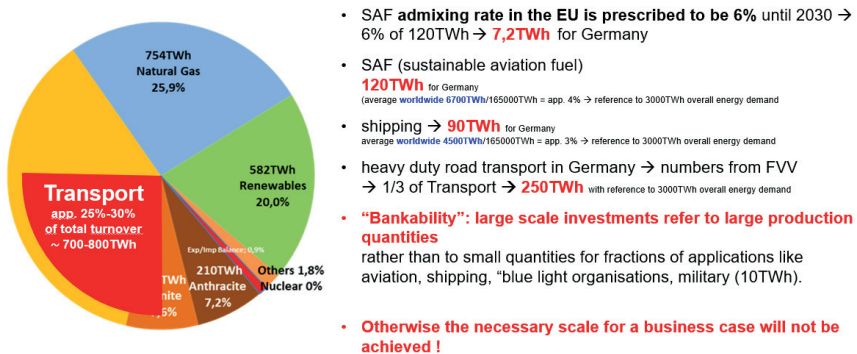


Figure 8: Comparison of overall and transport energy turnover in Germany with fractions of eFuel energy for various purposes (text to the right).

Figure 8 shows the total and the approximate transport energy turnover of Germany. The admixing rate of sustainable aviation fuel to fossil kerosene prescribed in the RED until 2030 is only 6%, equal to just over 7 TWh. This is not very ambitious and does not promote the cause of reFuels sufficiently. The approximate numbers for all of the

aviation and shipping sectors, 120 TWh/a resp. 90 TWh/a suggest a much more attractive business for potential investors! Heavy duty transport, with some 250 TWh/a, is a preferable candidate, since road transport has to pay the price at the pump, which promises good profit margins compared to the meagre margins in aviation or shipping. Here, the EU needs to be more ambitious and additionally to hard-to-abate sectors open the reFuels technology for road vehicles.

In January 2026 the price for fossil kerosene was quoted to be 734 €/t, whereas sustainable aviation fuel, bioSAF, costs 2.085 €/t and eSAF stood at 7.695 €/t [15]. A reduction of SAF prices to competitive level is only possible if eFuels will be produced in industrial scale! This also means, that ePetrol and eDiesel would be produced alongside in the same refinery, since an isolated production of only one particular HC is not possible in such chemical plants. This is yet another reason, why the transport sector needs to be included in the CO₂-neutral consumption of eFuels. The forecast for the worldwide production of eFuels of the eFuel alliance for 2030 [16] is some 1.600 TWh/a. compared to the demand of the German transport Sector of roughly 700-800 TWh, or the current world energy demand of 165.000 TWh this seems not a satisfactory progress.

6. The role of EU Regulation

The Renewable Energies Directive III, RED III, states the targets up to 2050. Up to 2030 the minimum quota of "renewable fuels of non-biological origin", RFNBO, is set to 1.2% for the road sector. This is supposed to rise to 4% in 2036 and to 8% in 2040. These are 8.4 TWh, 28 TWh and 56 TWh, respectively. Such small quantities do not evoke investments into plants, which cost several billion, are depreciated over some 30 years and need guaranteed off-takes.

The second piece of legislation, most relevant to the reFuel market, is the THG quota regulation. Here the CO₂ emissions from the transport sector are counted as off tailpipe, irrespective of the carbon origin of the fuel. The 2026 "relief" of the EU commission for cars and vans, which now only have to achieve 90% CO₂ reduction instead of 100% in 2035 consists of maximally 3% from advanced fuels and 7% from "low carbon steel". A steel production with hydrogen as reducing agent is very likely to never come into scale, due to cost.

With the so-called Recital 11 for cars and Recital 17 for trucks, the EU Commission promised a proposal to allow for vehicles running exclusively on carbon-neutral-fuels, CNF, to be able to register after 2035. So far, this proposal has not materialised. It can be summarised, that the regulatory framework of the EU so far actively prevents reFuels from entering the market, as does the implementation into national law of the German government.

7. The Future Energy System, Outlook and Conclusions

The Fuel Studies IV and IVb study, carried out by Frontier Economics and the ifeu Institute [17], commissioned by the FVV, show clearly, that without the defossilisation of the existing vehicle fleet, the 2035 targets for the emission of greenhouse gases

cannot be reached in Germany/Europe at all. The study made a comparison of several 100%-scenarios, where it was assumed, that the complete fleet would be converted to operate on selected likely CO₂-neutral technologies until 2035. The selected technologies were: Fischer-Tropsch-Fuels, eMethane, eDME (dimethylether), eMethanol, eHydrogen in combustion engines, eHydrogen in fuel cells and electricity in battery vehicles. It was found, that irrespective of the technology used, the by far dominant GHG emission originated from the slow outphasing of fossil fuels in the existing fleet until 2035.

From this the conclusion appears obvious, that we cannot afford to reject any of the technological options of eFuels and bioFuels! Green molecules are an inevitable part of the transition of the energy and mobility systems!

Conclusion of this paper in brief:

- There is enough renewable energy available to transition the world to a green energy system with green transport. Electricity and renewable hydrogen are the basis for the new world energy system, **eMethanol is the “new oil”** for the energy transport and storage requirements.
- Land surface area is the most important resource for PV and wind-power, preferably in world areas with high solar irradiation or wind intensity, in order to facilitate large production quantities and low levelized cost.
- Green electricity production in Germany needs to increase four-fold from 250 TWh in 2025 to 1.000 TWh in 2050 (2045) according to plausible forecasts. This gap needs to be closed and until then green electricity and hydrogen will not be available in abundance in Europe. Therefore, it appears sensible to include imported reFuels for use in high energy industrial processes as well as in mobile applications in order to achieve the CO₂ reduction targets.
- For storage for “Dunkelflaute” and geopolitical reserves eMethanol is very suitable.
- Methanol is a base substance for the chemical industry and can favourably be used for the production of transport fuels or directly as fuel, e.g., in high efficiency ICE concepts.
- The production of Diesel and Kerosene is possible along various routes (Methanol-to-Gasoline or Olefins, DME-to-Olefines, Fischer-Tropsch, and others [18]). About half of the European demand for petrol in 2022 could be covered by biogenic sources [19]
- Although the investments into the “new green world energy system” are humongous, they are very likely to pay back in the midterm. Politics need to set a reliable framework to enable these industrial engagements.
- It is important to create a large enough market, i.e., “bankable” business opportunities, to stimulate industry investments into this technology.
- Geopolitical implications and their repercussions on (critical) raw materials may obstruct progress. Smart industrial policy is needed to circumvent these challenges.
- For the reduction of Green House Gas emissions, the defossilisation of the existing fleet is inevitable. For this, the introduction of refuels is imperative.

References

- [1] Arbeitsgemeinschaft Energiebilanzen, 2019, <https://www.ag-energiebilanzen.de/>
- [2] https://www.destatis.de/Europa/DE/Thema/Umwelt-Energie/_inhalt.html
- [3] Wagner, Elbling and Company, Least-cost Decarbonisation – Target Design for Germany’s Future Energy System, FVV Autumn Conference 06.10.2022
- [4] Sens, Brauer et al. SAE ICE Conference, Capri, September 2019
- [5] <https://de.wikipedia.org/wiki/Vollaststunde>, data from Hahn et al; Die Grenzen des Wachstums sind noch nicht erreicht, Windindustrie in Deutschland 2015 and Fraunhofer ISE 2016
- [6] Fraunhofer ISE, Stromgestehungskosten Erneuerbare Energien, Bericht Stand Juni 2021
- [7] Ulf Bossel: Wasserstoff löst keine Energieprobleme; Technikfolgenabschätzung – Theorie und Praxis. Karlsruher Institut für Technologie, 2006
- [8] Peter Kurzweil, Otto K. Dietlmeier: *Elektrochemische Speicher*. 2. Auflage. Springer Fachmedien, Wiesbaden 2018, ISBN 978-3-658-21828-7, 8.2 Wasserstoffspeicherung.
- [9] O. Machhammer, Regenerativer Strom aus Deutschland oder e-Fuels aus Chile: Worauf sollte die zukünftige Mobilität bauen? DOI: 10.1002/cite.202100003 in Chemie Ingenieur Technik 2021, 93, No.4, pp 641 – 654;
- [10] O. Machhammer, C. Siebels, G. Huber, Energietransport über weite Strecken, Chem. Ing. Tech. 2021, 93 (4), DOI: <https://doi.org/10.1002/cite.202000154>
- [11] Dirk Klänhammer, East Energy, personal communications, April 2024, <https://east-energy.de/>
- [12] Referenzkraftwerk Lausitz, Reflau, Ben Schüppel, personal communications 2024
- [13] <https://www.energy.gov/eere/fuelcells/hydrogen-shot>
- [14] Scenarios for the market ramp-up of e-fuels in road transport; Frontier Economics study commissioned by UNITI, Update January 2025
- [15] EASA -Aviation Fuels Reference prices for ReFuelEU Aviation quote by aireg, Siegfried Knecht at “Fuels of the Future”, Berlin, 19.-20.01.2026
- [16] Tobias Block, eFuels and E-Mobility – What can be achieved by 2050? Presentation, eFuel Alliance, “Fuels of the Future”, Berlin, 19.-20.01.2026
- [17] Fuel Study IVb, Frontier Economics and ifeu Institute, commissioned by Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen, Project No. 1452, FVV Autumn Conference 06.10.2022, Würzburg, Germany
- [18] Conversion of biomass-based syngas into advanced biofuels: process simulation based studies, Dahmen, Karlsruhe Institute of Technology, DECHEMA conference, 13.03.2025, Frankfurt, Germany
- [19] Analysis of the availability of sustainable, biogenic gasoline in Europe; Knap, Beidl et al., Technische Universität Darmstadt, Aston University, Hungarian University of Agriculture and Life Sciences, Karlsruhe Institute of Technology, 12th international engine congress, 25th and 26th February 2025, Baden-Baden, Germany

Gesundheitsrisiken durch Abgase erneuerbarer Kraftstoffe

Jürgen Büniger

Abstract

A large proportion of the general population as well as many workers continue to be exposed to emissions from combustion engines. Diesel engine exhaust (DEE) has long been considered health-relevant, primarily due to its particulate content. Over the past two decades, however, technological advances in engine design, exhaust after-treatment systems, and the increasing use of renewable fuels have led to a substantial reduction in regulated emissions. The aim of the present contribution is to evaluate the health effects of engine exhaust from biodiesel (BD), hydrotreated vegetable oil (HVO), and bioethanol (BE) in comparison with fossil fuels, based on current *in-vitro*-, animal, and human studies.

Overall, available data for DEE from BD indicate a marked reduction in particulate emissions as well as in mutagenic and genotoxic potential when renewable fuels are used. At the same time, human and animal studies show that acute inflammatory responses of the airways may still occur even at very low emission levels. The extent of these effects depends on fuel composition, feedstock origin, as well as engine technology and operating conditions. Data on chronic effects of BD is limited to one animal study, indicating smaller effects on the airways of mice compared to fossil DEE.

For HVO, only a limited number of methodologically robust human studies is available to date, suggesting predominantly minor acute effects and no evidence of genotoxicity, while data on chronic effects are largely lacking. The evidence base for bioethanol emissions is heterogeneous: although reductions in particulate emissions and genotoxicity have been demonstrated, secondary organic aerosols may be capable of inducing oxidative stress and inflammatory responses.

In conclusion, substantial knowledge gaps remain, particularly regarding chronic health effects in humans. Early and systematic occupational and environmental health research therefore remains essential to enable a robust health risk assessment of new fuels and technologies.

Einleitung

Biokraftstoffe wie Biodiesel (BD), hydriertes Pflanzenöl (HVO) und Bioethanol (BE) werden zunehmend als Alternativen zu fossilen Kraftstoffen eingesetzt, um die Abhängigkeit von endlichen Ressourcen zu verringern und den Ausstoß von Treibhausgasen zu reduzieren. Ziel des Einsatzes dieser Kraftstoffe ist eine nachhaltigere und umweltfreundlichere Mobilität. Allerdings sind neben den ökologischen Vorteilen auch potenzielle Gesundheitsrisiken der durch die Verbrennung entstehenden Abgase zu beachten. Diese Risiken sind für den Einsatz fossiler Kraftstoffe bekannt, insbesondere wurden Dieselmotoremissionen (DME) intensiv untersucht und 2012 als krebserregend eingestuft [1]. Insgesamt werden die folgenden Schadstoffe als relevant für die gesundheitliche Bewertung von Verbrennungsmotoremissionen angesehen.

- Partikel (Feinstaub) sind mit Herz-Kreislauf-Erkrankungen, Lungenerkrankungen und erhöhtem Krebsrisiko assoziiert.
- Polyzyklische Aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK): Einige PAK sind mutagen und karzinogen und können bei chronischer Exposition zu Krebs führen.
- Stickoxide (NO_x): NO_x tragen zur Bildung von Ozon und sekundärem Feinstaub bei. Sie können Asthmaanfälle und Atemwegsreizungen auslösen.
- Kurzkettige Aldehyde gelten als reizend und potenziell karzinogen. Sie können Atemwegserkrankungen und Schleimhautreizungen verursachen.

Zahlreiche Studien der FJRG und einiger anderer Arbeitsgruppen zeigten allerdings deutliche Unterschiede in der Zusammensetzung der Abgase fossiler und biogener Kraftstoffe, vor allem eine Minderung der Partikelemissionen, die hauptsächlich für die krebserregende Wirkung von DME verantwortlich gemacht werden, so dass der Einsatz von erneuerbaren Kraftstoffen auch das Krebsrisiko verringert, wie anhand vieler eigener Studien zur Mutagenität von DME bestätigt werden konnte. Aldehyde und PAK waren allerdings teilweise erhöht [2]. Bioethanol zeichnet sich im Vergleich zu Benzin durch eine geringere Partikelanzahl, aber eine erhöhte Produktion von Aldehyden aus. Durch die intensive Fokussierung der Umweltdiskussion auf den CO₂-Ausstoß ist seit ca. 2010 die weitere Forschung zu den anderen Abgasbestandteilen in den Hintergrund getreten. Dennoch gibt es in neuerer Zeit wieder vermehrte wissenschaftliche Forschung und Publikationstätigkeit zu akuten und chronischen Wirkungen aller Abgaskomponenten. Ziel dieses Beitrags ist es, anhand dieser neuen Literatur und vor dem Hintergrund der weiteren Fortschritte bei Motortechnologien, Kraftstoffen und Abgasnachbehandlung die möglichen gesundheitlichen Auswirkungen der Abgase von BD, HVO und BE zu analysieren und im Vergleich zu fossilen Kraftstoffen wissenschaftlich zu bewerten.

Ergebnisse

In den toxikologischen und medizinischen Datenbanken und auf der Webseite des Umweltbundesamtes wurde eine Literaturrecherche neuerer publizierter wissenschaftlicher Studien und Übersichtsarbeiten zur Reduktion der Emissionen und deren Einflüsse auf die möglichen gesundheitlichen Risiken durchgeführt, die zusammen mit eigenen Daten der Fuel Joint Research Group (FJRG) dargestellt werden.

Auf die aktuellen Emissionen soll hier nur kurz eingegangen werden, da sie im Beitrag zur 5. Tagung der FJRG 2022 [3] bereits ausführlich dargestellt wurden und seither keine wesentlichen neuen Erkenntnisse vorliegen. Für die Umweltemissionen und -immissionen biogener Kraftstoffe sind naturgemäß keine separaten Daten verfügbar, da diese nicht von denen anderer Emissionsquellen zu trennen sind. Das Umweltbundesamt gibt aber jährlich Statistiken heraus, nach denen seit 2024 die Grenzwerte für Feinstaub (Partikel) und NO_x nicht mehr überschritten wurden.

Die Wirkungen von Motorabgasen sind zu unterteilen in akute und chronische Effekte. Akute Effekte von Abgasexpositionen werden in der Umwelt und am Arbeitsplatz selten beobachtet, werden aber experimentell in vitro, im Tierversuch und auch an Menschen untersucht, um Hinweise für eventuelle Langzeitriskien zu erhalten.

Biodiesel-Motoremissionen (BD-ME):

Akute Effekte

Erste Studien am Menschen ergaben, dass eine kurzfristige Exposition gegenüber BD-ME mit leichten kardiopulmonalen Effekten verbunden waren, die mit denen von herkömmlichen DME vergleichbar sind [4,5]. In einem Vergleich der akuten gesundheitlichen Wirkungen der Exposition gegenüber DME und der Abgase eines Blends aus 75 % Biodiesel und 25 % Diesel (B75) bei 48 gesunden Bergleuten unter Tage vor und nach der Exposition wurden Lungenfunktion, Entzündungsmarker sowie oxidativer Stress untersucht. B75 reduzierte die einatembaren Dieselpartikel um 20 %. Die Lungenfunktion verschlechterte sich nach der Exposition gegenüber Dieselpartikeln signifikant stärker. Die Anzahl der entzündlichen Zellen in der Lunge sowie die Entzündungsmediatoren im Sputum und Plasma stiegen bei beiden Expositionen signifikant auf ein ähnliches Niveau an. Der Einsatz von B75 senkte die Exposition gegenüber lungengängigen Dieselpartikeln und einige damit verbundene akute gesundheitliche Auswirkungen, obwohl Lungen- und systemische Entzündungen im Vergleich zum Dieselpartikelbetrieb nicht reduziert wurden [6].

In zwei neueren Studien wurden die Effekte von reinem Biodiesel (Rapsmethylester, RME) auf Herz-Kreislaufsystem und Atemwege von gesunden Probanden untersucht. Im direkten Vergleich zu fossilen DME wurden in beiden verblindeten, randomisierten Studien Freiwillige eine Stunde lang BD-ME ausgesetzt [7, 8]. In der ersten Studie wurde die Exposition von allen Probanden gut vertragen. Es traten keine unerwünschten Ereignisse auf und die BD-ME zeigte keine signifikant unterschiedlichen Auswirkungen auf die untersuchten Marker der Gefäßfunktion oder der Thrombusbildung. Es gab auch keine signifikanten Unterschiede in der Lungenfunktion vor und nach der Exposition und das exhalierete Stickoxid (FENO) als Zeichen einer Inflammation der Atemwege blieb ebenfalls unverändert [7]. In der zweiten Studie wurde 6 Stunden nach der Exposition durch BD-ME und im Vergleich dazu durch gefilterte Luft eine Bronchoskopie mit endobronchialen Schleimhautbiopsien, Bronchialspülung (BW) und bronchoalveolärer Lavage (BAL) durchgeführt. Differenzierte Zellzählungen und Entzündungsmarker wurden im Überstand bestimmt, und die Biopsien wurden immunhistochemisch gefärbt. Die Exposition gegenüber BD-ME erhöhte die Expression des Endothel-Adhäsionsmoleküls P-Selektin in der Bronchialschleimhaut sowie die Anzahl der Neutrophilen, Mastzellen und Makrophagen. Ein erhöhter Zustrom von Neutrophilen und Makrophagen wurde auch in der BW beobachtet. Insgesamt fand sich eine akute Atemwegsentszündung, wie sie in früheren Studien bei Exposition gegenüber fossilen DME beobachtet wurde. Ein direkter Vergleich mit den Effekten fossiler DME erfolgte in dieser Studie leider nicht [8].

Im Tierversuch an Mäusen fanden sich bei Exposition durch BD-ME aus Talgmethylester (TME) im Vergleich zur Luftkontrollgruppe eine erhöhte Hyperreaktivität der Atemwege, erhöhte Entzündungsmarker der Atemwege sowie Anzeichen einer Immundysregulation. Im Gegensatz dazu führte die Exposition gegenüber BD-ME aus RME im Vergleich zur Luftkontrollgruppe zu weniger signifikanten Auswirkungen, mit einem leichten Anstieg des Atemwegswiderstands bei funktioneller Residualkapazität und Anzeichen einer Immundysregulation. Die Exposition gegenüber herkömmlichen DME führte zu signifikanten Auswirkungen in ähnlichem Ausmaß [9]. In einer weiteren Publikation dieser Arbeitsgruppe wurden die Auswirkungen von BD-ME auf die zerebrovaskuläre Integrität und die Neuroinflammation auf die Mäuse berichtet. Die Daten

deuten insgesamt darauf hin, dass BD-ME aus TME oder RME im Vergleich zu fossilen DME deutlich weniger schädliche Auswirkungen auf die Gehirnfunktion haben [10].

Auch eine *in-vitro*-Studie ergab, dass fossile DME eine höhere direkte neurotoxische Wirksamkeit als BD-ME aufweisen. Diese Daten deuten auch darauf hin, dass die neurotoxischen Wirkungen eher durch adsorbierte Chemikalien als durch den reinen Kohlenstoffkern verursacht werden [11].

Chronische Effekte:

Zu chronischen Effekten fehlen leider weiterhin Studien am Menschen, so dass für die Risikobewertung auf Tier- und *in-vitro*-Studien zurückgegriffen werden muss. In einer australischen Tierstudie wurden männliche Mäuse 8 Tage lang 2 Stunden pro Tag verdünnten DME und BD-ME aus TME und RME ausgesetzt, wobei die Exposition gegenüber Raumluft als Kontrolle diente. Untersucht wurden Lungenfunktion, Hyperreagibilität der Bronchien, Entzündungen der Atemwege sowie Morphometrie der Atemwege. Die Exposition gegenüber TME-Abgasen führte im Vergleich zur Luftkontrolle zu den signifikantesten gesundheitlichen Auswirkungen, darunter eine erhöhte Hyperreaktivität der Atemwege und Entzündungen der Atemwege. Im Gegensatz dazu führte die Exposition gegenüber RME-Abgasen zu weniger negativen gesundheitlichen Auswirkungen. Die Exposition gegenüber fossilen DME führte zu gesundheitlichen Auswirkungen, die zwischen denen der beiden Biodiesel lagen [12].

Eine erste Tierstudie an trächtigen Mäusen zur Wirkung von BD-ME auf die Fertilität und die Nachkommenschaft ergab, dass diese nach 52 Wochen auffällige geschlechtsspezifische Unterschiede hinsichtlich der metabolischen Anpassung, der Aufrechterhaltung der Glukosehomöostase und der Zusammensetzung der Gliazellen im medialen Hypothalamus der Nachkommen aufwiesen. Die Interpretation dieser Daten im Sinne einer Risikobewertung wäre aber noch spekulativ [13].

HVO-Motoremissionen (HVO-ME):

Akute Effekte

Für HVO liegen bislang noch nicht so viele Daten vor wie für BD, sie reichen aber für eine erste Einschätzung. In der bis jetzt einzigen, aber sehr detailreichen Studie am Menschen wurden verschiedene Wirkungen einer Exposition durch HVO-ME untersucht: (1) Lungenfunktion and subjektive Symptome [14], (2) akute kardiovaskuläre Effekte [15], (3) genotoxische Wirkungen [16] und (4) verschiedene Biomarker der Entzündung [17]. Die 19 gesunden Studienteilnehmer wurden in einer Kammer bei vier verschiedenen Gelegenheiten für jeweils 3 Stunden und in zufälliger Reihenfolge folgenden Stoffen ausgesetzt: (1) HVO-Abgasen eines Radladers ohne Abgasnachbehandlung, (2) HVO-Abgasen eines Radladers mit Nachbehandlungssystem, (3) sauberer Luft, angereichert mit trockenen NaCl-Salzpartikeln und (4) sauberer Luft. Ein Vergleich zur Exposition durch fossile DME wurde leider nicht durchgeführt.

Adverse Effekte bei der Lungenfunktion wurden bei den gesunden Probanden nicht beobachtet. Ein Anstieg der selbst eingeschätzten leichten Reizsymptome sowie eine leichte Verschlechterung der Nasendurchgängigkeit nach beiden HVO-Expositionen könnten jedoch auf Reizwirkungen durch die Exposition gegenüber HVO-Abgasen hindeuten [14]. Kardiovaskulär war nur der PDA-Index A13, der die Gefäßcompliance widerspiegelt, bei beiden HVO-Expositionen signifikant erhöht. Die individuellen

Schwankungen waren jedoch groß, und die Unterschiede zwischen den Expositionssitzungen waren statistisch nicht signifikant [15]. Gentoxische Effekte durch HVO-ME im Sinne von DNA-Strangbrüchen, oxidativ geschädigter DNA oder beeinflusster Genexpression der DNA-Reparatur, der antioxidativen Abwehr oder proinflammatorischer Zytokine in weißen Blutkörperchen wurden nicht beobachtet. Die Ergebnisse dieser Studie deuten darauf hin, dass eine kurzfristige Exposition gegenüber HVO-Abgasen bei Menschen nicht mit einem gentoxischen Risiko verbunden ist [16]. Bei den Biomarkern gab es keinen Unterschied in der Expression von Entzündungsproteinen im Plasma zwischen der Gruppe, die HVO-Abgasen ausgesetzt war, und der Kontrollgruppe. Auch im Urin führte die Exposition nicht zu einem Anstieg der Biomarker [17]. Zusammenfassend ergaben sich allenfalls geringe akute Effekte durch die HVO-ME-Exposition mit und ohne Abgasnachbehandlung.

In einer Tierstudie an weiblichen Mäusen wiesen HVO-ME und fossile DME ein ähnliches proinflammatorisches Potenzial auf, während BD-ME (RME) eine geringere Wirksamkeit zeigten [18].

In einer *in-vitro*-Studie wurde gezeigt, dass der oxidative Stress und die Zytotoxizität in den Emissionen bei Verbrennung von HVO abnahmen. Es wurden bemerkenswerte Korrelationen zwischen PM-Emissionen und oxidativem Stress sowie Zytotoxizität beobachtet, insbesondere bei elementarem Kohlenstoff und Partikelphasen-PAK-Emissionen [19].

Chronische Effekte:

Zu chronischen Effekten von HVO-ME gibt es bislang weder Human- noch Tierstudien. Die vergleichenden *in-vitro*-Studien zwischen der Verbrennung von HVO und fossilem Diesel sprechen aber für eine ähnliche Absenkung des Risikos wie bei Biodiesel [20, 21, 22, 23].

Bioethanol-Motoremissionen (BE-ME):

Akute Effekte

Zu Effekten von Emissionen aus Fahrzeugen im (Bio-)Ethanol-Betrieb gibt es bislang nur eine Tierversuchsstudie. Untersucht wurde die *in-vivo*-Toxizität nach Exposition gegenüber sekundären Partikeln (secondary organic aerosols, SOA), die von Fahrzeugen mit unterschiedlichen Ethanol-Benzin-Gemischen (E0, E10, E22, E85W, E85S, E100) stammten. Die Aerosolproben wurden auf Filtern gesammelt, extrahiert, in wässrigen Lösungen dispergiert und Sprague-Dawley-Ratten in Dosen von 700 µg/0,2 ml intratracheal verabreicht. Nach 45 Min. und 4 h wurden die pulmonale und kardiale Chemilumineszenz (CL) gemessen, um die Menge der in Lunge und Herz gebildeten reaktiven Sauerstoffspezies (ROS) abzuschätzen. Entzündungen wurden durch Differentialblutzellzählung in bronchoalveolären Lavagen (BAL) gemessen. Es wurden signifikante Effekte der verschiedenen Kraftstoffformulierungen festgestellt. Im Vergleich zur Kontrollgruppe wiesen Tiere, die SOA aus Benzin (E0) ausgesetzt waren, nach 45 Min. eine signifikant höhere durchschnittliche CL in der Lunge auf. Die höchsten CL-Durchschnittswerte im Herzen wurden nach 45 Min. in den Gruppen beobachtet, die SOA aus E10 und reinem Ethanol (E100) ausgesetzt waren. Die BAL von Tieren, die SOA aus E0 und E85S ausgesetzt waren, wies nach 45 Min. eine signifikant erhöhte Anzahl an Makrophagen auf. Die Neutrophilenzahl in der BAL war in den Gruppen erhöht, die E85S (45 Min.) und E0 (4 h) ausgesetzt waren. Tiere, die

E0 und E85W ausgesetzt waren, wiesen im Vergleich zur Kontrollgruppe und den anderen exponierten Gruppen eine erhöhte Lymphozytenzahl in der BAL auf. Die Ergebnisse deuten darauf hin, dass durch Benzin (E0) erzeugte SOA, gefolgt von den Ethanolgemischen E85S und E85W, in erheblichem Maße oxidativen Stress, gemessen anhand der ROS-Bildung, sowie eine Lungenentzündung, gemessen anhand der Rekrutierung weißer Blutkörperchen in der BAL, induzieren [24].

In-vitro-Studien gibt es bislang auch nur wenige, die aussagefähige Ergebnisse zur Toxizität von BE-ME enthalten. In einem Fahrzeug mit GDI-Technologie wurden die Emissionen eines Flex-Fuel-Euro-5-GDI-Fahrzeugs, das mit Benzin (E0) und zwei Ethanol-Benzin-Gemischen (E10 und E85) betrieben wurde, unter transienten und stationären Fahrbedingungen untersucht. Die Partikelemissionen beim Betrieb des Fahrzeugs im hWLTC mit E10 und E85 wurden im Vergleich zu E0 um 97% bzw. 96% gesenkt. Die CO-Emissionen sanken um 81% bzw. 87%, während die CO₂-Emissionen um 13% bzw. 17% reduziert wurden. Die Emissionen ausgewählter PAHs wurden mit E10 um 67–96% und mit E85 um 82–96% gesenkt, und das genotoxische Potenzial sank um 72 bzw. 83%. Die Beimischung von Ethanol scheint die genotoxischen Emissionen bei GDI-Fahrzeugen zu reduzieren [25].

In einer weiteren Studie wurden toxische Wirkungen von Abgasaerosolen aus Ethanol-Benzin-Gemischen unter Verwendung eines mehrzelligen Modells der menschlichen Lunge untersucht. Ein Flex-Fuel-Pkw wurde auf einem Rollenprüfstand gefahren und mit E10, E85 oder reinem Benzin (E0) betankt. Die Abgase wurden 6 Stunden lang in einer Verdünnung von 1:10 direkt auf ein multizelluläres menschliches Lungenmodell aufgebracht. Biologische Endpunkte nach 6 Stunden umfassten Zytotoxizität, Entzündungsförderung, oxidativen Stress und DNA-Schäden. Zum Vergleich wurden auch Expositionen gegenüber gefilterter Luft und Dieselaabgasen in die Studie einbezogen. Unter Ethanol-Benzin-Exposition wurden keine Zytotoxizität, kein oxidativer Stress und keine morphologischen Veränderungen beobachtet. Genexpressionsanalysen ergaben keine Induktion der untersuchten Gene, einschließlich der mRNA-Spiegel von Genen, die mit oxidativem Stress und Entzündungsförderung in Verbindung stehen. Im OxyDNA-Assay wurden keine DNA-Schäden festgestellt. Zusammenfassend riefen die getesteten Abgase verschiedener Ethanol-Benzin-Gemische keine toxischen Zellreaktionen hervor [26]. Auch in einer anderen Studie ergab schon die Verwendung von E10 niedrigere Emissionen und eine deutlich reduzierte Toxizität im Vergleich zu herkömmlichem Benzin [27].

In einem Review wird für Ethanol (E10 bis E85) zusammengefasst, dass die Emissionen von NO_x, Nicht-Methan-Kohlenwasserstoffen, Feinstaub (PM) und weiteren Luftschadstoffen aus mobilen modernen Ottomotoren nicht negativ beeinträchtigt werden. Zukünftige Erhöhungen des Biokraftstoffanteils sollten, sofern sie in Verbindung mit Änderungen an der Motor konstruktion und -kalibrierung bei Neufahrzeugen erfolgen, nicht zu problematischen Emissionsanstiegen führen, die die Luftqualität in Städten beeinträchtigen, und könnten sogar die künftig erforderlichen Emissionsminderungen erleichtern. Um die Vorteile von Biokraftstoffen bei der Beimischung zu Benzin vollständig zu verstehen und zu optimieren, sei eine systemische Betrachtung (Kraftstoff und Fahrzeug) erforderlich [28].

Chronische Effekte:

Studien zu chronischen Effekten von BE-ME fehlen sowohl für den Menschen als auch im Bereich der tierexperimentellen Forschung. Auch für Ethanol nicht biogener Herkunft existieren keine entsprechenden Daten. Aus den vorliegenden Publikationen zu

Emissionen und Effekten geht aber eher eine Absenkung der Schadstoffe und möglicher adverser Effekte hervor.

Diskussion

Die im vorliegenden Beitrag zusammengefassten Daten zeigen, dass sich die gesundheitliche Relevanz von Motorabgasen in den letzten zwei Jahrzehnten durch technische Weiterentwicklungen, Abgasnachbehandlung und den Einsatz erneuerbarer Kraftstoffe deutlich verändert hat. Insbesondere die Reduktion der Partikelmasse und -anzahl stellt einen wesentlichen Fortschritt dar, da Partikel als Haupttreiber zahlreicher adverser Effekte, einschließlich kardiopulmonaler Erkrankungen und Krebs, gelten. Vor diesem Hintergrund bestätigen die dargestellten Ergebnisse früherer und aktueller Studien, dass erneuerbare Kraftstoffe wie Biodiesel (BD), hydriertes Pflanzenöl (HVO) und Bioethanol (BE) im Vergleich zu fossilen Kraftstoffen in vielen Fällen mit einer geringeren toxikologischen Gesamtwirkung assoziiert sind.

Gleichzeitig wird deutlich, dass eine pauschale Entwarnung nicht gerechtfertigt ist. Trotz reduzierter Partikelemissionen zeigen sowohl Human- als auch Tierstudien, dass akute entzündliche Reaktionen der Atemwege nach Exposition gegenüber Abgasen erneuerbarer Kraftstoffe weiterhin auftreten können. Diese Effekte ähneln qualitativ denen fossiler Dieselmotoremissionen, sind jedoch häufig geringer ausgeprägt oder auf einzelne Endpunkte beschränkt. Besonders für BD-ME hängt das Ausmaß der Effekte offenbar stark von der jeweiligen Rohstoffbasis (z. B. Raps- versus Talgmethylester) und damit von der chemischen Zusammensetzung der Emissionen ab.

Für HVO-ME ergibt sich aus den bislang wenigen, aber methodisch hochwertigen Studien ein insgesamt günstiges Bild mit nur geringen akuten Effekten und ohne Hinweise auf Gentoxizität. Allerdings fehlt bislang ein direkter Vergleich zu fossilen Dieselabgasen unter identischen Expositionsbedingungen, was die abschließende Bewertung erschwert. Zudem liegen zu chronischen Effekten von HVO-ME bislang weder Human- noch Tierdaten vor, sodass Aussagen zur Langzeittoxizität derzeit nur indirekt aus *In-vitro*-Studien abgeleitet werden können.

Die Datenlage zu Bioethanol-Emissionen ist ebenfalls heterogen. Während experimentelle Studien eine deutliche Reduktion von Partikeln, polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen und gentoxischem Potenzial zeigen, weisen Untersuchungen zu sekundären organischen Aerosolen darauf hin, dass bestimmte Ethanol-Benzin-Gemische unter speziellen Bedingungen oxidativen Stress und entzündliche Reaktionen auslösen können. Dies unterstreicht die Bedeutung einer systemischen Betrachtung, bei der Kraftstoff, Motortechnologie und reale Einsatzbedingungen gemeinsam berücksichtigt werden.

Über alle Kraftstoffarten hinweg bleibt festzuhalten, dass insbesondere zu chronischen Effekten beim Menschen weiterhin erhebliche Wissenslücken bestehen. Die vorhandenen Tier- und *In-vitro*-Daten liefern wichtige Hinweise, erlauben jedoch nur eingeschränkt eine quantitative Risikobewertung für die Allgemeinbevölkerung oder spezifische Arbeitsplatzsituationen. Dies gilt insbesondere für Arbeitsplätze mit potenziell hohen Expositionen, etwa bei Tätigkeiten mit Dieselmotoren in Innenräumen oder unter

Tage, auch wenn eine eigene aktuelle Studie an Bergleuten im Kalibergbau trotz Überschreitung der Grenzwerte für DME keine akuten oder chronischen adversen Effekte ergab [29].

Fazit und Ausblick

Zusammenfassend zeigen die ausgewerteten Studien, dass der Einsatz erneuerbarer Kraftstoffe in Verbindung mit modernen Motor- und Abgasnachbehandlungstechnologien zu einer deutlichen Reduktion relevanter Schadstoffe und damit wahrscheinlich auch zu einer Absenkung gesundheitlicher Risiken beigetragen hat. Insbesondere die Verringerung der Partikelemissionen spricht dafür, dass das Krebs- und Herz-Kreislauf-Risiko im Vergleich zu früheren Emissionsniveaus deutlich gesunken ist. Gleichwohl lassen sich gesundheitliche Effekte – vor allem akute entzündliche Reaktionen – auch bei sehr niedrigen Emissionsniveaus nicht vollständig ausschließen.

Für eine belastbare Risikobewertung ist es daher weiterhin notwendig, neue Kraftstoffe und Technologien frühzeitig und systematisch zu untersuchen. Zukünftige Forschung sollte sich insbesondere auf folgende Aspekte konzentrieren:

- (1) Humane Langzeit- und Kohortenstudien zur Abschätzung chronischer Effekte,
- (2) vergleichende Expositionen unter realen Arbeits- und Umweltbedingungen,
- (3) unregulierte Emissionskomponenten und deren biologische Wirkungen,
- (4) Wechselwirkungen von Kraftstoffen, Schmierstoffen, Motortechnologie und Abgasnachbehandlung.

Vor dem Hintergrund der fortschreitenden Transformation des Verkehrs- und Energiesektors kommt der arbeits- und umweltmedizinischen Begleitforschung eine zentrale Rolle zu. Nur durch eine kontinuierliche toxikologische Bewertung kann sichergestellt werden, dass die ökologischen Vorteile erneuerbarer Kraftstoffe nicht mit bislang unterschätzten gesundheitlichen Risiken einhergehen und Präventionsmaßnahmen rechtzeitig angepasst werden können.

Literatur

- [1] Benbrahim-Tallaa L, Baan RA, Grosse Y, Lauby-Secretan B, El Ghissassi F, Bouvard V, Guha N, Loomis D, Straif K, International Agency for Research on Cancer Monograph Working Group (2012) Carcinogenicity of diesel-engine and gasoline-engine exhausts and some nitroarenes. *Lancet Oncol.* 13:663-664.
- [2] Bünger J, Krahl J, Schröder O, Schmidt L, Westphal GA (2012) Potential hazards associated with combustion of bio-derived versus petroleum-derived diesel fuel. *Crit Rev Toxicol.* 42:732-750.
- [3] Bünger J, Munack A, Krahl J (2022) Neue Motor-, Abgas- und Kraftstofftechnologien - Auswirkungen auf die Dieselmotoremissionen und die Gesundheit. In: 5. Tagung der Fuels Joint Research Group, Herausgeber: Krahl J, Munack A, Eilts P, Bünger J. Cuvillier Verlag, Göttingen, Germany, S. 27-35.

- [4] Bünger J, Krahl J, Munack A, Brüning T, Westphal GA (2014) Wie riskant sind Biokraftstoffe? *Naturwissenschaftliche Rundschau* 67:500-509.
- [5] Godri Pollitt KJ, Chan D, Rais K, Pan K, Wallace JS (2019) Biodiesel fuels: A greener diesel? A review from a health perspective. *Sci Total Environ.* 688:1036-1055.
- [6] Mehus AA, Reed RJ, Lee VS, Littau SR, Hu C, Lutz EA, Burgess JL (2015) Comparison of acute health effects from exposures to Diesel and Biodiesel fuel emissions. *J Occup Environ Med.* 57:705-12.
- [7] Unosson J, Kabéle M, Boman C, Nyström R, Sadiktsis I, Westerholm R, Mudway IS, Purdie E, Raftis J, Miller MR, Mills NL, Newby DE, Blomberg A, Sandström T, Bosson JA (2021) Acute cardiovascular effects of controlled exposure to dilute petrodiesel and biodiesel exhaust in healthy volunteers: a crossover study. *Part Fibre Toxicol.* 18:22.
- [8] Sandström T, Bosson JA, Muala A, Kabéle M, Pourazar J, Boman C, Rankin G, Mudway IS, Blomberg A, Friberg M (2024) Acute airway inflammation following controlled biodiesel exhaust exposure in healthy subjects. *Part Fibre Toxicol.* 21:53.
- [9] Landwehr KR, Mead-Hunter R, O'Leary RA, Kicic A, Mullins BJ, Larcombe AN (2024) The respiratory health effects of acute in vivo diesel and biodiesel exhaust in a mouse model. *Chemosphere* 362:142621.
- [10] Nesbit M, Ko CKL, Mamo JCL, Lam V, Landwehr KR, Larcombe AN, Takechi R (2024) Exposure to biodiesel exhaust is less harmful than exposure to mineral diesel exhaust on blood-brain barrier integrity in a murine model. *Front Neurosci.* 18:1440118.
- [11] Gerber LS, de Leijer DCA, Rujas Arranz A, Lehmann JMML, Verheul ME, Cassee FR, Westerink RHS (2024) In vitro neurotoxicity of particles from diesel and biodiesel fueled engines following direct and simulated inhalation exposure. *Environ Int.* 184:108481.
- [12] Landwehr KR, Mead-Hunter R, O'Leary RA, Kicic A, Mullins BJ, Larcombe AN (2023) Respiratory Health Effects of In Vivo Sub-Chronic Diesel and Biodiesel Exhaust Exposure. *Int J Mol Sci.*:5130.
- [13] Jetton TL, Galbraith OT, Peshavaria M, Bonney EA, Holmén BA, Fukagawa NK. (2024) Sex-specific metabolic adaptations from in utero exposure to particulate matter derived from combustion of petrodiesel and biodiesel fuels. *Chemosphere* 346:140480.
- [14] Gren L, Dierschke K, Mattsson F, Assarsson E, Krajs AM, Kåredal M, Lovén K, Löndahl J, Pagels J, Strandberg B, Tunér M, Xu Y, Wollmer P, Albin M, Nielsen J, Gudmundsson A, Wierzbicka A (2022) Lung function and self-rated symptoms in healthy volunteers after exposure to hydrotreated vegetable oil (HVO) exhaust with and without particles. *Part Fibre Toxicol.* 19:9.
- [15] Marc-Derrien Y, Gren L, Dierschke K, Albin M, Gudmundsson A, Wierzbicka A, Sandberg F (2022) Acute Cardiovascular Effects of Hydrotreated Vegetable Oil Exhaust. *Front Physiol.* 13:828311.
- [16] Scholten RH, Essig YJ, Roursgaard M, Jensen A, Krajs AM, Gren L, Dierschke K, Gudmundsson A, Wierzbicka A, Møller P (2021) Inhalation of hydrogenated

- vegetable oil combustion exhaust and genotoxicity responses in humans. *Arch Toxicol.* 95:3407-3416.
- [17] Kraiss AM, Essig JY, Gren L, Vogts C, Assarsson E, Dierschke K, Nielsen J, Strandberg B, Pagels J, Broberg K, Lindh CH, Gudmundsson A, Wierzbicka A (2021) Biomarkers after Controlled Inhalation Exposure to Exhaust from Hydrogenated Vegetable Oil (HVO). *Int J Environ Res Public Health.* 18:6492.
- [18] Gliga AR, McCarrick S, Malmberg V, Kohonen P, Snigireva A, Mills B, Danielsen PH, Palmberg L, Broberg K, Pagels J, Vogel U (2026) Similar global transcription patterns in mouse lung tissue following pulmonary exposure to renewable and conventional diesel engine exhaust particles. *Environ Toxicol Pharmacol.* 122:104918.
- [19] McCaffery C, Zhu H, Sabbir Ahmed CM, Canchola A, Chen JY, Li C, Johnson KC, Durbin TD, Lin YH, Karavalakis G (2022) Effects of hydrogenated vegetable oil (HVO) and HVO/biodiesel blends on the physicochemical and toxicological properties of emissions from an off-road heavy-duty diesel engine. *Fuel (Lond).* 323:124283.
- [20] Westphal GA, Krahl J, Munack A, Rosenkranz N, Schröder O, Schaak J, Pabst C, Brüning T, Büniger J (2013) Combustion of hydrotreated vegetable oil and jatropa methyl ester in a heavy duty engine: emissions and bacterial mutagenicity. *Environ Sci Technol.* 47:6038-46.
- [21] Rothmann MH, Møller P, Essig YJ, Gren L, Malmberg VB, Tunér M, Pagels J, Kraiss AM, Roursgaard M (2023) Genotoxicity by rapeseed methyl ester and hydrogenated vegetable oil combustion exhaust products in lung epithelial (A549) cells. *Mutagenesis* 38:238-249.
- [22] Uski OJ, Rankin G, Wingfors H, Magnusson R, Boman C, Lindgren R, Muala A, Blomberg A, Bosson JA, Sandström T (2024) The Toxic Effects of Petroleum Diesel, Biodiesel, and Renewable Diesel Exhaust Particles on Human Alveolar Epithelial Cells. *J Xenobiot.* 14:1432-1449.
- [23] Mendoza C, Arias S, Botero ML, Agudelo JR (2025) Hazardous gas emissions from drop-in biofuels: mutagenicity, cytotoxicity, and unregulated pollutants. *J Hazard Mater.* 483:136696.
- [24] da Silva TD, Barnabé V, Ricci-Vitor AL, Papapostolou V, Tagle M, Henriquez A, Lawrence J, Ferguson S, Wolfson JM, Koutrakis P, Oyola P, Ferreira C, de Abreu LC, Monteiro CBM, Godleski JJ (2019) Secondary particles formed from the exhaust of vehicles using ethanol-gasoline blends increase the production of pulmonary and cardiac reactive oxygen species and induce pulmonary inflammation. *Environ Res.* 177:108661.
- [25] Muñoz M, Heeb NV, Haag R, Honegger P, Zeyer K, Mohn J, Comte P, Czerwinski J. (2016) Bioethanol blending reduces Nanoparticle, PAH, and Alkyl- and Nitro-PAH emissions and the genotoxic potential of exhaust from a Gasoline Direct Injection Flex-Fuel Vehicle. *Environ Sci Technol.* 50:11853-11861.
- [26] Bisig C, Roth M, Müller L, Comte P, Heeb N, Mayer A, Czerwinski J, Petri-Fink A, Rothen-Rutishauser B (2016) Hazard identification of exhausts from gasoline-ethanol fuel blends using a multi-cellular human lung model. *Environ Res.* 151:789-796.

- [27] Agarwal AK, Singh AP, Gupta T, Agarwal RA, Sharma N, Pandey SK, Ateeq B (2020) Toxicity of exhaust particulates and gaseous emissions from gasohol (ethanol blended gasoline)-fuelled spark ignition engines. *Environ Sci Process Impacts*. 22:1540-1553.
- [28] Wallington TJ, Anderson JE, Kurtz EM, Tennison PJ (2016) Biofuels, vehicle emissions, and urban air quality. *Faraday Discuss*. 189:121-36.
- [29] Gamrad-Streubel L, Haase LM, Rudolph KK, Rühle K, Bachand AM, Crawford L, Mundt KA, Bünger J, Pallapies D, Taeger D, Casjens S, Molkenhain A, Neumann S, Giesen J, Neumann V, Brüning T, Birk T (2022) Underground salt and potash workers exposed to nitrogen oxides and diesel exhaust: assessment of specific effect biomarkers. *Int Arch Occup Environ Health* 95:1817-1828.

E-Fuels in der Energiewende: Wo stehen wir und was brauchen wir?

Jörg Schröder, Kati Görsch, Stephanie Hauschild

Abstract

The provision of e-fuels is considered to be a key component of the energy transition—particularly for sectors that are difficult to electrify, such as aviation and shipping. Technologically, e-fuels are based on well-known individual processes such as electrolysis, synthesis gas production, and fuel synthesis (e. g., Fischer-Tropsch or methanol pathways). However, their integration is often still at the demonstration scale. Accordingly, many projects are in early stages of development, and production capacities are limited. In addition to technological challenges, high investment costs, long planning times, and in particular the currently significantly higher production costs compared to fossil fuels are hindering the market ramp-up.

A key prerequisite for the production of e-fuels is the availability of green hydrogen and suitable CO₂ sources. Although electrolysis capacity is increasing worldwide, it is still expected that the supply of renewable hydrogen will remain limited in the medium term due to high costs and competing uses. Production costs for green hydrogen depend largely on affordable renewable electricity sources and high plant utilization rates. Potential carbon sources include industrial point sources (until 2041), biogenic processes (under certain conditions), and direct air capture. Each of these has different advantages and disadvantages in terms of availability, climate impact, and costs. A combination of these options will therefore be necessary for large-scale ramp-up.

Future demand for e-fuels will be largely determined by regulatory requirements. Instruments such as Germany's greenhouse gas reduction quota, ReFuelEU Aviation Regulation and the revised Renewable Energy Directive establish binding usage quotas, thereby providing investment certainty. However, scenarios indicate that, under current conditions, e-fuels will primarily be used to meet minimum regulatory requirements. Demand depends largely on the pace of electrification and the design of the sub-quotas. However, the share of e-fuels in total energy demand will remain moderate until 2040.

1. Technologien, Skalierung und Herausforderungen

E-Fuels gelten als wichtiger Baustein der Energiewende für schwer elektrifizierbare Anwendungen wie Luft- und Schifffahrt sowie Teile des Schwerlastverkehrs. Technologisch basieren sie auf etablierten Einzelprozessen wie Elektrolyse, Synthesegaserzeugung und anschließenden Kraftstoffsynthesen (z. B. Fischer-Tropsch oder Methanolsynthese), deren Reifegrade jedoch entlang der gesamten Prozesskette variieren. Während einzelne Komponenten bereits industriell erprobt sind, befinden sich inte-

grierte Power-to-Liquid-Gesamtsysteme häufig noch im Demonstrationsmaßstab. Entsprechend ist die derzeitige Produktionskapazität begrenzt, wenngleich zahlreiche Projekte weltweit angekündigt wurden. Eine zentrale Herausforderung liegt in der Skalierung der Anlagen, die mit hohen Investitionskosten, langen Planungszeiten und komplexer Integration erneuerbarer Ressourcen verbunden ist. Zusätzlich beeinflussen Standortfaktoren wie Verfügbarkeit günstiger erneuerbarer Energien, Zugang zu CO₂-Quellen sowie Infrastruktur für Transport und Weiterverarbeitung die wirtschaftliche Umsetzung. Im Gegensatz dazu sind Biokraftstoffe bereits seit Jahren im Markt etabliert und werden in relevanten Mengen produziert und eingesetzt. Dies liegt insbesondere daran, dass viele der zugrunde liegenden Technologien – etwa Fermentation, Hydrotreatment oder Ver-/Umesterung – technisch ausgereift sind und bestehende industrielle Infrastrukturen genutzt werden können. Allerdings stoßen Biokraftstoffe zunehmend an Verfügbarkeitsgrenzen nachhaltiger Biomasse, wodurch ihr langfristiges Ausbaupotenzial begrenzt ist. Es stellt sich die Frage, in welchem Maß E-Fuels kurzfristig ergänzend zu Biokraftstoffen verfügbar sein können und welche technologischen und strukturellen Voraussetzungen für einen breiten Markthochlauf geschaffen werden müssen.

Vor diesem Hintergrund ist eine differenzierte Betrachtung der einzelnen Prozessschritte und Technologiepfade entlang der E-Fuel-Wertschöpfungskette erforderlich. Abhängig von der gewählten Route variieren sowohl der technologische Reifegrad als auch die spezifischen Herausforderungen erheblich. Die in Bild 1 dargestellte Übersicht veranschaulicht die wesentlichen technologischen Pfade von der Synthesegas-erzeugung über verschiedene Konversionsrouten bis hin zu den resultierenden Endprodukten und verdeutlicht gleichzeitig die unterschiedlichen Entwicklungsstände der einzelnen Optionen. Im Folgenden werden daher die zentralen Technologien entlang dieser Wertschöpfungskette sowie ihre jeweiligen Reifegrade und Herausforderungen näher beschrieben.

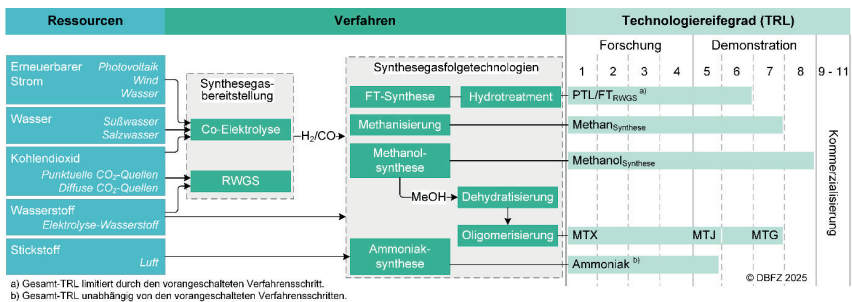


Bild 1: Bereitstellungsoptionen ausgewählter E-Fuels inkl. Einordnung des Technologiereifegrades [1]

Synthesegasbereitstellung: Mit Hilfe der reversen Wassergas-Shift-Reaktion (RWGS) kann aus CO₂ und H₂ ein Synthesegas (CO und H₂) bereitgestellt werden. Diese endotherme Reaktion läuft bei hohen Temperaturen (700 bis 1.000 °C) und Drücken bis 30 bar ab. Meist werden Nickel- oder Aluminiumkatalysatoren genutzt. Alternativ kann Synthesegas auch direkt über eine Hochtemperatur-Co-Elektrolyse erzeugt werden, bei der Wasser und CO₂ in einem Schritt umgesetzt werden. Dieser Prozess erfolgt in

Festoxid-Elektrolyseuren bei 600 bis 1.000 °C und ermöglicht durch die Nutzung von Abwärme aus exothermen Prozessen, die ggf. bei entsprechender Verschaltung genutzt werden können, eine höhere Effizienz. Technologisch existieren erste Demonstrationsanlagen, jedoch ohne kommerzielle Anwendung (TRL ~6). Herausforderungen bestehen insbesondere in der Entwicklung langlebiger, selektiver Katalysatoren für die RWGS sowie in der Verbesserung der Materialstabilität und Reduzierung von Degradation bei der Co-Elektrolyse [1].

Fischer-Tropsch-Synthese: Bei der FT-Synthese wird Synthesegas bei etwa 200 bis 350 °C und 20 bis 40 bar in flüssige und gasförmige Kohlenwasserstoffe polymerisiert. Je nach Betriebsbedingungen wird zwischen Niedertemperatur-FT (vorwiegend langkettige Wachse) und Hochtemperatur-FT (hauptsächlich Benzinfractionen) unterschieden. Die Reaktion erfolgt an Eisen- oder Kobaltkatalysatoren. Das Produktspektrum folgt dabei der Anderson-Schulz-Flory-Verteilung und kann gezielt beeinflusst werden, um bestimmte Fraktionen wie Diesel oder Kerosin zu priorisieren. Das entstehende Rohprodukt (FT-Crude) muss anschließend durch Hydrotreating zu den Zielprodukten weiterverarbeitet werden, entweder direkt in der FT-Anlage oder in Raffinerien via Mitraffination. Die FT-Technologie ist für die fossilen Rohstoffe Kohle und Erdgas ausgereift (TRL 11). Hingegen weisen biobasierte und strombasierte Verfahren aufgrund vorgelagerter Prozessschritte wie Vergasung oder RWGS noch deutlich geringere Reifegrade (TRL 6-7) auf. Die aktuelle Forschung konzentriert sich auf dezentrale Reaktorkonzepte, die Nutzung von Nebenprodukten sowie einen flexiblen, lastdynamischen Betrieb [1].

Methanol- und Folgesynthesen: Methanol ist ein einfacher Alkohol, der unter anderem aus Synthesegas (CO und H₂) mithilfe von Kupferkatalysatoren bei hohen Temperaturen und Drücken hergestellt werden kann. Alternativ kann Methanol auch durch direkte CO₂-Hydrierung oder partielle Oxidation von Methan synthetisch erzeugt werden. Methanol wird sowohl als Kraftstoff als auch als Zwischenprodukt für weitere Kraftstoffe verwendet. Mittels des Methanol-to-Gasoline (MTG)-Verfahrens kann Methanol in Benzin umgewandelt werden. Dabei entsteht über Zwischenstufen wie Dimethylether und Olefine ein Gemisch aus Paraffinen, Naphthenen und Aromaten. Beim Methanol-to-Jet (MTJ)-Verfahren erfolgt die Umwandlung in Flugkraftstoffe über die Dehydratisierung von Methanol und anschließende Oligomerisierung zu paraffinischen Kohlenwasserstoffen. Die Methanolsynthese aus fossilen Rohstoffen ist technologisch ausgereift und kommerziell verfügbar (TRL 11), während die Technologie für erneuerbare Rohstoffe noch in der Entwicklung ist (TRL 8). Die Weiterverarbeitung zu Kraftstoffen befindet sich auf niedrigerem Niveau (TRL 5-7). Insbesondere das MTJ-Verfahren wird aktuell intensiv weiterentwickelt, da das entstehende Produkt das Potenzial hat, als Flugkraftstoff eingesetzt zu werden. Eine Zulassung als SAF gemäß der Norm ASTM D7566 wird aktuell angestrebt [1].

Ammoniaksynthese: Ammoniak wird hauptsächlich durch das Haber-Bosch-Verfahren hergestellt. Dabei reagieren Stickstoff und Wasserstoff bei etwa 450 °C und 200 bar unter Einsatz eines Eisenkatalysators. Der benötigte Stickstoff stammt aus der Luftzerlegung, während Wasserstoff bislang überwiegend aus fossilen Quellen wie Erdgas oder Kohle gewonnen wird. Bei „grünem Ammoniak“ erfolgt die Herstellung auf Basis erneuerbarer Energien, insbesondere unter Verwendung von elektrolytisch erzeugtem Wasserstoff. Für eine weitgehend CO₂-neutrale Produktion muss zudem die Prozess-

wärme aus erneuerbaren Quellen stammen. Entsprechende Produktionskonzepte befinden sich technologisch derzeit noch im Pilotstadium (TRL 5) mit der Herausforderung, die wirtschaftliche Rentabilität beim Einsatz von Elektrolyse-Wasserstoff zu steigern. Als vielversprechendes, effizientes Wasserstoffspeicher- und -transportmedium ist eine hohe Dynamik bei der Entwicklung von Projekten zum Aufbau von Ammoniak-Kapazitäten aus Elektrolyse-Wasserstoff zu verzeichnen [1].

Aufgrund der unterschiedlichen technologischen Reifegrade der beschriebenen Konversionspfade stellt sich die Frage, in welchem Umfang diese Verfahren bereits in konkrete industrielle Projekte überführt werden. Neben der technologischen Entwicklung ist daher insbesondere der aktuelle Ausbau von Produktionskapazitäten ein zentraler Indikator für den Markthochlauf von E-Fuels. Die nachfolgende Betrachtung gibt einen Überblick über weltweit angekündigte Kapazitäten, deren regionale Verteilung sowie den jeweiligen Entwicklungsstand und verdeutlicht damit die weiterhin bestehenden Herausforderungen bei der industriellen Skalierung.

Die Entwicklung von E-Fuel-Projekten gewinnt weltweit an Dynamik, wobei insbesondere China und Europa derzeit eine führende Rolle einnehmen [2]. China konzentriert sich vor allem auf den Ausbau der E-Methanol-Produktion und vereint rund 60 % der geplanten globalen Kapazitäten, während Europa mit etwa 65 % der angekündigten E-Kerosin-Kapazitäten eine dominante Stellung in diesem Segment einnimmt. Insgesamt beläuft sich die kumulierte jährliche Produktionskapazität größerer Projekte (Kapazität mindestens 50 ktoe, entsprechend 2 PJ bzw. 0,6 TWh) auf rund 18.500 ktoe. Dies entspricht in etwa einem Drittel des Verbrauchs an erneuerbaren Kraftstoffen in 2024 [3].

Wie in Bild 2 dargestellt, befinden sich weltweit über 100 Projekte in unterschiedlichen Entwicklungsstadien, während nur wenige Anlagen bereits in Betrieb sind. Der Großteil der Kapazität entfällt derzeit auf Projekte in der Planungs- oder Studienphase. Dabei dominiert E-Methanol mit etwa 65 % der angekündigten Produktionskapazität, insbesondere mit Blick auf die Dekarbonisierung des maritimen Sektors und die Substitution fossilen Methanols in der chemischen Industrie. E-Kerosin macht rund 25 % der geplanten Kapazitäten aus und gewinnt vor allem durch regulatorische Vorgaben im Luftverkehr zunehmend an Bedeutung.

Europa weist hierbei ein erhebliches, jedoch noch zu bestätigendes Potenzial auf. Politische Instrumente wie die ReFuelEU-Aviation setzen verbindliche Quoten für nachhaltige Flugkraftstoffe und fördern damit den Markthochlauf. Auf dem europäischen Kontinent sind derzeit etwa 3,3 Mtoe E-Kerosinproduktion geplant, was ungefähr 4 Mio. m³ entspricht. Die Umsetzung der regulatorischen Anforderungen könnte bereits bis 2035 eine Nachfrage in vergleichbarer Größenordnung erzeugen. Insgesamt zeigt sich, dass die Projekte zwar global verteilt sind, sich jedoch hinsichtlich Größe und Reifegrad stark unterscheiden und sich die industrielle Skalierung von E-Fuels weiterhin in sehr einer frühen Phase befindet.

Neben den technologischen Hürden stellt die aktuell sehr hohe Kostenbasis für E-Fuels eine zentrale Herausforderung dar. Laut dem aktuellen ReFuelEU Aviation Annual Technical Report 2024 liegen die geschätzten Produktionskosten für synthetische

E-Fuel-Kapazitäten in Mtoe

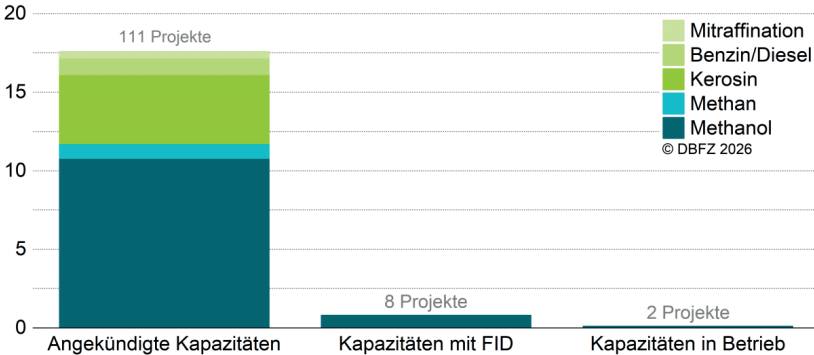


Bild 2: Status weltweiter E-Fuel-Projekte mit Kapazitäten > 50 ktoe, Stand 2025 [2]

Kerosine erheblich über den Referenzpreisen für herkömmliches Kerosin (CAF: 734 €/t) oder Biokraftstoffe (2.085 €/t): So werden Low-carbon-H₂-basierten Flugkraftstoffen Kosten von etwa 4.655 €/t zugeschrieben, während Kosten für synthetische Kraftstoffe aus Direct-Air-Capture-Verfahren sogar auf bis zu 8.470 €/t kommen können. Diese Differenz von mehreren Tausend Euro pro Tonne verdeutlicht, dass die kommerzielle Wettbewerbsfähigkeit von E-Fuels ohne erhebliche politische Unterstützung oder Kostensenkungen stark eingeschränkt ist. Die hohen Produktionskosten wirken sich direkt auf die Marktakzeptanz aus und erschweren die Multiplikation der Anlagen(kapazitäten) [4].

2. Rohstoffbasis von E-Fuels

Die Rohstoffbasis für die Herstellung von E-Fuels besteht im Wesentlichen aus erneuerbarem Wasserstoff und einer geeigneten Kohlenstoffquelle. Aufgrund des hohen Wasserstoffbedarfs entlang der gesamten Prozesskette – von der Synthesegaserzeugung bis zur Kraftstoffsynthese – kommt der Entwicklung entsprechender Produktionskapazitäten, der technologischen Reife der Elektrolyseverfahren sowie den Produktionskosten eine entscheidende Bedeutung zu. Weltweit ist derzeit ein deutlicher Ausbau der Produktionskapazitäten für erneuerbaren Wasserstoff zu beobachten. Diese Kapazitäten sind nicht ausschließlich für den Verkehrssektor vorgesehen, sondern sollen auch für Anwendungen in der Industrie oder zur Wärmebereitstellung genutzt werden. Aktuelle Projektdaten (Bild 3) zufolge befinden sich bereits mehrere hundert Elektrolyseanlagen in Betrieb, während zahlreiche weitere Projekte geplant oder im Bau sind. Mit den bereits installierten Anlagen wird eine jährliche Produktion im Bereich von einigen hunderttausend Tonnen grünem Wasserstoff erreicht, während die perspektivisch geplanten Kapazitäten deutlich darüber hinausgehen. Der Aufbau einer globalen Wasserstoffinfrastruktur schreitet dynamisch voran. Es werden laufend neue Projekte angekündigt, was eine genaue Abschätzung der zukünftigen Kapazitäten erschwert. Dennoch wird deutlich, dass sich der Markt aktuell in einer frühen, aber stark wachsenden Phase befindet.

Die zentrale Technologie zur Bereitstellung von grünem Wasserstoff ist die Wasserelektrolyse, bei der Wasser mithilfe elektrischer Energie in Wasserstoff und Sauerstoff aufgespalten wird. Derzeit sind drei relevante Elektrolyseverfahren etabliert bzw. in fortgeschrittener Entwicklung. Die *alkalische Wasserelektrolyse* gilt als technologisch ausgereift und ist bereits seit vielen Jahren im industriellen Einsatz. Sie zeichnet sich durch robuste Technik, moderate Betriebsbedingungen und vergleichsweise geringe Investitionskosten aus. Allerdings ist ihre Dynamik im Lastbetrieb begrenzt, wodurch die direkte Kopplung mit stark fluktuierenden erneuerbaren Energien nur eingeschränkt möglich ist. Die *Polymerelektrolytmembran-Elektrolyse (PEMEL)* bietet gegenüber der alkalischen Technologie eine deutlich höhere Lastflexibilität und eignet sich daher besonders für den Betrieb mit variabler Stromerzeugung aus Wind- und Solarenergie. Zudem können höhere Betriebsdrücke erreicht werden, wodurch ggf. notwendige nachgelagerte Kompressionsschritte reduziert werden können. Diese Vorteile gehen jedoch mit höheren Kosten einher, insbesondere aufgrund des Einsatzes von Edelmetallen als Katalysatoren. Die *Festoxidelektrolyse* ist ein Hochtemperaturverfahren, bei dem Wasserdampf eingesetzt wird und ein Teil der benötigten Energie in Form von Wärme zugeführt werden kann. Dadurch sinkt der elektrische Energiebedarf, und es können höhere Wirkungsgrade erreicht werden. Gleichzeitig ist diese Technologie weniger flexibel im Lastbetrieb und weist aktuell noch geringere Lebensdauern auf, wodurch sie sich überwiegend in der Demonstrationsphase befindet. Ergänzend wird mit der *Anionenaustauschmembran-Elektrolyse* eine weitere Technologie entwickelt, die Vorteile der alkalischen und der PEMEL-Elektrolyse kombinieren soll. Insgesamt sind insbesondere bei der Reduktion der Systemkosten, der Erhöhung der Lebensdauer sowie der Verbesserung der Effizienz und Flexibilität weitere Fortschritte erforderlich [1].

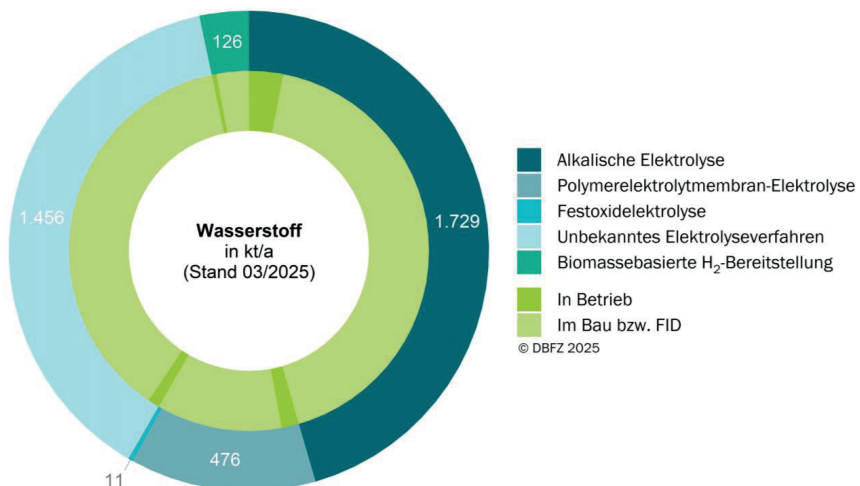


Bild 3: Weltweite Produktionskapazitäten von erneuerbarem Wasserstoff, basierend auf [5]

Neben der technologischen Entwicklung stellen die Kosten für erneuerbaren Wasserstoff einen entscheidenden Faktor für den Einsatz in der E-Fuel-Produktion dar. Während Investitionskosten für Elektrolyseure derzeit noch hoch sind, wird erwartet, dass diese durch Skaleneffekte und industrielle Serienfertigung deutlich sinken. Prognosen gehen von einer Reduktion der Investitionskosten um etwa die Hälfte bis zum Jahr 2030 aus. Dennoch zeigt sich, dass die Produktionskosten für Wasserstoff in erster Linie vom Preis des eingesetzten Stroms abhängen. Insbesondere günstige erneuerbare Stromquellen und hohe Auslastungen der Anlagen sind entscheidend für wettbewerbsfähige Wasserstoffkosten. Entsprechend gewinnen Standortfaktoren zunehmend an Bedeutung, da Regionen mit hoher Verfügbarkeit kostengünstiger erneuerbarer Energien deutliche Kostenvorteile bieten. Trotz des erwarteten Ausbaus der Produktionskapazitäten ist davon auszugehen, dass Wasserstoff mittelfristig eine knappe und kostenintensive Ressource bleibt. Der Bedarf steigt gleichzeitig in mehreren Bereichen, darunter Industrie, Verkehr, Energiespeicherung und chemische Produktion. Dadurch entsteht ein Wettbewerb um verfügbare Mengen, der zu anhaltend hohen Preisen führen kann [6].

Die für die Herstellung von E-Fuels notwendige Kohlenstoffquelle ist in der Regel Kohlendioxid. CO₂ kann aus industriellen Punktquellen (bis maximal 2041), biogenen Prozessen (aus der Erzeugung oder Verbrennung von Biokraftstoffen, flüssigen Biobrennstoffen oder Biomasse-Brennstoffen (gilt für Brennstoffe gemäß DA (EU) (EU)2023/1185 auch für Kohlenmonoxid) oder direkt aus der Atmosphäre gewonnen werden.

Industrielle CO₂-Quellen entstehen sowohl energiebedingt durch den Einsatz fossiler Brennstoffe als auch prozessbedingt durch chemische Umwandlungen innerhalb von Produktionsprozessen. Prozessbedingte Emissionen gelten dabei als besonders relevant, da sie häufig schwer zu vermeiden sind. In Deutschland und Europa zählen insbesondere die Eisen- und Stahlindustrie, die chemische Industrie sowie die mineralische Industrie zu den größten Emittenten. Ein erheblicher Anteil der Emissionen in der Stahlproduktion resultiert aus dem Einsatz von Koks als Reduktionsmittel im Hochofenprozess. In der chemischen Industrie entstehen Emissionen überwiegend bei der Energiebereitstellung, während in der Zement- und Kalkproduktion große Mengen prozessbedingt durch die Entsäuerung von Carbonaten freigesetzt werden. Biogene Anteile treten vor allem in der Papier- und Zellstoffindustrie auf. Räumlich konzentrieren sich große CO₂-Mengen insbesondere in industriellen Ballungsräumen mit hoher Produktionsdichte. Mit fortschreitender Dekarbonisierung der Industrie ist jedoch davon auszugehen, dass die verfügbaren CO₂-Mengen perspektivisch sinken. Szenarien zeigen, dass durch Substitution fossiler Brennstoffe und den Einsatz alternativer Produktionsverfahren die industriellen Emissionen deutlich reduziert werden könnten. Dennoch verbleiben insbesondere in der mineralischen Industrie weiterhin relevante prozessbedingte Emissionen, die langfristig als CO₂-Quelle verfügbar bleiben.

Neben industriellen Quellen stellen biogene Prozesse eine weitere Option dar. Insbesondere Biogas-, Biomethan- und Bioethanolanlagen bieten CO₂-Ströme mit vergleichsweise hoher Reinheit, die technisch gut abgeschieden werden können. Allerdings sind die verfügbaren Mengen im Vergleich zu industriellen Quellen begrenzt und können sich durch Veränderungen in der Nutzung von Biomasse künftig weiter verringern. Weltweit ergeben sich größere Potenziale vor allem durch die Bioethanolproduktion, beispielsweise in den USA und Brasilien. Zusätzlich könnte CO₂ aus bestehenden

Biogasanlagen erschlossen werden, sofern entsprechende Aufbereitungstechnologien eingesetzt werden.

Als dritte Option kann Kohlendioxid direkt aus der Atmosphäre abgeschieden werden. Diese sogenannten Direct-Air-Capture-Technologien ermöglichen eine ortsunabhängige Bereitstellung von CO₂ und bieten damit die Möglichkeit, Power-to-X-Anlagen in Regionen mit besonders günstigen erneuerbaren Energiepotenzialen zu errichten. Aufgrund der geringen CO₂-Konzentration in der Luft ist der technische Aufwand jedoch höher als bei Punktquellen, insbesondere durch den erhöhten thermischen Energiebedarf zur Regeneration der Sorptionsmittel. Eine effiziente Umsetzung erfordert daher eine Integration mit verfügbaren Wärmequellen oder erneuerbaren Energieoptionen. Insgesamt zeigt sich, dass sowohl industrielle als auch biogene Quellen und Direct-Air-Capture unterschiedliche Vor- und Nachteile aufweisen. Während industrielle Punktquellen kurzfristig größere Mengen bereitstellen können, bieten biogene Quellen eine klimaneutrale Alternative und DAC langfristig maximale Flexibilität. Für den großskaligen Hochlauf von E-Fuels wird daher voraussichtlich eine Kombination dieser CO₂-Bereitstellungsoptionen erforderlich sein. Bild 4 stellt das technische Ressourcenpotenzial von CO₂-Punktquellen und das sich daraus ergebende technische Potenzial von strombasiertem Methanol für Europa aus dem Jahr 2019 dar. Dabei gilt zu beachten, dass die fossilen Punktquellen der Stahl-, Zement- und Chemieindustrie perspektivisch als Ressource nicht mehr zulässig sind [1, 7].

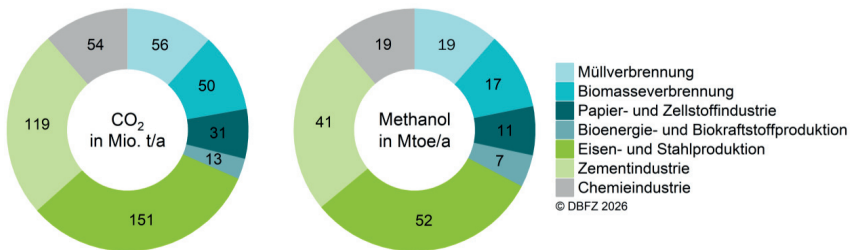


Bild 4: Technisches Potenzial von CO₂-Punktquellen und e-Methanol aus CO₂-Punktquellen für Europa in 2019, basierend auf [7]

3. E-Fuels-Szenarien unter aktueller Regulierung

Die zukünftige Rolle von E-Fuels im Energiesystem wird maßgeblich durch regulatorische Rahmenbedingungen bestimmt. Politische Instrumente schaffen verbindliche Nachfrage und tragen damit wesentlich zur Investitionssicherheit und zum industriellen Hochlauf entsprechender Produktionskapazitäten bei. In Deutschland stellt insbesondere die Treibhausgasminderungsquote ein zentrales Instrument für den Landverkehr dar, da sie Kraftstoffanbieter zur schrittweisen Reduktion der Treibhausgasintensität verpflichtet und damit erneuerbare Kraftstoffe einschließlich E-Fuels in den Markt integriert. Ergänzend adressieren europäische Regelwerke wie ReFuelEU Aviation den Luftverkehr durch steigende Beimischungsquoten für nachhaltige Flugkraftstoffe, während die FuelEU Maritime eine Begrenzung der Treibhausgasintensität von Schiffs-kraftstoffen vorsieht. (Ob eine deutsche THG-Quote für den Schiffsverkehr eingeführt

und wie diese ausgestaltet wird, ist zum Zeitpunkt der Erstellung dieses Beitrags noch offen.) Gemeinsam fördern diese Maßnahmen vor allem in schwer elektrifizierbaren Sektoren wie Luft- und Seeverkehr neben biobasierten Kraftstoffen den Einsatz synthetischer Kraftstoffe und bilden die Grundlage für verschiedene Bedarfsprojektionen. Im Zuge der Umsetzung der revidierten RED II (Richtlinie (EU) 2023/2413) wird eine Anpassung der deutschen Treibhausgasminderungsquote erwartet. Ein entsprechender Gesetzesentwurf sieht eine Fortschreibung der Quote bis zum Jahr 2040 sowie eine schrittweise Verschärfung vor. Darüber hinaus sollen zusätzliche Nebenbedingungen eingeführt beziehungsweise angepasst werden, darunter Unterquoten, Mehrfachanrechnungen, Obergrenzen und Anrechenbarkeiten einzelner Erfüllungsoptionen. Von besonderer Bedeutung ist die geplante Einführung einer energetischen Unterquote für erneuerbare Kraftstoffe nicht-biogenen Ursprungs (RFNBO) im Landverkehr, die bis zum Jahr 2040 auf einen Anteil von 8 % ansteigen soll. Diese Regelung würde erstmals einen expliziten Mindestbedarf an strombasierten Kraftstoffen im Straßenverkehr definieren und damit die Nachfrage nach E-Fuels unmittelbar beeinflussen [8].

Zur Bewertung der klimapolitischen Wirksamkeit des Gesetzesentwurfs (Stand vom 19.01.2026) wurden am DBFZ zwei unterschiedliche Entwicklungspfade für den Verkehrssektor analysiert (Bild 5). Das ambitionierte Szenario des DBFZ geht von einem beschleunigten Hochlauf der Elektromobilität im Straßenverkehr aus, der mit einer deutlichen Reduktion des Endenergieverbrauchs einhergeht. In diesem Fall sinkt der Bedarf an flüssigen Kraftstoffen insgesamt, wodurch auch der absolute Bedarf an E-Fuels begrenzt bleibt. Demgegenüber beschreibt das verzögerte Szenario des DBFZ eine langsamere Elektrifizierung und eine geringere Absenkung des Endenergiebedarfs. In diesem Szenario verbleibt ein höherer Bedarf an flüssigen Energieträgern, wodurch auch der Einsatz von E-Fuels zunimmt. Durch den Vergleich beider Szenarien lässt sich die Wirksamkeit der regulatorischen Maßnahmen unter optimistischen und pessimistischen Annahmen hinsichtlich der Elektrifizierung bewerten. Aus der Kombination der RFNBO-Unterquote und der jeweiligen sektoralen Entwicklungen ergeben sich im Rahmen der DBFZ-Analysen Bedarfe von unter 700 ktoe im Jahr 2030. Bis zum Jahr 2040 steigen diese, abhängig vom betrachteten Szenario, auf etwa 2,2 bis 2,9 Mtoe für den Straßenverkehr an. Parallel dazu erzeugt auch die europäische Verordnung ReFuelEU Aviation zusätzliche Nachfrage. Diese sieht eine spezifische Unterquote für synthetische Flugkraftstoffe vor, die bis 2040 auf 10 % und bis 2050 auf 35 % ansteigt. Abhängig von der Entwicklung des Flugkraftstoffverbrauchs entspricht dies einem Bedarf von etwa 0,7 bis 1,1 Mtoe synthetischer Flugkraftstoffe im Jahr 2040. Die Analysen des DBFZ zeigen zudem, dass E-Fuels aufgrund der derzeit absehbar hohen Produktionskosten sowie begrenzter verfügbarer Kapazitäten voraussichtlich primär zur Erfüllung der regulatorisch vorgegebenen Unterquoten eingesetzt werden. Ein darüber hinaus gehender Einsatz erscheint unter den aktuellen Rahmenbedingungen unwahrscheinlich. Insbesondere in der Schifffahrt wird in den DBFZ-Szenarien auf Basis bestehender regulatorischer Impulse kein signifikanter Einsatz von E-Fuels erwartet [9, 10].

Im Vergleich zu den DBFZ-Szenarien weisen die vom Umweltbundesamt veröffentlichten Projektionsdaten eine flachere Entwicklung des E-Fuel-Bedarfs bis 2040 auf. Die UBA-Projektionen orientieren sich primär an den Zielen des Bundes-Klimaschutzgesetzes und nicht unmittelbar an spezifischen E-Fuel-Quoten. Dadurch ergibt sich ein

geringerer und langsamer ansteigender Bedarf, der stärker durch sektorale Emissionsziele und weniger durch technologiebezogene Mindestanteile bestimmt wird. Dieser Unterschied verdeutlicht, dass die zukünftige Nachfrage nach E-Fuels erheblich davon abhängt, ob regulatorische Instrumente explizite Unterquoten vorgeben oder lediglich sektorale Emissionsziele definieren [11].

Insgesamt zeigen die betrachteten Szenarien, dass E-Fuels unter den aktuellen Regulierungen vor allem eine komplementäre Rolle einnehmen. Die Höhe des zukünftigen Bedarfs variiert dabei zwischen den Szenarien deutlich und hängt maßgeblich von der Geschwindigkeit der Elektrifizierung, der Ausgestaltung regulatorischer Unterquoten sowie von Kosten- und Verfügbarkeitsentwicklungen ab.

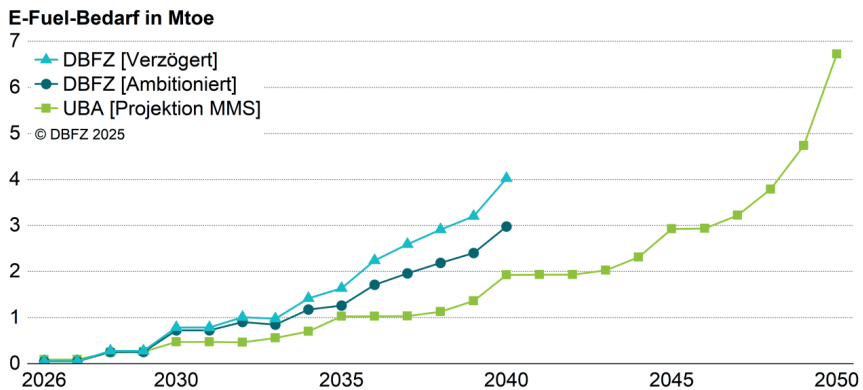


Bild 5: Zukünftiger E-Fuels-Bedarf für Straßen- und Flugverkehr in Deutschland, basierend auf [10,11]

4. Erneuerbare Kraftstoffe aus grünen Raffinerien der Zukunft

Die Nutzung bestehender Raffinerieinfrastruktur stellt einen wichtigen Ansatz dar, um den Markthochlauf erneuerbarer Kraftstoffe zu beschleunigen und Investitionskosten zu reduzieren. Da erneuerbare Kraftstoffe wie synthetisches Kerosin, Diesel oder Benzin in der Regel nicht über einen einzelnen Prozess selektiv hergestellt werden können, entstehen bei der Produktion häufig unterschiedliche Produktfraktionen sowie Nebenprodukte. Die Weiterverarbeitung und Aufbereitung dieser Zwischenprodukte kann jedoch in vorhandenen Raffineriestrukturen erfolgen, die bereits über geeignete Anlagen zur Fraktionierung, Hydrierung und Kraftstoffformulierung verfügen.

Das Vorhaben REF4FU (www.ref4fu.de) betrachtet Konzepte für grüne Raffinerien, die erneuerbare Zwischenprodukte wie Methanol, Fischer-Tropsch-Rohprodukte oder Pyrolyseöle integriert verarbeiten. Diese Komponenten können dezentral in Regionen mit günstigen erneuerbaren Energiebedingungen hergestellt und anschließend zu zentralen Raffineriestandorten transportiert werden. Dort erfolgt die Weiterverarbeitung zu marktfähigen Kraftstoffen, die den bestehenden Spezifikationen und zukünftigen

gen regulatorischen Anforderungen entsprechen. Durch diese Vorgehensweise können etablierte Prozessketten, Logistiksysteme sowie Qualitätssicherungsstrukturen weiterhin genutzt werden. Ein weiterer Vorteil dieser Konzepte soll in der hohen Flexibilität liegen, unterschiedliche Einsatzstoffe zu verarbeiten und daraus maßgeschneiderte Kraftstoffmischungen zu erzeugen. Dies erleichtert die Anpassung an sich ändernde Anforderungen verschiedener Sektoren sowie an regulatorische Vorgaben. Gleichzeitig ermöglicht die Einbindung erneuerbarer Zwischenprodukte eine schrittweise Transformation bestehender Standorte, ohne dass vollständig neue Produktionskomplexe errichtet werden müssen. Insgesamt kann die Nutzung vorhandener Raffinerieinfrastruktur somit wesentlich dazu beitragen, erneuerbare Kraftstoffe schneller zu skalieren und wirtschaftlich in bestehende Energiesysteme zu integrieren.

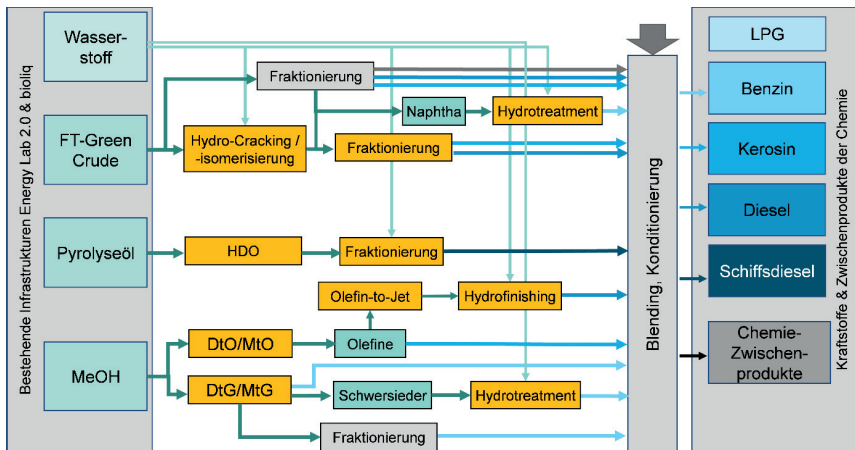


Bild 6: Schema des geplanten Prozessverbundes im Projekt REF4FU [12]

Das Projekt REF4FU wird im Rahmen des Gesamtkonzepts Erneuerbare Kraftstoffe durch das Bundesministerium für Verkehr gefördert. Die Förderrichtlinie für die Entwicklung regenerativer Kraftstoffe wird von der NOW GmbH koordiniert und durch die Projektträger VDI/VDE Innovation + Technik GmbH sowie die Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e. V. umgesetzt.

Literatur

- [1] Hauschild, S.; Costa de Paiva, G.; Tuschewitzki, W.; Prieß, T.; Mendler, F.; Neuling, U.; Zitscher, T.; Klüpfel, C.; Köchermann, J.; Thuncke, K.; Görsch, K. (2025): Technologien zur Kraftstoffbereitstellung. In: Schröder, J.; Görsch, K. (Hrsg.): Erneuerbare Energien im Verkehr. Monitoringbericht. S. 54-76. Leipzig: DBFZ. ISBN: 978-3-949807-23-7. DOI: 10.48480/w11j-9w27
- [2] Sia Partner (2025): 2025 International e-fuels observatory. Sia Partners
- [3] BLE (2025): Erfahrungsbericht für das Jahr 2024. Bundesanstalt für Landwirtschaft und Ernährung.

- [4] EASA (2025): ReFuelEU Aviation Annual Technical Report. 2024 in review. European Union Aviation Safety Agency
- [5] IEA (2024), Hydrogen Production Projects Database, <https://www.iea.org/data-and-statistics/data-product/hydrogen-production-and-infrastructure-projects-database>. All rights reserved.
- [6] Dögnitz, N.; Schröder, J.; Eghbalian, Y. (2025): Price factors for future hydrogen. Fuels of the future conference. 21.01.2025.
- [7] Naumann, K.; Cyffka, K.-F.; Costa de Paiva, G.; Nieß, S.; Neuling, U.; Zitscher, T. (2025): Ressourcen und ihre Mobilisierung. In: Schröder, J.; Görsch, K. (Hrsg.): Erneuerbare Energien im Verkehr. Monitoringbericht. S. 77-100. Leipzig: DBFZ. ISBN: 978-3-949807-23-7. DOI: 10.48480/w11j-9w27
- [8] Deutscher Bundestag (2026): Gesetzentwurf der Bundesregierung. Entwurf eines Zweiten Gesetzes zur Weiterentwicklung der Treibhausgasminderungsquote. Drucksache 21/4083
- [9] Naumann, K.; Etzold, H.; Müller-Langer, F. (2025): Hintergrundpapier | Szenarien zur THG-Quote im Kontext des Referentenentwurfs 2025 und des Klimaschutzgesetzes bis 2045. Leipzig: DBFZ. 07/2025
- [10] Naumann, K.; Etzold, H.; Müller-Langer, F. (2026): Angepasste Szenarien zur THG-Quote bis 2045 im Kontext der aktuellen Entwürfe und Stellungnahmen zum Gesetz zur Weiterentwicklung der Treibhausgasminderungsquote sowie des Klimaschutzgesetzes. Leipzig: DBFZ 01/2026
- [11] UBA (2025): Treibhausgas-Projektionen 2025 für Deutschland. Nachfrage strombasierte synthetische Flüssigkraftstoffe. Data Cube. Umweltbundesamt (UBA)
- [12] KIT (2023): REF4FU - Erneuerbare Kraftstoffe aus grünen Raffinerien der Zukunft. Karlsruher Institut für Technologie. www.ref4fu.de

Wasserstoff-Direkteinblasung für Retrofit-Motoren im Bahnbereich

Philipp Leue, Moritz Beinhauer, Kay Mahler, Christian Reiser

Abstract

The electrification rate of the entire German railway network stands at only 54 percent. Overhead line infrastructure is largely absent on secondary lines and at cross-border rail crossings. On non-electrified routes, diesel multiple units continue to dominate operations. Given service lives of at least 30 years and the simultaneously growing pressure to reduce emissions in public transport, there is an urgent need for sustainable propulsion concepts. The procurement of new battery-electric or fuel cell-based vehicles is currently not economically viable for many operators.

Against this backdrop, the TRAINS UV15 project presents an innovative refurbishment concept for retrofitting existing diesel multiple units with hydrogen combustion engines. The primary objective is to retain as many original components as possible in order to minimize costs and reduce the effort required for delta certification. At WTZ Roßlau gGmbH, the hydrogen engine was developed and validated methodically, with the development chain extending from single-cylinder investigations for combustion process development through full engine testing to complete integration into the powerpack. The hydrogen combustion process is optimized within the competing demands of combustion anomalies, in-engine emissions formation, and power delivery. Following successful test bench validation of the complete H₂ powerpack, integration into the Lint 41 demonstrator vehicle is now underway.

Kurzfassung

Der Elektrifizierungsgrad des gesamten deutschen Schienennetzes liegt bei lediglich 54 Prozent. Vor allem auf Nebenstrecken und im grenzüberschreitenden Verkehr fehlt die Oberleitungsinfrastruktur weitgehend. Auf nicht elektrifizierten Strecken dominieren weiterhin dieselbetriebene Triebzüge. Angesichts von Nutzungsdauern der Triebzüge von mindestens 30 Jahren und des gleichzeitig steigenden Drucks zur Emissionsreduktion im öffentlichen Personennahverkehr besteht ein dringender Bedarf an nachhaltigen Antriebskonzepten. Eine Neubeschaffung batterieelektrischer oder brennstoffzellenbasierter Fahrzeuge ist für viele Betreiber derzeit wirtschaftlich nicht realisierbar.

Vor diesem Hintergrund wird im Rahmen des Projekts TRAINS UV15 ein innovatives Refurbishment-Konzept für die Umrüstung bestehender Dieseltriebzüge auf Wasserstoffverbrennungsmotoren vorgestellt. Zielstellung ist dabei, möglichst viele Originalkomponenten beizubehalten, um die Kosten zu minimieren und den Aufwand für die Delta-Zulassung zu reduzieren. Bei der WTZ Roßlau gGmbH wurde der Wasserstoffmotor methodisch entwickelt und validiert, wobei die Entwicklungskette von Einzylin-

deruntersuchungen zur Brennverfahrensentwicklung über Vollmotorversuche bis zur vollständigen Integration in das Powerpack reichte. Das Wasserstoffbrennverfahren wird dabei im Spannungsfeld von Verbrennungsanomalien, innermotorischer Emissionsbildung und Leistungsentfaltung abgestimmt. Nach erfolgreicher Prüfstandsvalidierung des vollständigen H₂-Powerpacks erfolgt die Integration in den Demonstrator-Triebzug Lint 41.

1. Einleitung

Der Coradia Lint von Alstom ist mit über 1.000 verkauften Fahrzeugen der meistverkaufte Dieseltriebwagen Europas und seit dem Jahr 2000 in mehr als 30 Netzen in Deutschland, Europa und Kanada im Einsatz (Abbildung 1). Er steht stellvertretend für eine große Fahrzeugflotte, die täglich auf nicht elektrifizierten Neben- und Regionalstrecken zum Einsatz kommt. Ein Ausbau dieser Strecken mit Oberleitungsinfrastruktur ist kurz- bis mittelfristig nicht zu erwarten. Mit einem Elektrifizierungsgrad von lediglich 54 Prozent des gesamten deutschen Schienennetzes und nur 49 Prozent elektrifizierter Schienen-Grenzübergänge bleibt der Dieselantrieb auf absehbare Zeit ein bestimmender Faktor im Regionalverkehr.

Gleichzeitig steigt der Druck zur Emissionsreduktion im öffentlichen Personennahverkehr. Da Triebzüge auf Nutzungsdauern von mindestens 30 Jahren ausgelegt sind, scheidet eine vollständige Neubeschaffung für viele Betreiber als kurzfristige Lösung aus. Die Herausforderung besteht darin, bestehende Fahrzeuge wirtschaftlich und technisch tragfähig zu dekarbonisieren, ohne die bewährten Wartungsstrukturen und die regionale Betreibbarkeit zu gefährden.

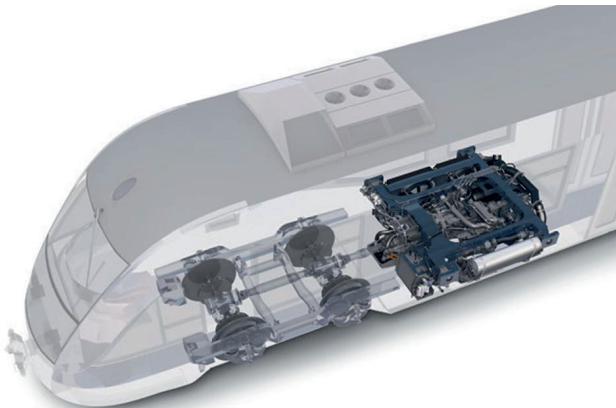


Abbildung 1: Einbausituation des Powerpacks als Unterflurmotor im Coradia Lint 41 [13]

Der Wasserstoffverbrennungsmotor bietet hierfür einen vielversprechenden Ansatz. Im Unterschied zur Brennstoffzellentechnologie erlaubt er eine weitgehende Weiter-

nutzung bestehender Antriebskomponenten. Die zentrale technische Herausforderung liegt dabei in der Leistungsäquivalenz zum ursprünglichen Dieselmotor bei gleichzeitiger Einhaltung der begrenzten Bauräume des vorhandenen Powerpacks. Konventionelle Wasserstoff-Saugrohrreinbläsung erreicht diese Leistungsdichte nicht; die Wasserstoff-Direkteinbläsung (H_2 -DI) stellt daher eine notwendige Weiterentwicklung dar. Der vorliegende Beitrag beschreibt die methodische Entwicklung und prüfstandsbaasierte Validierung dieses Ansatzes im Rahmen des Projekts TRAINS UV15, gefördert durch das BMFTR, am Beispiel des Alstom Coradia Lint 41 Stage 3b.

2. Stand der Technik

Die Wasserstoff-Direkteinbläsung (H_2 -DI) stellt eine vielversprechende Technologie zur Reduzierung von CO_2 -Emissionen und zur Förderung nachhaltiger Mobilität dar. Im Kontext der Umrüstung von Schienenfahrzeugen ist die Leistungsäquivalenz zu bestehenden Dieselmotoren von zentraler Bedeutung. Im Vergleich zur Wasserstoff-Saugrohrreinbläsung bietet die H_2 -DI das Potenzial für eine höhere Leistungsdichte und damit eine dem Dieselmotor vergleichbare Leistung. Aktuelle Veröffentlichungen zeigen vielversprechende Fortschritte in der Injektorentwicklung. Unternehmen wie Liebherr, Bosch und Schaeffler Engineering arbeiten derzeit an Injektorkonzepten für die Wasserstoff-Direkteinbläsung. Aufgrund des anspruchsvollen Mischungsverhaltens von H_2 und Luft sowie der kurzen Gemischbildungszeit steht die Optimierung der Einspritzdüsen dabei häufig im Mittelpunkt. [7][8][9]

Ein weiterer innovativer Ansatz zur Leistungssteigerung von Wasserstoffmotoren ist der Einsatz der Wassereinspritzung. Jüngste Veröffentlichungen haben bereits ein hohes Potenzial zur Steigerung des indizierten Mitteldrucks durch eine Moderierung chemischer Reaktionen nachgewiesen, was zur Reduzierung kritischer Verbrennungsanomalien wie Früh- oder Spätzündungen beiträgt. [11][12]

Erste Konzepte neu entwickelter H_2 -Motoren auf Basis bestehender Motorkonzepte befinden sich zum Zeitpunkt der Veröffentlichung bereits im Vorserienstand [6]. Im Unterschied zum nachfolgend beschriebenen Retrofit-Ansatz handelt es sich dabei stets um neue Motorgenerationen.

3. Aufbau und Versuchsdurchführung am Vollmotor

Der in dieser Studie verwendete Versuchsmotor basiert auf dem Antriebsmotor eines Powerpacks, das für den Einsatz in Triebwagen konzipiert ist. Es handelt sich um einen MTU 1800, einen Reihensechszylindermotor in horizontaler Bauweise. Der Motor hat einen Hubraum von 12,9 Litern und ist als Dieselmotor ausgelegt. Die Abbildung 2 zeigt den Standardaufbau des Powerpacks.

Die Umrüstung des ursprünglichen Dieselmotors auf Wasserstoffbetrieb erforderte trotz des Ziels, möglichst viele Serienkomponenten beizubehalten, umfangreiche Modifikationen an mehreren Baugruppen. Diese Anpassungen betrafen insbesondere die Kraftstoffperipherie und das Einspritzsystem für den Dieselmotor, die vollständig entfernt wurden. Stattdessen wurde ein Wasserstoffeinspritzsystem mit der dazugehörigen Peripherie integriert. Das Einspritzsystem ist als Niederdruck-Direkteinspritzsystem ausgeführt. Ein weiterer wesentlicher Aspekt der Umrüstung ist die Integration eines Zündsystems, das sowohl Zündkerzen als auch Spulen umfasst. Darüber hinaus



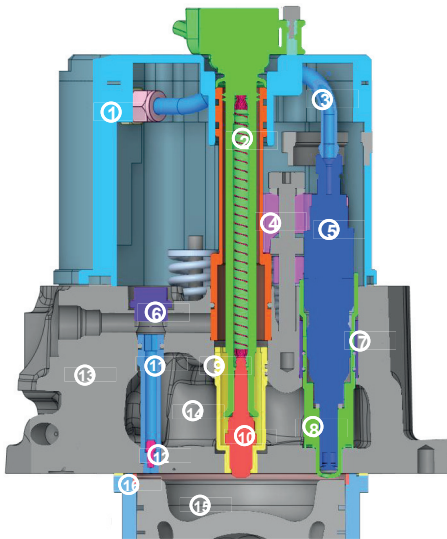
Abbildung 2: Powerpack mit Dieselmotor [5]

wurde der Kolben neu gestaltet und das Verdichtungsverhältnis des Motors abgesenkt. Zusätzlich wurde ein Wassereinspritzsystem am Ansaugkrümmer integriert.

Die Umrüstung des Dieselmotors auf Wasserstoffbetrieb stellte besonders hohe Anforderungen an den Zylinderkopf. In der neuen Konfiguration muss dieser Platz für mehrere wichtige Komponenten bieten, darunter die Zündkerze, den Wasserstoffinjektor sowie einen piezoelektrischen Brennraumdrucksensor für den Prüfstandsbetrieb. Obwohl eine vollständige Neukonstruktion des Zylinderkopfes technisch möglich gewesen wäre, hätte dies einen erheblichen Aufwand bedeutet und dem ursprünglichen Ansatz widersprochen, möglichst viele Komponenten des Dieselmotors zu übernehmen. Abbildung 3 zeigt die Baugruppe aus Zylinderkopf, Ventildeckel und Kolben. Das zentrale Element der Konstruktion ist der Injektor für die Wasserstoff-Direkteinspritzung (5), der aufgrund seiner Breite und Länge den größten Anpassungsaufwand erforderte. Aus diesem Grund konnten die ursprünglichen Ventildeckel (1) nicht weiterverwendet werden, sodass am WTZ neue Teile konstruiert und gefertigt wurden.

Darüber hinaus ist in Abbildung 3 (15) der neu gestaltete Kolben für den Wasserstoffbetrieb zu sehen. Die unterschiedlichen Anforderungen beim Wechsel vom Diesel zum Wasserstoffverbrennungsprozess sowie Erkenntnisse aus vorangegangenen Einzylindertests machten die Neukonstruktion und Fertigung der Kolbenmulde erforderlich. *Abbildung 4* zeigt den Schnitt des Originalkolbens im Dieselmotor mit der klassischen „Omega-Mulde“. Am äußeren Rand der Mulde befindet sich eine ausgeprägte Vertiefung, deren Form auf die Strahlführung des zentral angeordneten Injektors abgestimmt ist. Für die Wasserstoffverbrennung ist ein niedrigeres Verdichtungsverhältnis erforderlich, das durch eine größervolumige, flachere Topfmulde erreicht werden kann. *Abbildung 4* zeigt die angepasste Mulde links (blau). Als weitere Maßnahme zur Reduzierung des Verdichtungsverhältnisses wurden Adapterplatten mit einer Dicke von 3 mm zwischen Kurbelgehäuse und Zylinderkopfdichtung integriert.

Zur Bewertung der thermomechanischen Stabilität des Kolbens wurde eine FEM-Simulation mit Ansys Mechanical durchgeführt. Das Ergebnis der Festigkeitssimulation zeigte, dass der bearbeitete Kolben nur geringfügig höher beansprucht wird und daher für den Versuchsbetrieb geeignet ist.



- 1: Ventildeckel
- 2: Zündspule
- 3: H₂-Leitung
- 4: Injektorklemmpratze
- 5: H₂DI-Injektor
- 6: Dichtung zur Indikationshülse
- 7: Dichthülse zum Injektor
- 8: Injektorhülse
- 9: Zündkerzenhülse
- 10: Zündkerze
- 11: Indikationsdrucksensorhülse
- 12: Indikationsdrucksensor
- 13: Zylinderkopf
- 14: Kühlwassermantel
- 15: Angepasster Kolben
- 16: Laufbuchse (blau) mit Zylinderkopfdichtung (gelb) und Ölbleifring (rot)

Abbildung 3: Schematische CAD-Darstellung des angepassten Zylinderkopfes am Gesamtmotor



Abbildung 4: Neu gestalteter Kolben für Wasserstoffverbrennungsprozesse

Ein weiterer wesentlicher Aspekt der Motorumrüstung ist die Anpassung des Aufladekonzepts. Untersuchungen am Prüfstand zeigten, dass der originale Diesel-Turbolader im Wasserstoffbetrieb im unteren Drehzahlbereich nicht ausreichend Ladedruck aufbaut. Dies ist auf die im Vergleich zum Dieselbetrieb veränderten Abgasenthalpien bei Wasserstoffverbrennung zurückzuführen. Die praktische Konsequenz ist gravierend: Mit dem originalen Turbolader ist das Anfahren des Triebzugs aus dem Stillstand nicht möglich. Als geeignetes Aufladekonzept wurde daher ein Turbolader mit variabler Turbinengeometrie (VTG) identifiziert und in den Versuchsmotor integriert (Abbildung 5).

Durch die verstellbaren Leitschaufeln ermöglicht der VTG-Turbolader auch bei niedrigen Drehzahlen und geringem Abgasmassenstrom einen ausreichenden Ladedruckaufbau und damit das Anfahren aus dem Stillstand.

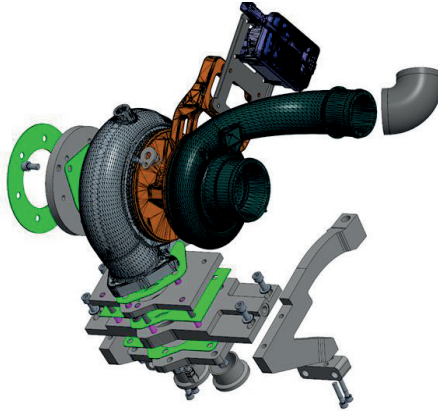


Abbildung 5: CAD-Darstellung des integrierten VTG-Turboladers

Simulationsseitig wurden diese Zusammenhänge durch den Projektpartner OvGU Magdeburg im Rahmen von 1D-Motorberechnungen untersucht und validiert [14]. Abbildung 6 zeigt die simulierte Motorkennfelder für den Standard-Turbolader und den VTG-Turbolader bei $\lambda = 2,7$ und $\lambda = 2,0$. Die Simulation bestätigt die deutliche Erweiterung des erreichbaren Betriebsbereichs durch den VTG-Turbolader, insbesondere im niedrigen Drehzahlbereich.

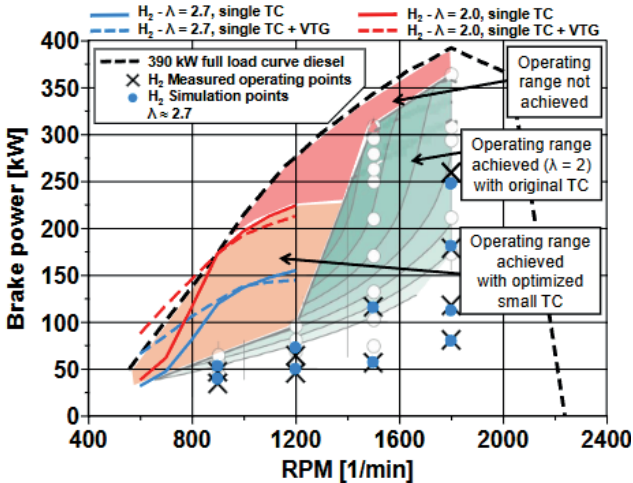


Abbildung 6: Simulierte Motorkennfelder für Standard-Turbolader und VTG-Turbolader bei $\lambda = 2,7$ und $\lambda = 2,0$ [14]

4. Versuche und Ergebnisse

Um die Funktion des Wasserstoff-Umrüstkonzepts am Gesamtmotor nachzuweisen, wurden auf Basis vorangegangener Einzylindermessungen verschiedene Parametervariationen durchgeführt. Im Einzelnen wird zunächst die Variation des Einspritzendes (EBE) bei Nenndrehzahl (1800 1/min) vorgestellt (Abbildung 8).

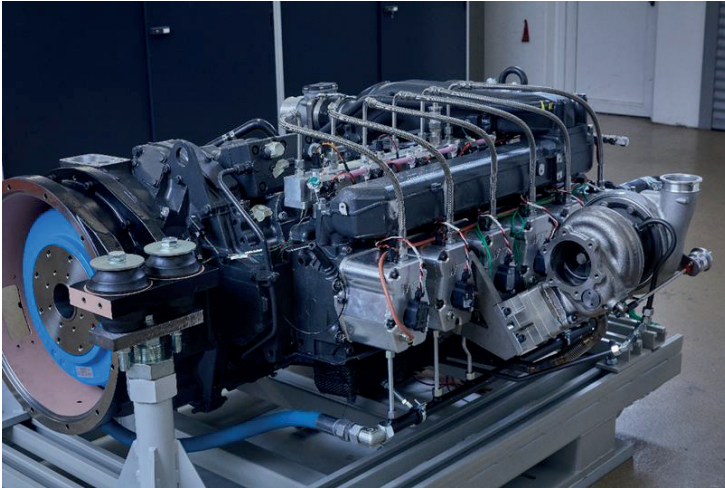


Abbildung 7: Gesamtmotor auf Prüfstandspalette mit neuem Turbolader, Wasserstoffsystem und Wassereinspritzung

Zur Bestimmung des optimalen Einspritzzeitpunkts wurde eine Variation bei Nenndrehzahl und mittlerer Last durchgeführt. Dies ermöglicht es, sowohl den Zeitfaktor der Gemischbildung als auch den Einfluss der Ladungsdichte mit ausreichender Genauigkeit zu berücksichtigen. Die Untersuchungen wurden beim gewählten Ziel-Verbrennungsluftverhältnis von 2,7 durchgeführt, der Verbrennungsschwerpunkt wurde auf 8°KW nach Zündungs-OT gesetzt. Der indizierte Mitteldruck betrug 10 bar. Anhand der gewonnenen Messdaten zeigte sich, dass der effektive Wirkungsgrad η_{AE} eine charakteristische „Badewannenkurve“ aufweist. Diese ist durch zwei lokale Maxima an den äußeren Grenzen des Untersuchungsbereichs und ein ausgeprägtes lokales Minimum im mittleren Einstellbereich gekennzeichnet. Im Bereich sehr früher Einspritzzeitpunkte ($\text{EBE} < -180^{\circ}\text{KW}$) ist dieser Effekt auf eine zunehmend verbesserte Durchmischung des eingespritzten Wasserstoffs mit der Verbrennungsluft zurückzuführen. In diesem Fall ist die Einspritzung einerseits synchron mit dem Ansaughub, andererseits nimmt die für die Gemischbildung verfügbare Zeit mit zunehmender Frühverstellung zu. Dies führt zu einer vollständigeren Verbrennung mit geringerem H_2 -Schlupf. In Richtung später Einspritzzeitpunkte nimmt die Gemischbildungszeit kontinuierlich ab, was die Inhomogenitäten im Brennraum erhöht und den Wirkungsgrad senkt. Bei sehr später Einspritzung ($\text{EBE} > -140^{\circ}\text{KW}$) führt diese Inhomogenität zu einer Schichtung der Ladung. In diesem Fall entsteht im Brennraum eine Zone mit Kraftstoff-Luft-Gemisch, die von einer Zone mit reiner Luft umgeben ist. Dieser Effekt führt aufgrund

des lokal fetteren Luft-Kraftstoff-Gemisches zu einer schnelleren Verbrennung. Darüber hinaus reduziert die Umgebungsluft die Wandwärmeverluste infolge des verminderten Wärmeübergangs an die Brennraumwand. Beide Effekte kompensieren den durch die Inhomogenität erhöhten Wasserstoffschlupf, was zu einem höheren Wirkungsgrad führt. Als Nachteil ist jedoch der Anstieg der Stickoxidemissionen zu nennen, der auf den lokalen Temperaturanstieg zurückzuführen ist. Aufgrund der gewählten mittleren Motorlast ($p_{mi} = 10 \text{ bar}$) und des gewählten Luftüberschusses zeigte sich für den untersuchten Lastpunkt ein sehr geringes absolutes Niveau der Stickoxidemissionen. Die relative Veränderung durch geänderte Einspritzparameter verdeutlicht jedoch die genannten Effekte. Hinsichtlich der Verbrennungsstabilität sind über den gesamten Einstellbereich keine signifikanten Änderungen festzustellen. Im Verlauf der Messreihe zeigt sich eine Varianz, die im Bereich üblicher Ottomotor-Verbrennungskonzepte liegt. Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass für nachfolgende Untersuchungen eine frühe Wasserstoffeinspritzung angestrebt werden sollte, da diese das Optimum hinsichtlich Wirkungsgrad, H_2 -Schlupf und Stickoxidemissionen darstellt.

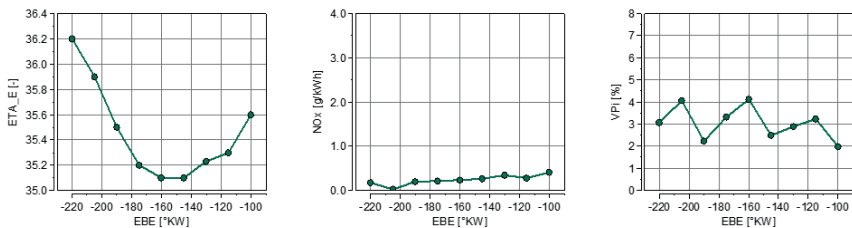


Abbildung 8: Variation des Einspritzendes am Gesamtmotor bei $n = 1800 \text{ 1/min}$ und $p_{mi} = 10 \text{ bar}$

Darüber hinaus wurde der Einfluss der Wassereinspritzung am Ansaugkrümmer zur Minimierung der Stickoxidemissionen experimentell bestimmt. Hierbei wurde der Wassermassenanteil bezogen auf den Kraftstoffmassenanteil bis zu einem Faktor von 3 variiert (1).

$$\text{Var}_{H_2O} = \frac{\dot{m}_{H_2O}}{\dot{m}_{H_2}} \quad (1)$$

Um den alleinigen Einfluss der Wassereinspritzung zu analysieren, wurde ein Betriebspunkt mit konstanter Last ($IMEP = 10 \text{ bar}$) und konstantem Luftverhältnis $\lambda = 2,0$ gewählt. Im Verlauf der Untersuchung konnten keine signifikanten Unterschiede im effektiven Wirkungsgrad und in der Mitteldruckvarianz in Abhängigkeit vom Wassergehalt festgestellt werden. Dieser Effekt ist in erster Linie auf die gewählten Randbedingungen sowie die weiten Zündgrenzen und die hohe Reaktivität von Wasserstoff zurückzuführen. Besonders bemerkenswert ist hingegen der Einfluss auf die Stickoxidemissionen. Bei einem Wasser-Kraftstoff-Verhältnis von drei konnte eine Stickoxidreduzierung von 75 % nachgewiesen werden. Durch die Erhöhung der Wassermasse im Brennraum ergibt sich durch den Einfluss der Verdampfungsenthalpie ein Kühleffekt für die Brennraumladung. Darüber hinaus bewirkt die entstehende Wasserdampfmenge eine Erhöhung des Inertgasanteils im Brennraum. Dies führt zu niedrigeren

Spitzentemperaturen im Verlauf der Energieumwandlung, die nach dem Zeldovich-Mechanismus einen direkt reduzierenden Einfluss auf die Stickoxidbildung haben.

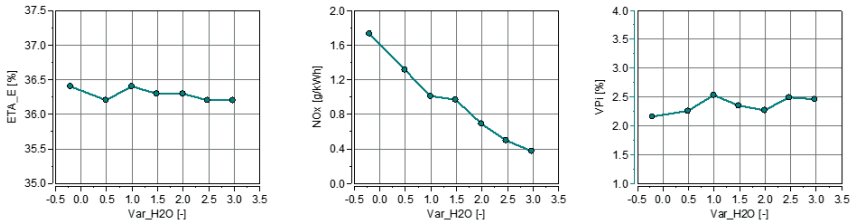


Abbildung 9: Variation der Wassermasse am Gesamtmotor bei $n = 1800 \text{ 1/min}$ und $p_{mi} = 10 \text{ bar}$

Abbildung 10 zeigt einen Vergleich der Motorkennfelder mit und ohne Wassereinspritzung. Die effektive Leistung P_{eff} ist über der Drehzahl n aufgetragen, die Stickoxidemissionen sind als leistungsspezifische Emission in g/kWh dargestellt. Mit Wassereinspritzung und einem niedrigeren Luftverhältnis von $\lambda = 2,0$ wird der nutzbare Betriebsbereich gegenüber dem Magerbetrieb bei $\lambda = 2,7$ erweitert. Die Wassereinspritzung steht damit als wirksame innermotorische Maßnahme zur weiteren Leistungssteigerung in nachfolgenden Entwicklungsstufen zur Verfügung.

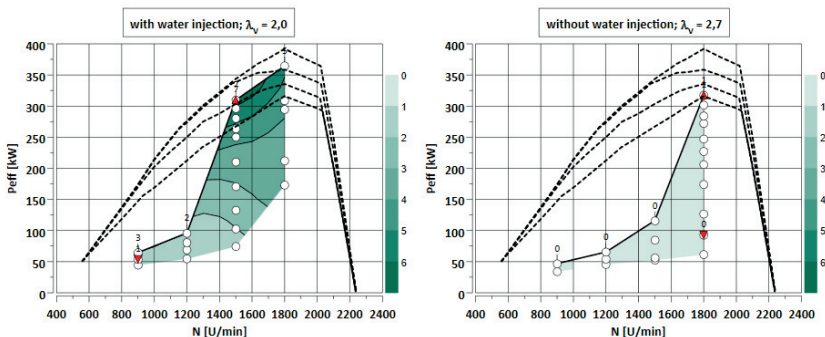


Abbildung 10: Einfluss der Wassereinspritzung und der Betriebsstrategie auf Stickoxidemissionen und Niedriglastdrehmoment

Die Abbildungen 11 und 12 zeigen den Vergleich der Motorkennfelder für den einstufigen Standard-Turbolader und den VTG-Turbolader. Die effektive Leistung P_{eff} ist über der Drehzahl n aufgetragen. Der erreichbare Betriebsbereich ist grün dargestellt, wobei die Farbskala den effektiven Wirkungsgrad von 35 % bis 41 % wiedergibt. Der rot markierte Bereich kennzeichnet die Betriebsgrenzen, die im Versuchsbetrieb nicht überschritten werden konnten.

Die Messergebnisse bestätigen, dass mit dem einstufigen Standard-Turbolader die nötigen Lastanforderungen nur bei hohen Motordrehzahlen möglich sind. Im unteren

Drehzahlbereich konnten keine stabilen Betriebspunkte erreicht werden, was das Anfahren des Triebzugs aus dem Stillstand ausschließen würde. Mit dem VTG-Turbolader verschiebt sich der nutzbare Betriebsbereich in den unteren Drehzahlbereich; stabile Betriebspunkte konnten ab 600 U/min gemessen werden. Die höchsten Wirkungsgrade werden dabei im unteren Drehzahlbereich erreicht und nehmen mit steigender Drehzahl ab. Im Unterschied zum Standard-Turbolader, dessen Betriebsbereich durch die unzureichende Abgasenthalpie im Wasserstoffbetrieb begrenzt wird, wird der rot markierte Grenzbereich des VTG-Turboladers durch zwei andere Mechanismen definiert: Im oberen Drehzahlbereich begrenzt die maximale Turboladerdrehzahl von 128.000 1/min den Betrieb. Im oberen Lastbereich führt die notwendige Absonderung des Luftverhältnisses zu Verbrennungsanomalien, weshalb die Leistung auf 250 kW abgeregelt wird. Im gesamten Betriebsbereich wird der NO_x -Grenzwert von 2 g/kWh gemäß EU Stage III B ohne Abgasnachbehandlungssystem durch innermotorische Maßnahmen eingehalten

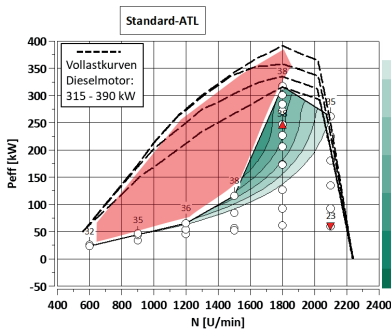


Abbildung 11: Effektiver Wirkungsgrad und Betriebsgrenzen mit einstufigem Standard-Turbolader bei $\lambda = 2,7$

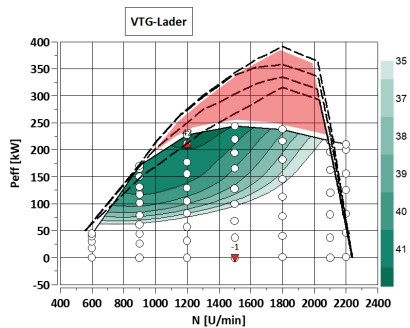


Abbildung 12: Effektiver Wirkungsgrad und Betriebsgrenzen mit VTG-Turbolader bei $\lambda = 2,7$

5. Fazit

Im Rahmen des Projekts TRAINS UV15 wurden die notwendigen Maßnahmen und Anpassungen zur Umrüstung eines bestehenden Bahnantriebs vom Dieselbetrieb auf reinen Wasserstoffbetrieb methodisch entwickelt und am Prüfstand validiert.

Die Umrüstung von Verbrennungsmotoren von Diesel auf Wasserstoff stellt einen vielversprechenden Ansatz zur Emissionsreduktion im Schienenverkehr dar. Die Wasserstoff-Direkteinblasung ($\text{H}_2\text{-DI}$) erwies sich dabei als Schlüsseltechnologie, da sie Rückzündungen verhindert und eine höhere Leistungsdichte gegenüber der Saugrohreinblasung ermöglicht. Mithilfe von CFD-Simulationen des Projektpartners OvGU Magdeburg wurde die Gemischbildung im Brennraum optimiert, was zu niedrigen NO_x -Emissionen und einem hohen Motorwirkungsgrad beiträgt.

Die Wassereinspritzung am Ansaugkrümmer erwies sich als wirksame innermotorische Maßnahme zur Reduzierung der NO_x -Emissionen, ohne negative Auswirkungen

auf den Motorwirkungsgrad. Der Betrieb bei $\lambda = 2,0$ mit Wassereinspritzung bietet Potenzial zur weiteren Leistungssteigerung und steht als Entwicklungsschritt für nachfolgende Ausbaustufen zur Verfügung. Im Demonstratorfahrzeug wird zunächst mit $\lambda = 2,7$ ohne Wassereinspritzung gefahren.

Die Untersuchungen zum Aufladekonzept zeigten, dass der einstufige Standard-Turbolader im Wasserstoffbetrieb nicht für den gesamten erforderlichen Betriebsbereich geeignet ist. Mit dem VTG-Turbolader konnte der nutzbare Betriebsbereich in den unteren Drehzahlbereich verschoben und das Anfahren des Triebzugs aus dem Stillstand ermöglicht werden. Der NO_x -Grenzwert von 2 g/kWh gemäß EU Stage III B wurde dabei im gesamten Betriebsbereich durch innermotorische Maßnahmen ohne Abgasnachbehandlung eingehalten.

Nach erfolgreicher Prüfstandsvalidierung des vollständigen H_2 -Powerpacks steht die Integration in den Demonstrator-Triebzug Lint 41 als nächster Schritt zur Demonstration der Praxistauglichkeit des entwickelten Retrofit-Konzepts bevor.

Danksagung

Die Autoren danken dem Bundesministerium für Forschung, Technologie und Raumfahrt für die Förderung des Projekts im Namen der TRAINS-Partner sowie dem Projektträger Jülich für die hervorragende administrative Projektbegleitung.

Gefördert durch:



Bundesministerium
für Forschung, Technologie
und Raumfahrt



Wandel durch
Innovation
in der Region

Literatur

- [1] A. Lazar, et al.: Joint project " Studien zu Diesel-Ersatzlösungen für Bestands-triebzüge": ein Vorhaben im Rahmen des BMBF-Programms "Wandel durch Innovation in der Region - WIR!". Hannover, Technische Informationsbibliothek. Available online in 2022
- [2] Program line "WIR! – Wandel durch Innovation in der Region", available online at https://www.innovation-strukturwandel.de/strukturwandel/de/innovation-strukturwandel/wir/_wir_.html
- [3] A. Lazar, et al.: WIR! TRAINS 1D train and ICE model retrofitting Diesel train-sets with DISI gas engines for variable mixtures of natural gas and hydrogen. Illinois. GT global conference. 2020, available online at https://www.gtisoft.com/wp-content/uploads/2020/11/WTZ_WIR_TRAINS_GT_2020_v2_1.pdf
- [4] A. Lazar, K. Graubaum: Grüne Aussichten für Triebzüge. Berlin. BMBF Innovation & Strukturwandel. 2021. available online at https://www.innovation-strukturwandel.de/strukturwandel/de/report/_documents/artikel/g-i/gruene-aussichten-fuer-triebzuege.html

- [5] MTU - Sustainable power that matters. <https://www.mtu-solutions.com> (accessed on 05.2023)
- [6] P. Albrecht, D. Hyna, M. Weidner, T. Malischewski, F. Lindner: State-of-the-art H2 combustion at the MAN H4576, MAN Truck & Bus, conference paper, Dessau Gas Engine Conference 2024
- [7] P. Send*, J. Csató, R. Pirkel, G. Neuhaus, F. Masson: Hydrogen combustion results with low-pressure direct injection for 130 mm bore size engines, Liebherr-Components Deggendorf GmbH, Liebherr Machines Bulle SA. In: conference paper, Dessau Gas Engine Conference 2024, Dessau-Roßlau, Saxony-Anhalt, Germany
- [8] O. Weber, J. Leberwurst, J. Broz, S. Sulzer, O. Hahn: New Aspects of Mixture Formation Processes in H2 Engines, Schaeffler Technologies AG & Co. KG. In: conference paper, Dessau Gas Engine Conference 2024, Dessau-Roßlau, Saxony-Anhalt, Germany
- [9] P. Leick*; P. Jochmann; J.N. Geiler; K.G. Stapf; M. Mansbart; M.E. Cassone Potenza: Analysis of Fuel Injection and Mixture Formation in Hydrogen Engines, Robert Bosch GmbH, Schwieberdingen, Germany. In: conference paper, 12th Conference on Injection and Fuels 2023, Politecnico di Bari, Italy
- [10] H. Rottengruber, D. Wintergoller: "TRAINS_UV14 - IMS" TRAINS_UV14 TRAINS_UV14 - IMS" TRAINS_UV14 Effiziente gasmotorische Antriebssysteme für Triebzüge - AP2 – Vorentwicklung der Motorparameter zur Betriebskennfeldauslegung, final report
- [11] S. Eicheldinger, D. Waligorski, G. Wachtmeister, M. Jaensch - Leistungspotenzial von Wasserstoffverbrennungsmotoren für Industrieanwendungen in MTZ 10/2022
- [12] J. Caine - AVL H2 INTERNAL COMBUSTION ENGINE available online at <https://fpc-event.co.uk/wp-content/uploads/2024/04/jon-caine.pdf> [accessed on 27.03.2025]
- [13] Rolls-Royce Group, "POWERPACKS WITH 6H 1800: for railcar applications EU Stage IIIB, EU Stage IIIA compliant, EPA Tier 3 compliant," https://www.mtu-solutions.com/content/dam/mtu/products/rail/3235271_MTU_spec_Rail_PowerPack1800.pdf/_jcr_content/renditions/original./3235271_MTU_spec_Rail_PowerPack1800.pdf, June 19, 2025.
- [14] D. Wintergoller, A. Dafis, M. Ebert, H. Rottengruber: Sustainable propulsion alternative for train transport: hydrogen retrofit of an existing diesel engine, Chair energy conversion system for mobile applications, Otto-von-Guericke-University Magdeburg, Germany. In: conference paper, 11th International Conference on Modeling and Diagnostics for Advanced Engine Systems (COMODIA 2025), Chiba, Japan, December 2025

Defossilisation Paths of the Large Engine Segment

Jens Olaf Stein, Kurt Schratlbauer, Josef Frank, Roland Fortenbach

Abstract

The fulfilment of Paris Climate Agreement of 2015 calls for a rapid transition to an overall climate-neutral energy system, which has to entail significant changes in the buildings, transport and industry sectors over the next about 25 years. In all these sectors, carbon-neutral alternatives will replace the current energy sources that are still predominantly based on carbon.

For effective environmental protection all powertrain types are needed. A technology-agnostic approach is therefore one of the most important aspects if we want to meet our climate goals. In order to succeed in our efforts, we have to rely on the contributions from optimized internal combustion engines, fuel cells and electric drives. Accordingly, Bosch is constantly working on technical solutions to support all technology paths.

The focus in this paper is given to the large engine segment which contributes by approx. 6 to 7% to the global CO₂-emissions. Beside the current introduction of drop-in fuels alternative fuels are selected to achieve a CO₂ neutral operation of the ICE in future.

While drop-in fuels require certain precautions using the existing FIE (fuel injection equipment), the alternative fuels need new combustion systems hence injection/admission systems which are contributing significantly towards an efficient low emission combustion even under dynamic operation. The variety of potential combustion processes in combination with the fuel properties needs a sophisticated injection system modularity supporting best performance and emission while minimizing time to market.

The Bosch solutions for large engines are based on the huge development and product experience with low viscosity fuels for premixed and diffusive combustion from the entire mobility segment range. The holistic approach considering the air/fuel mixture formation of a PFI (Port Fuel Injection) combustion system is shown in this paper

Kurzfassung

Die Erfüllung des Pariser Klimaabkommens von 2015 erfordert einen raschen Übergang zu einem insgesamt klimaneutralen Energiesystem, der in den nächsten rund 25 Jahren erhebliche Veränderungen in den Bereichen Gebäude, Verkehr und Industrie mit sich bringen muss. In all diesen Sektoren werden CO₂-neutrale Alternativen die derzeitigen überwiegend auf Kohlenstoff basierenden Energiequellen ersetzen.

Für einen wirksamen Umweltschutz sind alle Antriebsarten erforderlich. Ein technologieunabhängiger Ansatz ist daher erforderlich, wenn wir unsere Klimaziele erreichen

wollen. Für einen erfolgreichen Klimaschutz sind optimierte Verbrennungsmotoren, Brennstoffzellen und Elektroantriebe gleichermaßen notwendig. Dementsprechend arbeitet Bosch kontinuierlich an technischen Lösungen zur Unterstützung aller Technologiefade.

Der Schwerpunkt dieses Papers liegt auf dem Großmotorensegment, welches ca. 6 bis 7 % zum globalen CO₂-Ausstoß beiträgt. Neben der aktuellen Einführung von Drop-in-Kraftstoffen werden zukünftig alternative Kraftstoffe einen CO₂-neutralen Betrieb des Verbrennungsmotors ermöglichen.

Während Drop-in-Kraftstoffe mit den im Feld befindlichen Motoren und Einspritzsystemen betrieben werden können, benötigen die alternativen Kraftstoffe neue Brennverfahren und Einspritz- bzw. Einblassysteme, die auch im dynamischen Betrieb eine effiziente und emissionsarme Verbrennung sicherstellen. Die große Anzahl der möglichen Verbrennungsprozesse in Kombination mit den verschiedenen Kraftstoffeigenschaften erfordert eine durchdachte Modularität der Einspritzsysteme, welche die Darstellung höchster Leistungen und niedrigster Emissionen unterstützt und gleichzeitig schnell verfügbar ist.

Die Bosch-Lösungen für Großmotoren basieren auf jahrzehntelanger Entwicklungs- und Felderfahrung mit niedrigviskosen Kraftstoffen aus dem gesamten Mobilitätssegment. Der ganzheitliche Ansatz zur Optimierung der Gemischbildung eines PFI (Saugrohreinjection) Brennverfahrens wird in diesem Paper dargestellt.

1. Introduction

The demand for freight transport continues to increase significantly until 2050 [1]. This forecast underlines the urgent need for environmentally friendly powertrains. Thus, every type of powertrain is required to contribute to a significant reduction of CO₂. To identify the best technical solution for each application and ensure that robust, market-compliant and affordable technologies are quickly available on the markets, a technology-neutral approach is required. Accordingly, Bosch is constantly working on technical solution to support all technology paths [2,3,4,5].

For the large engines the focus is given on the drop-in fuels using the existing technologies and infrastructure hence immediately effective in the field. Additionally, in the next step the use of alternative fuels like hydrogen, methanol and ammonia is foreseen to achieve climate neutrality. In contrast to the backward compatible drop-in fuels, the alternative fuels require new combustion respectively injection technologies [6] and an appropriate infrastructure build-up, which affects time to market (TTM).

Figure 1 depicts an overview about the world-wide legislations, incentives and activities that target towards the decarbonization. The International Marine Organization (IMO) has defined short-term, mid-term and long-term measures to reach the greenhouse gas (GHG) targets for 2030 and 2050 considering the international shipping. In the EU, the Green Deal is the central strategy for the transition to climate neutrality in 2050. In the US, beyond other measures, the Inflation Reduction Act of 2022 (IRA) is the most significant climate legislation in history. Accordingly, in the upcoming years

many companies have announced or have started technology demonstrators to evaluate the technologies. Depending on segment, use case and region, the decisions are expected towards 2030.

In parallel the transition of the infrastructure is initiated. The progress in infrastructure build-up has a significant impact on the ramp-up and industrialization of the new technologies.

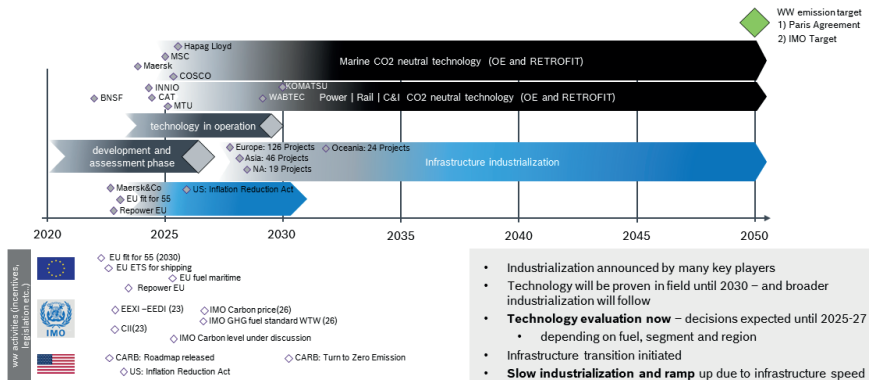


Figure 1: Transformation Timeline and Activities [7, ..., 20]

2. Paths, Technologies and Solutions

Due to its excellent suitability considering robustness and performance, the diesel engine is well established in the large-engine segment. As the diesel engine was well optimized during the last few decades, further improvement of the mechanical drivetrain (e.g., friction reduction) or thermodynamic optimization (e.g., combustion process, thermo-management, ...) would not lead to the required CO₂ reduction alone. A systemic approach considering a combination of different sub-propulsion and energy systems bears further potential [21,22]. The fuel composition can have a rather strong impact on CO₂ emissions; to this aim, either the carbon-to-hydrogen ratio can be reduced or the carbon content can be eliminated entirely. Another effective path to be mentioned, but not covered in this paper, is the carbon capture technology that supports CO₂ neutrality through a circular-economy approach.

With an initial focus on the potential of the fuels, an effective and fast option is to introduce bio-fuels or e-fuels which can replace the fossil-based diesel at least partially (drop-in). For backward-compatibility and a fast implementation, conformity with the diesel specifications (e.g., EN 590, EN 16734, EN 16709, EN 14214 and EN 15940) is mandatory.

Typical drop-in fuels are paraffinic diesel, hydrogenated vegetable oil (HVO) and fatty-acid methyl ester (FAME). For FAME, the aging behavior is heavily dependent on the temperature and fresh-air exchange. The induction period (IP) indicates the aging stability of a fuel. According to EN 14214, a minimum value of 8h is recommended to avert

the start of the critical aging process under field conditions which can be described by the total acid number (TAN). Based on its automotive experience, Bosch recommends an IP value of >20 to ensure a sufficient robustness against unfavorable field conditions [6].

Another option for reducing CO₂ is liquid synthetic fuels from renewable energy sources. The focus here is on “drop-in renewable fuels”, i.e., the fuel mixture must conform to the EN 228 (gasoline) or EN 590 (diesel) standard. Such fuels can then be used directly in existing vehicles and off-highway applications. The CO₂ improvement varies depending on the production method and the admixture components. It can amount to 100 % if the CO₂ emissions of the vehicle running on e-fuels are fully offset by the CO₂ captured from the atmosphere for the production based on renewable electricity. In concrete terms, this means that R33, for example, which is already available today at certain filling stations and is approved for all diesel engines, yields an immediate CO₂ reduction of 20% compared to conventional fuel [6]. While still complying with the EN 590 specifications, a further potential up to 75% e-blend (R75) exists [27].

Alternative fuels represent another option that requires new engine and FIE technologies and an appropriate infrastructure including production capacities. The alternative fuels with the biggest potential are methane (CH₄), hydrogen (H₂), methanol (CH₃OH) and ammonia (NH₃). As regards certain combustion and emission challenges, the use of ammonia requires more sophisticated measures [23,24]. Natural gas (NG) containing methane as its main component has already been introduced successfully in the market; hence the use of methane as a fuel is comparable to the burning of natural gas (e.g., LNG). Measures to reduce more effectively the methane slip are under development [25].

Figure 2 gives an overview about the potential decarbonization paths and technologies. It includes the drop-in and alternative fuel paths focusing on new builds and retrofits for the existing fleet in the field.

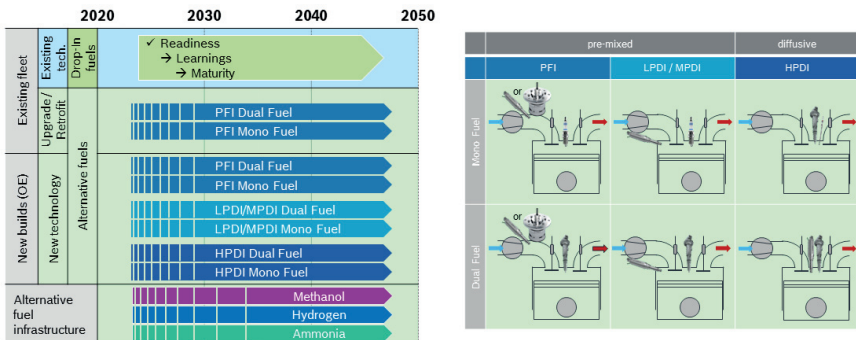


Figure 2: Decarbonization Paths and Technologies

The by far fastest approach is the implementation of drop-in fuels. The readiness is achieved, and the drop-in fuels are penetrating the market already depending on local availability. Especially, the critical aging behavior of FAME requires a field learning via

certain monitoring to verify locally and use case specifically the capability depending on world-wide fuel qualities and unavoidable mixing effects. Based on the experience from the automotive market after the learning phase and the introduction of appropriate measures including adapted handling, a robust and mature phase is expected. This makes the drop-in fuel path very attractive limited by the production capacity hence local availability mainly.

In comparison to the drop-in fuels the alternative fuels (hydrogen, methanol, ammonia) need an adapted (retrofit) or even partly new engine layout considering the combustion and injection system [6]. Due to the critical fuel properties the safety concepts and measures might be redesigned as well.

The different potential technologies for the alternative fuels are shown in the right part of Figure 2. The schematical drawings are indicating the principal position of the injectors/valves and ignition devices but don't make a claim to be complete (e.g., pre-chamber). The selection of the technology depends on the fuel type, (local) infrastructure, segment, use-case, capital expenditure (CAPEX) versus operative expenditure (OPEX), performance and finally TTM.

In general, the pre-mixed combustion systems are characterized by an excellent benefit/effort ratio and a certain compromise in performance. The port-fuel injection (PFI) has a significant advantage with respect to the TTM because it needs an adaptation in the intake port without design changes at the cylinder head. Thus, it is rather the only choice for a retrofit solution. Especially, in case of hydrogen certain measures are needed to avoid backfiring and the power is limited due to the suppression of air by the hydrogen in the inlet manifold.

The premixed approach with direct injection (LPDI / MPDI) needs more efforts (e.g., integration of the injector into the cylinder head) but avoids backfiring while enabling higher power levels. Hence, it might be a very good choice for a performance powertrain focusing on CAPEX and TTM.

A further performance improvement might be achievable with a diffusive combustion and high-pressure direct injection (HPDI). Whether the higher complexity is cost-effective depends on the CAPEX versus OPEX consideration mainly. In general, the more the focus is given to the OPEX the faster the additional efforts for HPDI are redeemable. Thus, at least for the high and medium speed engines a deeper analysis of the potentials of premixed- and diffusive-combustion is required to decide segment and use-case wise.

Considering the mobile applications that operate in different (world-wide) locations (e.g., maritime ocean going), a dual-fuel approach offers the required robustness against (local) lags in alternative fuel infrastructure during the transition phase while system inherently offering an excellent ignition source (pilot injection) even for a diffusive combustion. For stationary applications (e.g., gensets) and locally operating mobile applications (e.g., maritime costal or point to point) a single fuel concept might be the best choice. It requires a sophisticated ignition device with high ignition energy (e.g., pre-chamber) and an optimized air-fuel mixture preparation in combination with a precise ignition control or an ignition improver.

In **Figure 3** the Bosch solutions for the different decarbonization paths are shown. The drop-in fuel path (light blue) is covered by the entire diesel FIE portfolio which is ready for the use of specified bio- and paraffinic diesel confirmed by the Bosch internal validation [6]. Depending on the different applications and use cases, the field experience to be gathered in the future must confirm that the fuel-quality requirements are met in the global markets. Potentially, a closed loop functionality in the ECU enabled by onboard data evaluation (e.g., Smart injector [28]) can contribute to a better adaptation to the actual burned fuel characteristics.

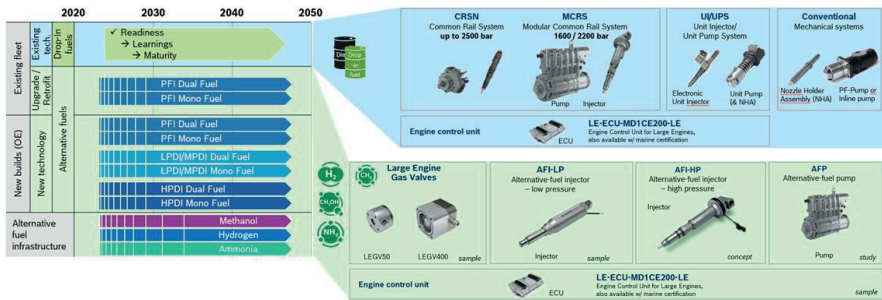


Figure 3: Decarbonization Paths and Solutions

For the alternative fuel paths (light green) the Bosch portfolio has solutions for all three fuels in focus (hydrogen, methanol, ammonia) supporting premixed and diffusive combustion.

For the admission of gas into the intake manifold the LEGV (Large Engine Gas Valve) is the appropriate product already in series for natural gas (NG). It admits the gas sequentially close upfront the intake valves and is ready for the use with hydrogen and ammonia. Several hydrogen applications are running with the LEGV and have confirmed the valve's excellent performance. These are mono-fuel as well as dual-fuel engines within the high-speed and medium-speed ranges.

With minor modifications the LEGV can also be operated with ammonia. Initial observations from appropriate engine tests are available, and further programs to support the potential investigations have been started. The Bosch LEGV has reached a high maturity level. Especially the low leakage rate, the small cycle-to-cycle variations and the low wear rate make the LEGV highly attractive. It is available for high-speed and medium-speed engines and comes in different design versions for genset and marine applications.

The alternative fuel injector-low pressure (AFI-LP) platform for high and medium speed engines is based on the comprehensive experience with gasoline MPI (EV) and DI (HDEV) injection, with gas (NGI and LEGV) admission and with diesel injection (CRS). The injector modularity fully covers liquified and gaseous alternative fuels for LPDI/MPDI and complements the PFI portfolio for liquids (methanol).

The injector has an outward opening needle, and the direct needle drive ensures precise injection with further potential for needle and combustion control. The design protects the sensitive areas against unfavorable fuel properties with respect to wear and surface damages. The functionality is confirmed by several engine tests running already. The engine-specific adaptation will be explained more below with Figure 5.

For diffusive combustion with high pressure injection (HPDI) of liquified fuels (methanol and ammonia) the alternative fuel injector – high pressure (AFI-HP) is foreseen. It is controlled by diesel or oil and comparable to the AFI-LP, it has a robust design to protect the sensitive areas against unfavorable fuel properties.

Currently, the priority is given to the premixed combustion to enable a fast TTM from FIE point of view for both, retrofit and new builds, with the LEGV and AFI-LP. To control the injectors and valves including specific engine functionalities for mono and dual-fuel applications, a software update is foreseen for the series proven ECU (MD1CE200-LE). Considering the voice of the customers with respect to a pump for low viscosity fuels (AFP), a concept competition is ongoing to evaluate working and design principles.

The combustion and FIE relevant properties of current and future fuels are depicted in **Figure 4**. Considering the ignition quality respectively the knock resistance, the alternative fuels are excellent Otto-cycle fuels; hence for a Diesel-cycle an ignition device is needed. Hydrogen has a very high flame velocity by an order of magnitude higher compared to the others. The properties of ammonia with respect to flame velocity and minimum ignition energy indicate the challenges to achieve a proper combustion process.

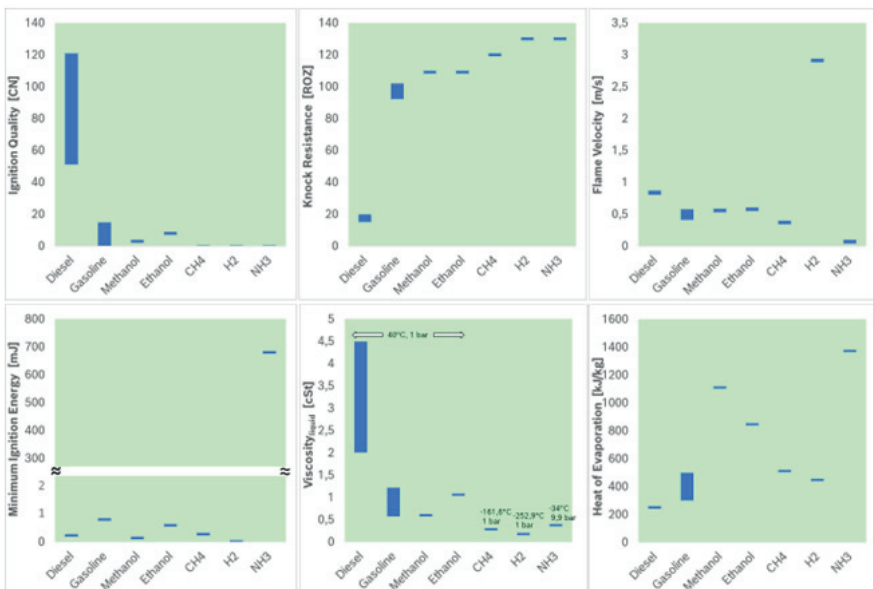


Figure 4: Comparison of Fuel Properties

Another important information of Figure 4 gives the comparison of the liquid alcoholic fuels (methanol and ethanol) with gasoline. It is recognizable that the values of the combustion (e.g., knock resistance, flame velocity, minimum ignition energy) and FIE (e.g., viscosity) relevant parameters are on a comparable level or at least in the same order of magnitude. Except the heat of evaporation which is about 2 to 3.5 times above these of the gasoline range but even exceeded (up to factor 4.5) by the value of ammonia.

In conclusion, the comparability between gasoline and methanol (ethanol) properties allows the transfer of the huge field experience with the gasoline FIE including the optimization of the air/fuel mixture formation towards the large engine segment. Beside the design critical parameters, the entire tool chain (e.g., CFD simulation, visual investigation, ...) for the spray targeting can be used to arrive very fast and effectively at an optimized engine specific spray layout.

3. Holistic Approach towards Highest Engine Performance

As an example, in **Figure 5**, the holistic development approach of the injector (AFI-LP) is explained. The world-wide Bosch experience in the product design as well in the optimization of the engine specific air/fuel mixture formation has been incorporated successfully. The field experience allows to select the important features early in the concept phase to define the best layout. The verified and sophisticated development tools, optimized by multiple projects with different engines are ready for the adaptation of the spray layout via the spray forming cap (SFC). Individually and flexible, the SFC allows a precise adaptation of the injection spray layout by e.g., number of holes and selectable geometries.

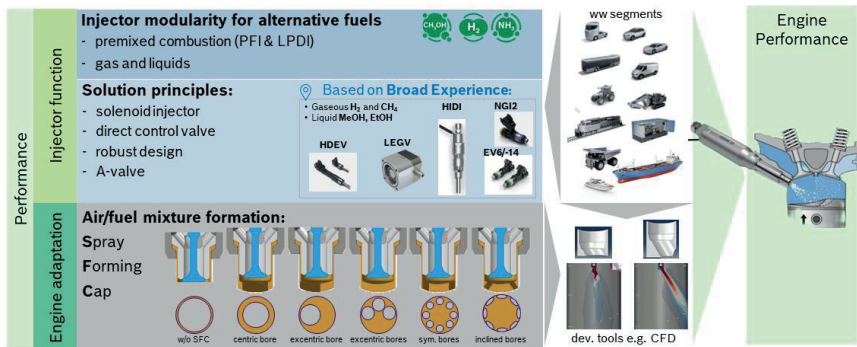


Figure 5: AFI-LP: Holistic Approach towards Highest Engine Performance

This holistic Bosch approach ensures products with highest performance and robustness and supports our customers in the optimization of the combustion system considering the specific engine demands while fostering a fast TTM. In addition, the comprehension of the cause-effect relationships of the entire combustion system in combination with the huge experience across segments and markets allows to adapt the injector design very fast towards the requirements which will be completed by the running engine investigations finally.

Summary and Conclusion

Large engines will continue to be operated in the next few decades decarbonized via low/neutral or zero-carbon fuels. The introduction of drop-in fuels speeds up the decarbonization and yields an immediate effect. New builds and retrofitting existing large engines, to run them on alternative fuels (hydrogen, methanol, ammonia) are further paths to reduce greenhouse gas emissions in large powertrains.

According to region, cost, segment and use-case the appropriate fuel type will be selected. Demonstrators are in operation with growing numbers in the next years but the ramp-up is highly dependent on the infrastructure build-up.

PFI is highly attractive considering the integration effort and hence the retrofit capability allowing a dual-fuel approach, which even makes engines robust against a potential non-availability of the alternative fuels during the transition phase. LPDI/MPDI offer further advantages in terms of power density and backfire suppression (H₂). HPDI leads to a significant increase of complexity/efforts and is a challenge for the CAPEX versus OPEX considerations.

The Bosch portfolio supports the defossilisation paths by a modular platform approach based on the huge experience in product design and applications, available from the large engine and the entire mobility segments. The development priorities are set by market trends and customer requests within the platform. Based on the huge Bosch experience from the entire automotive segments and the use of verified development tools a solution oriented and effective development approach with fast TTM is supported.

References

- [1] Stefan Hartung, Powertrains for the future – How we will meet our climate goals through technology neutrality. 42 International Vienna Engine Symposium 29/30 April 2021
- [2] Dr. Andreas Kufferath; Dipl.-Ing. Dirk Naber; Dr. Giovanni Cornetti; Dr. Roman Grzeszik; Dr. Michael Krüger; Robert Bosch GmbH, Stuttgart, Germany; Dr. Maria Rosaria Gaballo; Bosch S.p.A., Bari, Italy: Development of combustion process and operating strategy for a low-emission hydrogen engine. 31st Aachen Colloquium Sustainable Mobility 2022
- [3] FVV Research Project No. 1407: Definition and requirements of ›zero-impact emissions‹ from an air quality perspective. Conducted at Graz University of Technology with the support of the consulting companies FVT, Graz, and Aviso, Aachen, 31 Mar. 2022
- [4] A. Kufferath et al., H2 ICE Powertrains for future on-road Mobility, 42nd International Vienna Motor Symposium, 2021
- [5] Christoph Kendlbacher, Kurt Schrattbauer, René Schimon; Robert Bosch AG – Business Unit Large Engines Institute of Internal Combustion Engines and

Thermodynamics, Graz University of Technology: 18th Symposium "Sustainable Mobility, Transport and Power Generation", Graz, 2021

- [6] Jens Olaf Stein, Christoph Kendlbacher, Kurt Schratlbauer, René Schimon; Robert Bosch AG, Andreas Kufferath Robert Bosch GmbH: "Fuel injection and admission systems for liquid and gaseous bio- and e-based fuels for large engines", CIMAC Congress, Busan, 2023
- [7] MAERSK 1st. Ship MeOH mid 2023: Maersk Orders First Methanol-Fueled Containership (maritime-executive.com)
- [8] Hapag Lloyd: syn. LNG (e-fuels) Hapag-Lloyd on the path to CO2 neutrality - Hapag-Lloyd
- [9] MSC: 2022-LNG capable vessel, 2025 1st. Ammonia ready vessel source: https://www.msc.com/media/files/sustainability/reports/msc_sustainability_report_2021.pdf
- [10] COSCO MeOH Container 2026-2028: COSCO splashes \$2.87 bln on twelve methanol-powered 24,000 TEU mammoths - Offshore Energy (offshore-energy.biz)
- [11] MTU: HVO 2023 source: Sustainable fuels: E-Diesel and HVO make mtu engines (almost) climate-neutral (mtu-solutions.com)
- [12] MTU: 100% H2 full production 2026. first demo duisport 2024. source: How hydrogen combustion engines are aiding the green energy transition (mtu-solutions.com). H2 conversion- kits 2023
- [13] MTU: MeOH 2026 launch source: Methanol engine, fuel cells, hybrid systems - Rolls-Royce presents new mtu propulsion solutions for ships at SMM (mtu-solutions.com)
- [14] BNSF: BNSF and Wabtec commence battery-electric locomotive pilot test in California
- [15] Wabtec: Wabtec 2023 Investor Presentation (wabteccorp.com)
- [16] CAT: <https://www.caterpillar.com/en/news/corporate-press-releases/h/caterpillar-expand-hydrogen-powered-solutions.html>
- [17] INNIO: <https://www.innio.com/en/solutions/power-generation/hydrogen-fired-power-generation>
- [18] Komatsu – Mining: Komatsu and Cummins to collaborate on advancing development of zero emissions mining haul trucks | Newsroom | Komatsu Ltd.
- [19] Infrastructure projects: Hydrogen-Insights-2021.pdf (hydrogencouncil.com)

- [20] Legislation, incentives,...: <https://commission.europa.eu/> ; <https://www.epa.gov/green-power-markets/inflation-reduction-act>
- [21] DI Dr. Bernhard Thaler; DI Dr. Michael Wohlthán; Dr.-Ing. Nicole Wermuth; DI Dr. Gerhard Pirker; Prof. Dr. Andreas Wimmer; LEC GmbH, TU Graz, Austria: Optimization of the HyMethShip system using the simulation platform LEC EN-ERSim, 7th Large Engine Symposium, Rostock, 2022
- [22] Stefan Goranov; Dr. Maciej Bendyk; Dr. Markus Wenig; Wojciech Wroblewski; Amodio Palma; Winterthur Gas & Diesel AG: The low-speed two-stroke engine in a hybrid setup: The engine designer's approach to system integration, 7th Large Engine Symposium, Rostock, 2022
- [23] Dr. Daniel Peitz; Dr. Adrian Marberger; Dr. Dominik Gschwend; HUG Engineering AG; Germany: Exhaust gas aftertreatment for future large engine fuels, 7th Large Engine Symposium, Rostock, 2022
- [24] Dr. Maria Brandmair, Dr. Silvia Alcove Clave, Dr. Veselina Georgieva, Dr. Joseph Fedeyko, Dr. Joseph McCarney; Johnson Matthey; UK: Ammonia as a Fuel – the role for catalytic components, 7th Large Engine Symposium, Rostock, 2022
- [25] Mathias Moser, Hans-Philipp Walther, Franz Koschany, Dorthe Jacobsen, MAN Energy Solutions: “Technologies to reduce methane slip of dual fuel engines” CIMAC Congress, Busan, 2023
- [26] Matthias Auer, Christian Kunkel, Florian Eppler, Thomas Klaua, Ingo Wilke, Alexander Knäfl, MAN Energy Solutions: “Fourstroke engine solutions for low-carbon and carbon-free fuels”, CIMAC Congress, Busan, 2023
- [27] Dr. Sandro Gaíl; Aramco Overseas Company and Dr. Andreas Kufferath; David Nuccio; Robert Bosch GmbH / Bosch Italy: A proactive approach to “drop in” Diesel fuel development based on a paraffinic diesel blend, E-Fuel World Summit - Online, 2022
- [28] Thibault Henrion, Florian Moesenbichler, Martin Bernhaupt, Robert Wrede, Jens Olaf Stein, Robert Bosch Robert Bosch, Powertrain Solutions, Large Engines, Christoph Redtenbacher, Maximilian Malin, LEC GmbH: “Injection rate control strategy with Bosch Smart CR Injector for optimized injection performance”, CIMAC Congress, Busan, 2023

Ammonia in Sustainable Large Engine Applications

Nicole Wermuth

Kurzfassung

Ammoniak stellt einen vielversprechenden, CO₂-freien Kraftstoff für nachhaltige Großmotoranwendungen dar, insbesondere in der Schifffahrt, im Schienenverkehr und in der stationären Energieerzeugung. Trotz klarer Vorteile bei Speicherung, Transport und bestehender Infrastruktur weist Ammoniak im Vergleich zu konventionellen Kraftstoffen ungünstige Verbrennungseigenschaften auf, wie eine geringe Reaktivität, hohe Zündenergie und niedrige Flammgeschwindigkeit.

Das Large Engines Competence Center in Graz (Österreich) (LEC) verfolgt daher einen ganzheitlichen Forschungsansatz, der fundamentale Versuchsstände, detaillierte experimentelle Untersuchungen und simulationsgestützte Methoden kombiniert. Ziel ist es, die relevanten Prozesse – von Einspritzung und Gemischbildung bis hin zur Verbrennung – umfassend zu verstehen. Aufbauend darauf werden verschiedene Brennverfahren für unterschiedliche Anwendungen entwickelt.

Diese Konzepte werden auf Einzylinder-Forschungsmotoren umfassend validiert, um Wirkungsgrad, Leistungsfähigkeit und Emissionen zu bewerten sowie Betriebsgrenzen zu identifizieren. Ergänzend wird die Abgasnachbehandlung untersucht, um Emissionen wie unverbranntes Ammoniak und Stickoxide zu minimieren. Insgesamt zeigt sich, dass Ammoniak ein vielversprechender Energieträger ist, dessen Potenzial durch gezielte Weiterentwicklung erschlossen werden kann.

1. Introduction

Internal combustion engines (ICEs) remain essential in sectors such as power generation, maritime and rail transport, where electrification is difficult and high energy-density fuels are required. Achieving climate neutrality therefore depends on replacing fossil fuels with renewable, carbon-neutral energy carriers rather than abandoning engine technologies altogether. This transition is urgent due to global climate targets, including limiting warming to 1.5 °C, while energy demand continues to rise.

Renewable sources like wind and solar are inherently intermittent, making large-scale energy storage and transport necessary. Chemical energy carriers (e-fuels) provide a solution by enabling long-term storage and global distribution. Among these, hydrogen-based fuels—particularly ammonia—are gaining attention due to favorable storage properties, existing infrastructure, and suitability as both a fuel and hydrogen carrier. However, its application in ICEs is considered challenging. This article presents an overview of ongoing research at the Large Engines Competence Center on the way to industrial application of ammonia.

2. Challenges ammonia

Despite its advantages, the use of ammonia in internal combustion engines presents notable technical challenges. Its combustion characteristics—particularly low reactivity, high ignition temperature, and low laminar flame speed—are less favorable than those of conventional fuels. For practical engine applications, it is essential that ignition and combustion can be reliably controlled and that flame propagation is sufficiently fast to ensure high efficiency. In this regard, ammonia falls short, especially due to its low laminar flame speed and high minimum ignition energy compared to other e-fuels.

To address these limitations, blending ammonia with more reactive fuels such as hydrogen or diesel has been proposed. At the same time, ammonia offers a significant advantage in terms of knock resistance, with a research octane number exceeding 130 - higher than methanol or methane. The other carbon-free e-fuel hydrogen exhibits a similarly high octane rating but its use is associated with increased risks of pre-ignition and backfiring due to its low ignition energy and wide flammability limits.

A key issue in ammonia combustion is pollutant formation, which is strongly influenced by fuel-bound nitrogen. In addition to nitrogen oxides (NO_x), significant emissions of unburned ammonia (NH₃) and nitrous oxide (N₂O) - a potent greenhouse gas - can occur.

Considering production, handling, and combustion aspects, ammonia emerges as a viable and potentially attractive alternative to carbon-based fuels and even hydrogen, particularly for cost-sensitive applications such as power generation and maritime transport—provided that combustion system design effectively compensates for its inherent limitations (Figure 1).

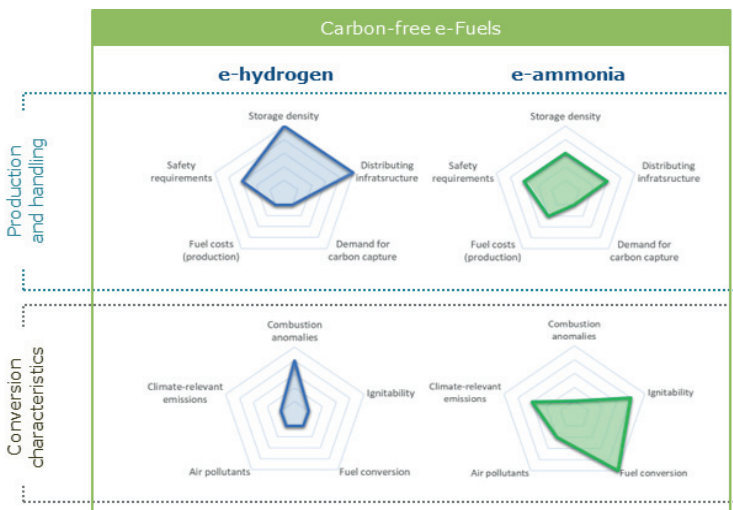


Figure 1: Initial assessment of carbon-free e-fuels with regard to production, handling and conversion

3. Ammonia research at the Large Engines Competence Center

LEC developed a comprehensive methodology for the optical investigation of NH_3 and $\text{NH}_3\text{-H}_2$ combustion in large-engine applications. The approach aims to deepen the understanding of ammonia combustion across a wide range of conditions and to provide a robust experimental database for improving and validating simulation models. Ultimately, this supports the efficient adoption of NH_3 as a primary fuel for large-bore engines.

A comprehensive flame visualization concept is applied for the investigation of pre-mixed, spark-ignition combustion, covering both fundamental parameters - laminar burning velocity (LBV) and turbulent burning velocity (TBV) - and engine-relevant processes such as turbulent jet ignition (TJI). These are studied under idealized as well as realistic engine-like conditions using a series of complementary optical test rigs (Figure 2).

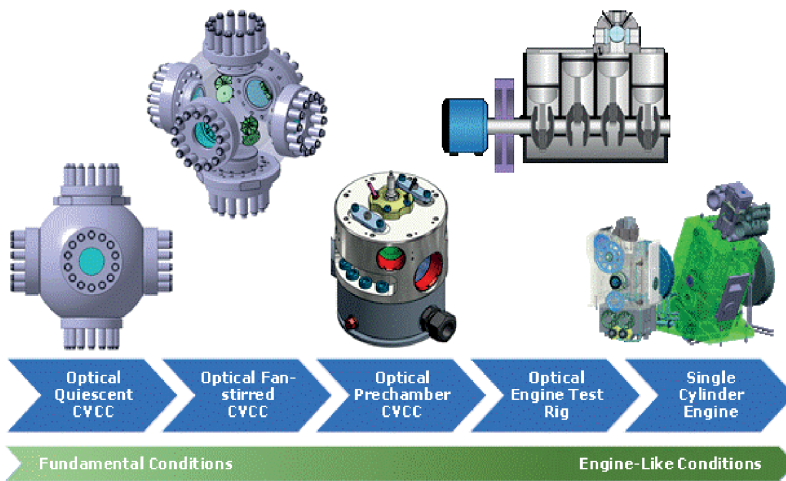


Figure 2: Overview of research test rigs visualizing premixed ammonia combustion under various laminar, turbulent and engine-like test conditions

Several optical test rigs are employed. A quiescent constant volume combustion chamber (CVCC) is used to study laminar flames and determine LBV, providing essential reference data for simulations. A fan-stirred CVCC generates controlled turbulence to investigate TBV and flame-turbulence interactions under well-defined conditions. An optical prechamber CVCC enables detailed analysis of TJI, including flame development in the prechamber and jet-induced ignition in the main chamber. Engine-like conditions are replicated in an optical engine test rig with high optical access and flexible control of thermodynamic parameters. Finally, single-cylinder engines provide application-oriented data under real operating conditions, though with limited optical accessibility.

To characterize combustion processes, advanced optical measurement techniques are applied. High-speed schlieren imaging visualizes density gradients and flame propagation, while chemiluminescence imaging detects reactive zones via emissions from excited radicals such as OH^* . Their combination allows precise analysis of ignition and flame dynamics, particularly for TJI. Additionally, particle image velocimetry (PIV) provides detailed flow field data, essential for understanding turbulence and validating numerical models. Together, these methods enable a detailed and integrated analysis of NH_3 combustion.

Initial laminar burning velocity (LBV) tests were conducted using a rapid compression machine (RCM) adapted as a constant volume combustion chamber by fixing the piston. High-speed schlieren imaging enabled detailed visualization of outwardly propagating spherical flames under near-ambient conditions. These experiments confirmed the low reactivity of NH_3 , while providing unique optical insights into flame behavior that are not accessible with conventional measurement techniques (Figure 3).

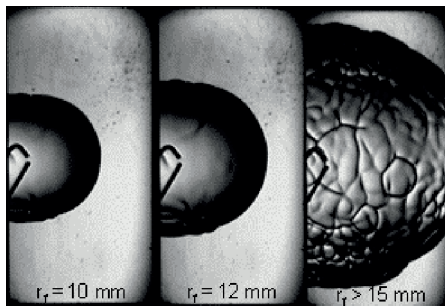


Figure 3: Visualization of laminar flame front propagation of ammonia in a rapid compression machine

The results show that NH_3 and NH_3/H_2 blend flames develop thermodiffusive instabilities as they grow. Beyond a critical radius, the flame front becomes increasingly wrinkled, significantly affecting flame surface area and propagation speed. These instabilities arise from unequal heat and mass diffusion (Lewis number < 1) and are intensified by higher pressure, leaner mixtures, and increased NH_3 cracking ratios (higher H_2 content).

Such instabilities complicate LBV determination, as stretched and unstable flames cannot be reliably extrapolated to unstretched conditions. Overall, the valid range of LBV measurements is limited by the onset of flame instabilities, which strongly depend on operating conditions.

In the same experimental set-up under quiescent conditions Pirker et al.³ found that, under ambient temperature and pressure conditions, hydrogen must be added in

³ G. Pirker, M. Klawitter, A. Ramachandran, C. Gößnitzer, A. Tilz, A. Wimmer, Characterization of future fuels using an optically accessible rapid compression machine, presented at 30th CIMAC World Congress 2023: Meeting the Future of Combustion Engines, Busan, June, 2023

roughly equal proportion to ammonia to achieve laminar flame speeds comparable to natural gas.

In a different set-up under turbulent conditions, however, a very different situation presented itself. It was shown that NH_3 and partially cracked NH_3 (crNH_3)/air mixtures exhibit a significantly stronger response to turbulence than CH_4 /air flames, not only under fundamental conditions but also in engine-like environments. This enhanced turbulence interaction plays a key role in increasing the overall flame propagation speed under realistic operating conditions (Figure 4).

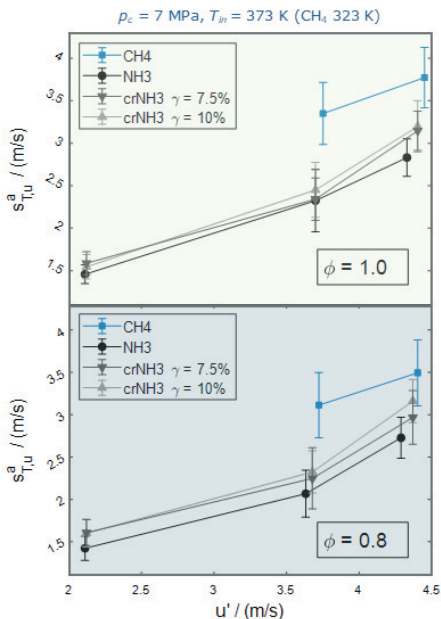


Figure 4: Turbulent flame speed as a function of turbulence intensity with ammonia / air, cracked ammonia / air and methane / air mixtures

As a result, NH_3 /air flames propagate considerably faster under high temperature, pressure, and turbulence than would be expected from laminar, near-ambient data. Partial cracking of NH_3 further improves combustion performance. Notably, even a modest cracking ratio of about 10% is sufficient for lean mixtures to achieve flame speeds comparable to CH_4 under highly turbulent conditions.

The stronger turbulence sensitivity of NH_3 -based fuels is mainly attributed to their lower effective Lewis numbers and higher Karlovitz numbers, placing combustion in the thin reaction zones regime, where turbulence–flame interactions are particularly pronounced.

4. Ammonia Combustion Concepts

A range of combustion concepts is currently being explored for ammonia-fueled internal combustion engines, broadly categorized into compression ignition (CI) and spark ignition (SI) approaches (Figure 5). Due to the unfavorable ignition characteristics of ammonia - such as high autoignition temperature, low flame speed, and high ignition energy - most experimentally validated concepts rely on a high-reactivity fuel as an ignition enhancer. Diesel is typically used in maritime applications, while hydrogen or cracked ammonia is preferred in land-based systems.

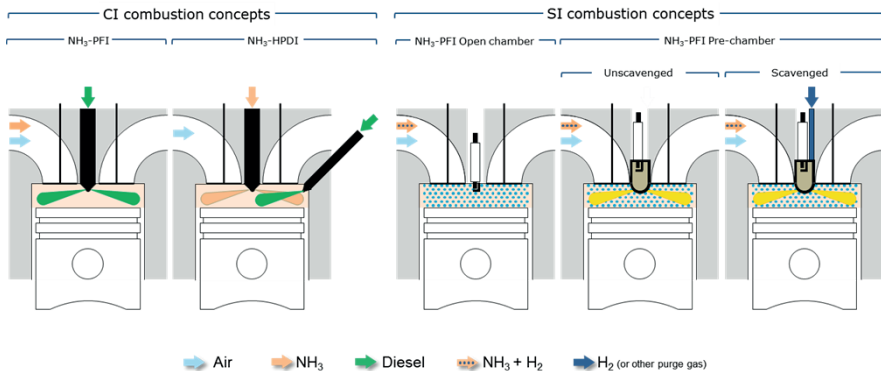


Figure 5: Combustion concepts for compression ignition engines (left) and spark ignition engines (right)

Pure compression ignition of ammonia-air mixtures is theoretically possible but impractical for high-power applications, as it would require extremely high compression ratios (above 30:1) or intake air preheating. Consequently, CI concepts are mainly implemented as dual-fuel systems combining ammonia with diesel pilot injection. These concepts differ primarily in the ammonia admission strategy. Low-pressure gaseous ammonia can be introduced via port fuel injection or by premixing upstream of the turbocharger, with diesel injected directly into the cylinder to initiate combustion, which then propagates through the ammonia-air mixture. This approach also allows conventional diesel-only operation, making it attractive for retrofit applications. Alternatively, high-pressure direct injection of liquid ammonia enables a combustion process similar to diesel engines, but requires specialized injectors and significant engine modifications due to ammonia's corrosiveness, low lubricity, and higher required flow rates. Spark ignition concepts rely on externally formed ammonia-air mixtures and include both open-chamber and pre-chamber configurations. Pre-chamber ignition systems enhance ignition stability through mixture stratification or targeted hydrogen addition, which can reduce the overall hydrogen requirement and improve system efficiency.



Figure 6: Single cylinder research engine

The whole range of combustion concepts was experimentally investigated on various medium-speed and high-speed single cylinder research engines with displacement volumes spanning from approximately 3 liters to 15 liters (Figure 6). Measurement results from two combustion concepts – one with spark ignition and one with compression ignition – both using gaseous ammonia admission in a central gas mixer (CGM) upstream the engine, are presented below (Figure 7).

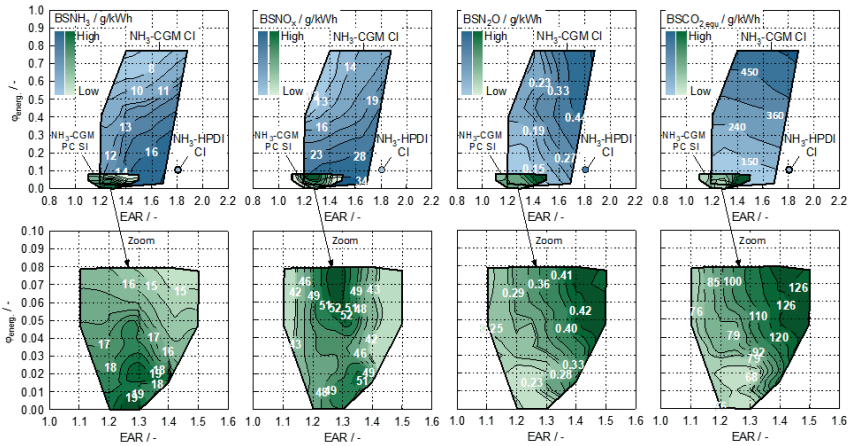


Figure 7: Comparison of NH_3 , NO_x , N_2O and CO_2 -equivalent emissions in NH_3 -CGM PC SI and NH_3 -CGM CI operation

The full-load operating map of the NH_3 -CGM compression ignition concept (top) shows that the feasible excess air ratio (EAR) depends on the diesel energetic fraction. Across a wide EAR range, the diesel share can be reduced to around 2%. High diesel fractions allow operation at high EAR similar to pure diesel, but limit low-EAR operation due to increased CO emissions. Conversely, low diesel fractions enable operation at lower EAR (down to ~ 1.2), but restrict high-EAR conditions due to reduced combustion stability and rising NH_3 emissions. Unburned NH_3 emissions originate from incomplete combustion, crevice effects, and scavenging losses. For a given diesel fraction, NH_3 emissions decrease at lower EAR due to faster flame propagation, higher temperatures, and reduced crevice losses.

NO_x emissions rise with increasing ammonia share and tend to increase further at higher EAR. In contrast, N_2O emissions are mainly governed by EAR, with the lowest levels observed at $\text{EAR} \approx 1.2$, though diesel fraction also has a secondary influence at high EAR.

The NH_3 -CGM pre-chamber spark ignition (bottom) concept shows a narrower excess air ratio window compared to e.g., hydrogen engines, reflecting ammonia's lower combustion velocity. In contrast to what could be expected from the measurements of the laminar flame speed, operation without hydrogen is possible albeit limited to $\text{EAR} 1.2 - 1.3$, while adding small amounts of hydrogen (as little as 4 %) significantly widens the operating range by compensating for low ammonia reactivity.

Unburned NH_3 emissions originate from crevices and incomplete combustion, similar to the CI concept, though reduced valve overlap slightly lowers scavenging losses. Increasing hydrogen fractions reduces NH_3 emissions by enhancing reactivity and limiting flame quenching. NO_x emissions are primarily influenced by EAR, peaking at 1.25–1.3, and are only slightly affected by hydrogen addition. N_2O emissions are also dominated by EAR, with lowest levels at low EAR, similar to the CI concept.

CO_2 -equivalent emissions of engine-out exhaust gas highlight the environmental benefit: the CI concept achieves a ~75 % reduction compared to diesel at low EAR and diesel fraction, while the PC SI concept reaches ~90 % lower values due to zero CO_2 production. However, due to the high global warming potential of N_2O , additional exhaust aftertreatment is necessary to further reduce the overall impact. First measurements of achievable conversion efficiencies of ammonia exhaust gas aftertreatment have shown that significantly higher reduction potential compared to conventional fueled engines is feasible with the appropriate catalyst and operating strategy.

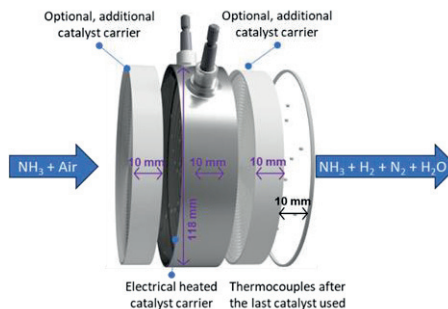


Figure 8: Cracker design based on an electrically heated catalyst carrier and additional catalyst carriers coated with a commercially available ruthenium washcoat

Not only do the engines and aftertreatment technologies need to be fully developed, but also the technology for ammonia cracking, especially if the use and handling of a second fuel are to be avoided. Recent developments in ammonia cracking focus on compact, fast-response systems suitable for integration into engines. Electrically

heated catalyst carriers and autothermal reforming concepts enable rapid start-up and flexible operation (Figure 8). These systems are designed to produce only the fraction of hydrogen required for combustion enhancement, minimizing both energy demand and system complexity. Catalyst selection and reactor design are critical, as performance depends on temperature, pressure, and reaction kinetics.

5. Conclusions

Ammonia shows strong potential as a carbon-free energy carrier, especially for large-scale and long-distance applications such as maritime transport, power generation, and other hard-to-abate sectors. Its advantages include well-established storage and transport infrastructure, ease of liquefaction, and the absence of carbon, which eliminates the need for carbon capture and offers cost benefits over carbon-based e-fuels. Although its energy density is lower than that of conventional fuels, it is significantly higher than that of hydrogen.

Despite challenges related to production efficiency, safety, combustion behavior, and emissions, recent research demonstrates that ammonia's unfavorable combustion properties—such as low flame speed and high ignition energy—can be effectively mitigated under engine-relevant turbulent conditions. Stable and knock-resistant operation is achievable even beyond the limits of conventional fuels. These findings indicate that ammonia is more suitable for engine applications than previously assumed, though further development across the value chain remains necessary (Figure 9).

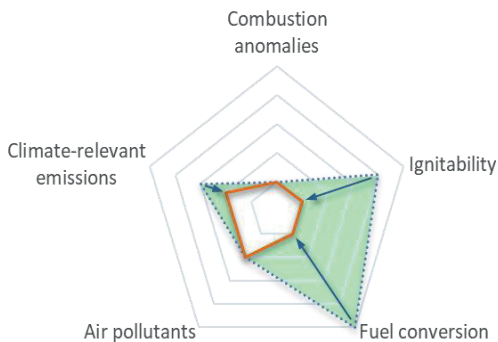


Figure 9: Advancement of ammonia conversion performance

From Challenging Fuel to Future Energy Carrier: Ammonia in Combustion Process Development

Annalena Braun, Thomas Koch, Hinrich Mohr, Torsten Baufeld, Heiko Kubach, Sascha Prehn, Sören Bernhardt

Abstract

Ammonia (NH_3) is a promising carbon-free fuel for the decarbonization of inland waterway transport. Within the CAMPFIRE alliance, a CO_2 -neutral propulsion system based on an ammonia-fuelled cracker–engine unit combined with a hybrid-electric drivetrain is being developed for an inland vessel demonstrator. This paper presents two key steps towards a robust, CO_2 -free spark-ignition combustion concept: (i) the development of a combustion strategy enabling 100 % liquid ammonia operation over the full engine load range using port fuel injection (NH_3 -PFI) and a high-energy ignition (HEI) system, and (ii) the investigation of a more advanced, high-performance combustion concept based on high-pressure ammonia direct injection with hydrogen ignition promoter (NH_3 -DI- H_2), in comparative assessment with NH_3 -PFI- H_2 , on a single-cylinder research engine representative of a future multi-cylinder marine engine.

Experiments were conducted at 1500 rpm on a modified Liebherr D966-based single-cylinder engine, using liquid ammonia PFI at 20 bar or DI at 300 bar, combined with port-injected hydrogen as ignition promoter. With the capacitive high-energy ignition system and NH_3 -PFI, stable spark-ignited combustion with a 100 % energetic ammonia share was achieved across the entire load range from 3 to 22 bar IMEP, with indicated efficiencies of up to 51 % at full load and comparable performance for both 100 % NH_3 and NH_3/H_2 mixtures. At low loads, extended spark duration was required to maintain combustion stability and to mitigate high NH_3 slip and increased N_2O formation.

In a second step, the NH_3 -PFI- H_2 and NH_3 -DI- H_2 concepts were compared at 17 bar IMEP for varying excess air ratio λ . In this comparison, the DI concept showed significantly reduced coefficient of variation of IMEP (CoV_{IMEP}) and shorter ignition delay over a wide λ range, while maintaining similar indicated efficiencies and emission levels compared to PFI. The improved robustness is attributed to stratified mixture formation, with hydrogen preferentially transported towards the spark plug and directly injected ammonia penetrating deeper into the combustion chamber. Despite slightly longer overall combustion duration due to gradual burning of ammonia-rich zones, the DI concept extended the stable operating range towards leaner conditions and higher ammonia shares, demonstrating its potential as a high-performance combustion strategy for ammonia-fueled marine engines.

Kurzfassung

Ammoniak (NH_3) wird als vielversprechender kohlenstofffreier Kraftstoff für die Dekarbonisierung der Binnenschifffahrt diskutiert. Im Rahmen der CAMPFIRE-Allianz wird

hierfür ein CO₂-neutrales Antriebskonzept auf Basis einer Ammoniak-betriebenen Cracker-Motor-Einheit in Kombination mit einem hybridelektrischen Antrieb entwickelt. In diesem Beitrag werden zwei wesentliche Entwicklungsschritte vorgestellt: (i) ein funkengezündetes ottomotorisches Brennverfahren, das mittels Hochenergiezündung einen Betrieb mit 100 % flüssigem Ammoniak über den gesamten Lastbereich ermöglicht, und (ii) die Untersuchung eines weiterentwickelten, hochperformanten Brennverfahrens mit Hochdruck-Ammoniak-Direkteinspritzung (NH₃-DI-H₂) im Vergleich zu einem konventionelleren Konzept mit Ammoniak-Saugrohreinspritzung (NH₃-PFI-H₂) auf einem Einzylinderforschungsmotor.

Die Ergebnisse zeigen, dass mit einem kapazitiven Hochenergiezündsystem ein stabiler 100%-NH₃-PFI-Betrieb über das gesamte Lastkennfeld möglich ist. Bei Volllast (22 bar IMEP) wird ein indizierter Wirkungsgrad von etwa 51 % erreicht. Bei niedrigen Lasten sind längere Zündauern erforderlich, um die Verbrennung zu stabilisieren und NH₃-Schlupf sowie N₂O-Emissionen zu begrenzen.

Der Vergleich von NH₃-PFI-H₂ und NH₃-DI-H₂ bei hohem Ammoniakanteil zeigt, dass die Direkteinspritzung – als nächster Entwicklungsschritt hin zu einem hochperformanten Ammoniak-Ottobrennverfahren – die Verbrennungsstabilität im mageren Betrieb deutlich verbessert und den stabilen Bereich zu höheren Ammoniakanteilen erweitert, bei ähnlicher Effizienz und Emissionen.

1. Introduction

Shipping plays a crucial and largely irreplaceable role in global transport, including inland waterway shipping, which provides an energy-efficient mode for regional freight logistics. Nevertheless, substantial reductions in greenhouse gas emissions are required to meet long-term climate targets [1]. Ammonia (NH₃) has emerged as a promising zero-carbon fuel due to its carbon-free local combustion, its function as a hydrogen carrier, and the existing global infrastructure from the fertilizer industry [2]. Within the German CAMPFIRE alliance, several projects address the role of green ammonia in future energy systems, covering decentralized production, storage, and use in maritime propulsion. One of these projects focuses on the development of an ammonia-fuelled propulsion system for inland waterway vessels [3, 4]. In this context, the present work investigates a propulsion concept based on an ammonia-fuelled cracker-engine-unit combined with a hybrid-electric drivetrain. The following section outlines the overall system concept that forms the basis for the combustion system development described in this paper.

2. System concept for inland waterway vessels

The propulsion system concept is based on a cracker–engine unit, in which a fraction of the supplied ammonia is decomposed into hydrogen and nitrogen in a cracking unit upstream of the engine. The hydrogen is used as an ignition promoter for a spark-ignited engine that is operated primarily on liquid ammonia. The engine is coupled to a generator and a battery system that together supply an electric propulsion motor, enabling hybrid operation tailored to the operating profile of the inland vessel “MS Odin”. Figure 1 illustrates the inland waterway vessel MS Odin and the ammonia-

based propulsion concept. The power demand profile of MS Odin is characterized by long periods of low load or engine standstill during lock operations and moderate propulsion power demands during river operation [5]. These conditions are favorable for hybrid-electric architectures and facilitate steady-state operation of the engine-cracker system at high efficiency.



Figure 1: Ammonia based propulsion concept

3. Development Methodology and Experimental Setup

3.1 Ammonia combustion

The development of suitable combustion concepts for ammonia fuelled engines requires a careful consideration of the specific fuel properties of ammonia in comparison to other energy carriers currently discussed for maritime and stationary applications. As summarized in Table 1, ammonia differs significantly from conventional gaseous and liquid fuels such as hydrogen, methane, and Diesel fuel. Its high auto-ignition temperature, narrow flammability limits in air, and low laminar flame speed pose substantial challenges for stable and efficient combustion, making combustion process development considerably more demanding [6]. In this work, the combustion concept is therefore designed to maximize the energetic ammonia share while ensuring reliable ignition and sufficient combustion rates, so that the required cracker size can be minimized.

Table 1: Fuel properties [7, 8]

Description	NH ₃	H ₂	Diesel	CH ₄ (LNG)
Lower heating value (MJ/kg)	18.6	12	42.7	46.4
Adiabatic flame temperature (°C)	1800	2110	2030	2000
Ignition temperature (°C)	630	560	> 225	470
Evaporation energy (kJ/kg)	1368	223	200-300	511
Tank size compared to Diesel fuel	2.8	4.2	1	1.3

3.2 Single-Cylinder Engine and Test Bench

All experiments were carried out on a fully instrumented single-cylinder research engine derived from a Liebherr D966 diesel engine and converted to spark-ignition operation. The engine is representative of a future six-cylinder marine engine in terms of bore, stroke and compression ratio. The main engine data are summarised in Table 2.

Table 2: Single cylinder engine data

Description	Value
Cylinder	1
Operation principle	4-stroke spark-ignited
Stroke	157 mm
Bore	135 mm
Max. Speed	1900 rpm
Displacement	2.24 L
Base Engine	Liebherr D966

For all operating points discussed here, the engine speed was fixed at 1500 rpm. The original diesel injector position in the cylinder head was replaced by a centrally located spark plug. The intake manifold can accommodate up to two injectors (ammonia and hydrogen) for PFI operation. For DI experiments, an additional high-pressure ammonia injector was mounted laterally in the cylinder head, with the spray directed towards the piston bowl center, see Figure 2. The engine was coupled to a dynamometer, enabling precise control of speed and load. In-cylinder pressure was measured with a piezoelectric pressure transducer and referenced to crank angle via an optical encoder with 0.1 °CA. For each operating point, 200 consecutive cycles were recorded for heat release analysis and for determining the indicated mean effective pressure (IMEP) and its coefficient of variation (CoV_{IMEP}). Intake and exhaust pressures as well as ammonia fuel pressure were measured by absolute piezo-resistive sensors.

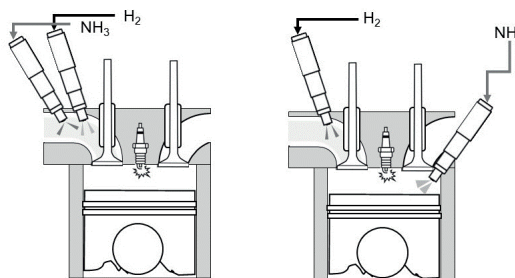


Figure 2: Engine configurations. Left: Ammonia and hydrogen in PFI configuration. Right: Ammonia direct injection DI, hydrogen PFI [9].

Fuel mass flow rates were monitored using Coriolis mass flow meters, while the intake air mass flow was measured with a rotary piston flow meter. Exhaust gas oxygen con-

centration was determined with a wide-band lambda sensor (LSU 4.9), allowing calculation of the global air–fuel ratio λ . Emissions of CO_2 , O_2 and NO_x were measured by a standard exhaust gas analyser, while NH_3 , NO_x components and N_2O were quantified using an FTIR spectrometer. Hydrogen slip in the exhaust was measured using a mass spectrometer based on electron impact ionization. Knock tendency was assessed using a pressure-based knock metric according to the Mannesmann method. The in-cylinder pressure trace was high-pass filtered in crank angle windows before and after TDC to separate high-frequency oscillations. The ratio of post-TDC to pre-TDC filtered signal intensity served as a knock factor; values close to unity indicated knock-free operation.

3.3 Fuel Supply Concepts and Injection Systems

For PFI operation, liquid ammonia was supplied from pressurised bottles at approximately 8 bar and compressed to 20 bar using a pneumatically driven compressor. A solenoid-type multifunctional Liebherr injector was used for ammonia PFI, providing a spray into the intake manifold close to the intake valve. Hydrogen was supplied from high-pressure bottles, pressure regulated and injected at 8 bar in gaseous form into the intake manifold via a dedicated PFI injector.

For high-pressure ammonia DI, a dedicated two-stage supply system was employed. Liquid ammonia from pressurised bottles was first compressed to 20 bar in a pneumatic compressor. In a second stage, nitrogen was used to pressurise a piston accumulator up to 300 bar. A check valve prevented backflow towards the low-pressure side, ensuring safe operation. The high-pressure ammonia was injected directly into the combustion chamber via a Bosch HDEV6 gasoline DI injector with a multi-hole nozzle forming a hollow-cone-like spray. The injector was mounted laterally in the cylinder head with a spray deflection of about 45° , targeting the piston bowl. For the DI measurements presented here, the rail pressure was set to 300 bar and the start of injection (SOI) to 265°CA bTDC , i.e., intake-synchronous.

3.4 Ignition System and Operating Conditions

Three ignition configurations were available in the overall development programme: a conventional inductive ignition system, a passive pre-chamber spark plug, and a capacitive high-energy ignition (HEI) system (“FlexiSpark”) with adjustable spark current and duration.

Earlier investigations with the inductive system showed that, particularly at low loads, the discharge duration is too short to sustain a stable ignition kernel under ammonia operation, which strongly limits the achievable energetic NH_3 share [10]. The passive pre-chamber spark plug is mounted in the cylinder head and cooled by the engine coolant. In contrast, the capacitive HEI system allows independent adjustment of spark current (50–300 mA) and spark duration (40–3000 μs), enabling a significantly longer and more energetic spark. This flexibility is essential for addressing the load-dependent ignition challenges associated with high ammonia shares. Consequently, all operating points with pure ammonia combustion in this study were realised with the HEI system using a standard M14 J-gap spark plug [11].

For the comparative assessment of port fuel injection ($\text{NH}_3\text{-PFI-H}_2$) and high-pressure direct injection ($\text{NH}_3\text{-DI-H}_2$), a fixed HEI setting with standard parameters was used for the DI concepts.

3.5 Operating Limits and Termination Criteria

All operating points were constrained by engine hardware and combustion stability limits. The maximum in-cylinder peak pressure was limited to 220 bar, and the exhaust gas temperature downstream of the exhaust manifold was restricted to 650 °C to avoid thermal overload of engine components and test bench equipment.

In addition to these hardware-related constraints, the operable range in terms of ammonia and hydrogen share was bounded by combustion phenomena. At high hydrogen fractions, the mixture exhibited an increased tendency to knock, which defined the upper limit of the hydrogen share for a given load and air–fuel ratio. Conversely, at high ammonia fractions and low hydrogen content, combustion stability deteriorated, leading to misfire and an increase in CoV_{IMEP} beyond acceptable limits. Within this work, these knock and misfire boundaries, together with the peak pressure and exhaust temperature limits, defined the admissible operating range for the combustion process development.

4. Results – 100% Ammonia PFI Operation with High-Energy Ignition System

4.1 Maximum energetic Ammonia share over load

Figure 3 illustrates the maximum achievable energetic ammonia share as a function of IMEP for the three ignition concepts at 1500 rpm and $\lambda \approx 1$. The energetic ammonia share was calculated from the lower heating values of ammonia and hydrogen and the corresponding injected fuel mass flows. For each load point, the ammonia share was increased stepwise until one of the defined operating limits was reached (combustion instability, misfire, knock, or hardware constraints).

With the inductive ignition system, the highest energetic NH_3 share of 89 % is reached at full load (22 bar IMEP). Towards lower loads, the maximum share decreases markedly, to about 55 % at 3 bar IMEP, because the short discharge duration no longer sustains a stable ignition kernel and combustion becomes unstable ($\text{CoV}_{\text{IMEP}} > 3\%$ and misfiring).

The passive pre-chamber spark plug extends the operable NH_3 range at medium and high loads and enables 100 % NH_3 at full load. However, at low load no stable operation with high ammonia share can be maintained, which is attributed to increased heat losses in the coolant-cooled pre-chamber and the high ignition demands of ammonia. In contrast, the capacitive high-energy ignition system allows stable operation with a 100 % energetic NH_3 share at all investigated load points between 3 and 22 bar IMEP. The stable operating window is significantly widened, particularly at low load. At 3 bar IMEP, pure ammonia can be operated reliably when appropriate spark durations are applied, which was not possible with inductive ignition or the passive pre-chamber spark plug. This highlights that both the available ignition energy and, in particular, the

adjustable spark duration are key enablers for achieving high ammonia shares and pure NH_3 operation over the entire load range.

In addition to quantifying the achievable ammonia shares, Figure 3 also illustrates the qualitative differences in how the three ignition systems respond to changing load. While the inductive system exhibits a pronounced sensitivity to load with a steep decline in maximum NH_3 share towards low IMEP, the HEI system largely decouples ammonia operability from load by providing sufficient ignition energy over the entire operating range. The passive pre-chamber plug occupies an intermediate position, improving the high-load capability but failing to ensure robust ignition at very low loads. These observations motivated the selection of the HEI system as the baseline for the subsequent combustion analysis and for the comparison of PFI and DI concepts presented in the following sections.

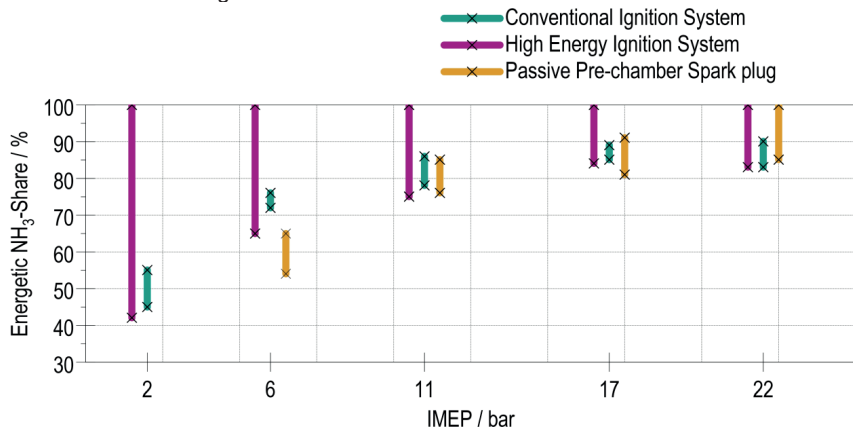


Figure 3: Achievable energetic NH_3 -share over IMEP for three ignition concepts

After demonstrating that a high-energy spark-ignition system enables pure ammonia operation over the full load range, the next step is to move from a comparatively simple, port-fuel-injected concept towards more advanced, high-performance spark-ignition combustion strategies. In analogy to the development of modern gasoline engines in automotive and racing applications, where port fuel injection was gradually replaced or complemented by direct injection, the transition from NH_3 -PFI to NH_3 -DI offers additional degrees of freedom for mixture formation and thermal management.

In particular, high-pressure direct injection of ammonia allows a more effective utilisation of its high evaporation enthalpy for in-cylinder charge cooling, thereby increasing knock resistance and enabling operation at high ammonia shares and elevated loads. At the same time, mixture stratification can be tailored to improve ignition conditions and combustion robustness.

To quantify these potential benefits under conditions representative of high-performance operation, the following section compares NH_3 -PFI- H_2 and NH_3 -DI- H_2 at 17 bar IMEP and high energetic ammonia share, focusing on the influence of the air–fuel ratio λ on combustion stability, efficiency and emissions.

5. Results – Comparison of NH₃-PFI-H₂ and NH₃-DI-H₂

5.1 Lambda Variation

The influence of the air–fuel ratio on combustion stability and efficiency was investigated for NH₃-PFI-H₂ and NH₃-DI-H₂ at 17 bar IMEP and 85% energetic ammonia share. In both concepts, hydrogen was supplied via PFI, while ammonia was either port-injected at 20 bar or directly injected at 300 bar. Figure 4 presents CoV_{IMEP}, MFB50, burning duration (MFB10–MFB90), indicated efficiency, burning delay and peak pressure as a function of λ . The NH₃-DI-H₂ concept exhibits significantly lower CoV_{IMEP} values across the entire investigated λ range. Stable operation with CoV_{IMEP} well below 3% is achieved from near-stoichiometric conditions up to $\lambda \approx 1.4$. In contrast, NH₃-PFI-H₂ shows a pronounced increase in CoV_{IMEP} with increasing λ , approaching the stability limit at about $\lambda \approx 1.2$. The improved stability of the DI concept is mainly attributed to stratified mixture formation and enhanced in-cylinder charge cooling. Hydrogen, introduced via PFI, is preferentially transported towards the spark plug region, creating a locally hydrogen-rich and highly reactive ignition zone. Simultaneously, directly injected ammonia penetrates deeper into the combustion chamber, where it is consumed by the propagating flame front [12, 13].

This targeted stratification improves ignition reliability and reduces sensitivity to mixture inhomogeneities and λ variations compared to the more homogeneous PFI case. In terms of burning duration, NH₃-PFI-H₂ generally shows slightly shorter MFB10–MFB90 intervals than NH₃-DI-H₂ over a wide λ range, reflecting the more homogeneous charge. However, the DI concept exhibits a significantly shorter ignition delay, especially at lean conditions, indicating improved local mixture reactivity at the spark plug.

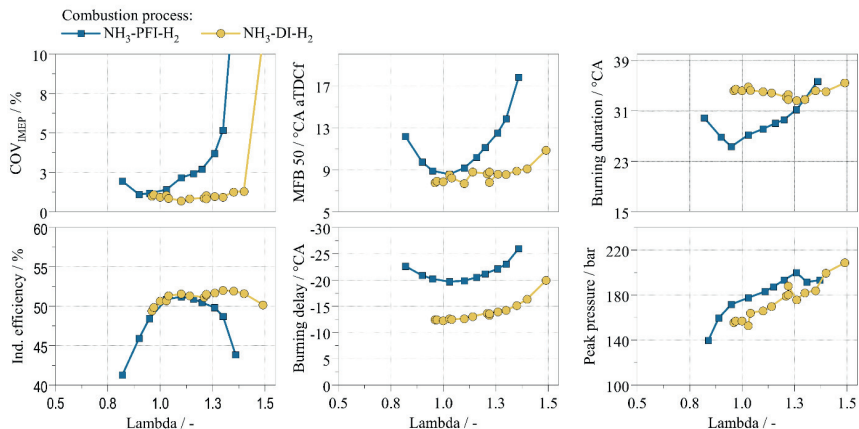


Figure 4: CoV_{IMEP}, MFB 50, burning duration, indicated efficiency, burning delay and peak pressure over the air-fuel-ratio (lambda) for the ammonia in PFI and DI combustion process

Both concepts achieve maximum indicated efficiencies of 52 % close to $\lambda \approx 1$, but the DI concept maintains high efficiency over a broader λ range, while the PFI concept experiences a more pronounced efficiency drop towards lean conditions.

Figure 5 illustrates the emission behaviour of both combustion concepts as a function of air–fuel ratio. For both PFI and DI operation, ammonia slip increases with rising λ . This trend confirms that complete NH_3 conversion remains difficult at lean conditions and is mainly limited by reduced reaction rates in highly diluted mixtures.

Hydrogen emissions decrease with increasing λ for both concepts. This reflects a characteristic trade-off between low H_2 emissions and high NO_x formation seen in both combustion strategies. At richer conditions, elevated combustion temperatures promote thermal decomposition of ammonia into hydrogen and nitrogen, which mitigates NO_x formation. Under lean conditions, the opposite behaviour is observed: less hydrogen is formed, while excess oxygen favours NO_x production. Across the entire λ range, the NH_3 -DI concept consistently exhibits slightly lower N_2O emissions than NH_3 -PFI- H_2 . This reduction indicates more effective conversion of nitrogen-containing intermediates, likely due to more favourable local temperature and mixing conditions in the DI case.

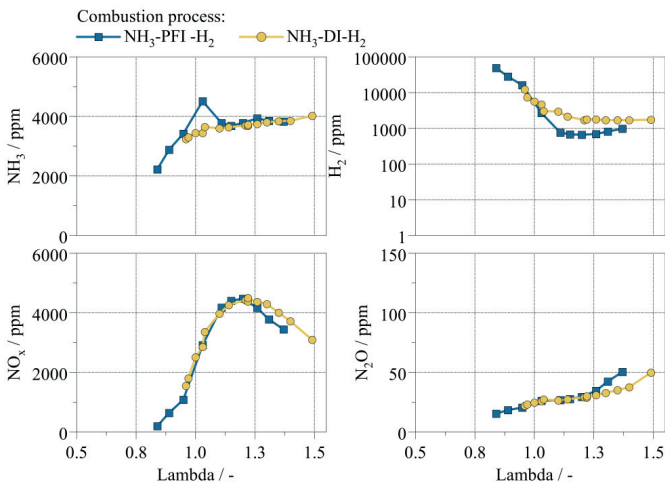


Figure 5: NH_3 , H_2 , NO_x and N_2O emissions over air-fuel-ratio (λ) for spark ignited ammonia PFI and DI combustion process

Overall, the results confirm that the NH_3 -DI concept significantly enhances combustion stability and reduces ignition delay compared to premixed ammonia PFI operation. While premixed hydrogen support in the PFI concept increases the global flame speed and thus the overall combustion rate, the DI strategy primarily improves ignition robustness and early flame kernel development, at the expense of a somewhat prolonged late combustion phase caused by mixture stratification. In combination, these effects yield a slightly higher indicated efficiency for the DI concept and lower N_2O emissions, while maintaining comparable NH_3 slip levels.

6. Conclusion and Outlook

The work presented in this paper leads to the following main conclusions:

- A spark-ignited combustion strategy based on liquid ammonia PFI and a capacitive high-energy ignition system enables stable 100% energetic NH_3 operation over the entire load range from 3 to 22 bar IMEP. At full load, indicated efficiencies of up to 51% were achieved, with similar efficiency for 100% NH_3 and NH_3/H_2 mixtures.
- At low loads, long spark durations are required to ensure reliable ignition and to avoid misfires. Under these conditions, NH_3 slip and N_2O emissions are elevated, whereas at medium and high loads combustion of pure NH_3 becomes very stable with reduced NH_3 slip and N_2O formation.
- High-pressure ammonia direct injection with hydrogen support ($\text{NH}_3\text{-DI-H}_2$) significantly improves combustion robustness compared to premixed $\text{NH}_3\text{-PFI-H}_2$, particularly at lean conditions. The DI concept exhibits lower CoV_{IMEP} , shorter ignition delay and comparable indicated efficiencies, especially at 17 bar IMEP and 85% energetic NH_3 share.
- The improved stability of the DI concept is attributed to stratified mixture formation, with a locally hydrogen-enriched ignition zone at the spark plug and ammonia-rich zones in the deeper combustion chamber. This combination supports reliable early combustion and controlled late-stage burn-out of ammonia-rich regions.
- While pure NH_3 operation is currently easier to realise in PFI mode with an optimised HEI system, DI extends the stable operating range towards high ammonia shares and lean mixtures and enables operation with high hydrogen fractions without knocking. This is particularly beneficial in systems with upstream crackers and varying hydrogen supply.

Future work will address the transfer of the combustion concepts to a multi-cylinder engine, including long-term durability testing, component development for ammonia compatibility and the integration and optimisation of exhaust aftertreatment systems for simultaneous reduction of NO_x , NH_3 slip and N_2O .

Acknowledgements

This work was carried out within the CAMPFIRE project of the Hydrogen Flagship Project TransHyDE and was funded by German Federal Ministry for Education and Research. The authors would like to thank Robert Bosch GmbH for providing technical support and the injection hardware used in this study. The authors also gratefully acknowledge SEM AB for supplying the FlexiSpark high-energy ignition system used in the experiments.

References

- [1] THE MARINE ENVIRONMENT PROTECTION COMMITTEE, "2023 IMO Strategy on Reduction of GHG Emissions from Ships: RESOLUTION MEPC.377(80)," 2023. [Online]. Available: <https://wwwcdn.imo.org/localresources/en/OurWork/Environment/Documents/annex/MEPC%2080/Annex%2015.pdf>
- [2] *IMO approves net-zero regulations for global shipping*. [Online]. Available: <https://www.imo.org/en/mediacentre/pressbriefings/pages/imo-approves-netzero-regulations.aspx> (accessed: Feb. 18 2026).
- [3] A. Braun *et al.*, "Aspects of Ammonia as Green Fuel for Propulsion Systems of Inland Water Vessels," *Energy Tech*, vol. 13, no. 2, 2025, doi: 10.1002/ente.202301648.
- [4] *Campfire*. [Online]. Available: <https://www.wir-campfire.de/> (accessed: Feb. 18 2026).
- [5] A. Braun *et al.*, "Development of an ammonia-fueled cracker-engine-unit as propulsion system for inland waterway vessel," 2025.
- [6] M. Klawitter *et al.*, "Ammonia as a fuel: Optical investigation of turbulent flame propagation of NH₃/Air and NH₃/H₂/N₂/Air flames at engine conditions," *Fuel*, vol. 375, p. 132616, 2024, doi: 10.1016/j.fuel.2024.132616.
- [7] V. Čaika and N. Dörr, "Thermal and Transport Properties of Diesel Fuel and their Effect on Injection Modelling," Consiglio Nazionale delle Ricerche, SAE Technical Paper, Sep. 2005. [Online]. Available: <https://saemobilus.sae.org/papers/thermal-transport-properties-diesel-fuel-effect-injection-modelling-2005-24-054>
- [8] H. Herwig, *Wärmeübertragung A-Z: Systematische und ausführliche Erläuterungen wichtiger Größen und Konzepte*. Berlin, Heidelberg, s.l.: Springer Berlin Heidelberg, 2000.
- [9] H. Mohr and R. Wolf, "Sustainable Shipping - Alternative Fuels and Other Technologies," vol. 2026, 2026.
- [10] A. Braun, T. Baufeld, S. Bernhardt, H. Kubach, H. Mohr, and S. Prehn, "Combustion concept for ammonia-fuelled crackerengine- unit as propulsion system for inland waterway vessels," in 2024. [Online]. Available: <https://publikationen.bibliothek.kit.edu/1000174215>
- [11] A. Braun *et al.*, "Development of a Spark-Ignited Combustion Strategy for 100% Ammonia (NH₃) Operation in Internal Combustion Engines," 2025, doi: 10.5445/IR/1000185082.
- [12] Z. Lin, S. Liu, Q. Sun, Y. Qi, Z. Wang, and J. Li, "Effect of injection and ignition strategy on an ammonia direct injection–Hydrogen jet ignition (ADI-HJI) engine," *Energy*, vol. 306, p. 132502, 2024, doi: 10.1016/j.energy.2024.132502.
- [13] R. Pelé, C. Mounaïm-Rousselle, P. Bréquigny, C. Hespel, and J. Bellettre, "First Study on Ammonia Spray Characteristics with a Current GDI Engine Injector," *Fuels*, vol. 2, no. 3, pp. 253–271, 2021, doi: 10.3390/fuels2030015.

Einfluss von C7- und C8-Aromaten auf die Partikelbildung im Abgas von Ottomotoren mit Direkteinspritzung

Johanna Klose

Abstract

With the introduction of direct injection in gasoline engines, particle emissions are the main focus of chemical and technical interest. The aim is to help identify specific components that contribute to particle formation, in particular, to identify the influence of C7 and C8 aromatics. The fuels are tested in stationary tests on an engine test bench. Particle number emissions are recorded using a condensation particle counter. In contrast to larger, more resonance-stabilized aromatics, toluene and xylene exhibited altered reaction behavior. Therefore it cannot contribute to PAH and soot formation. Literature reviews and own considerations suggested that the benzy radical formed from C7 and C8 aromatics tends to form a five- or seven-membered ring under high pressure. Soot reduction via five-ring formation is based on entropy-driven ring opening under high pressure. PAH precursors formed as a result do not significantly influence soot formation due to the short combustion time available. Theoretical considerations regarding the chemistry of the seven-membered ring formed from toluene show that the radical-carrying carbon atom of the tropyli radical would first have to undergo re-hybridization from a sp^2 to a sp^3 hybridized carbon atom in order to be incorporated into the soot structure.

1. Einleitung

Auf dem Weg zu einer Defossilisierung von Kraftstoffen ist es von großer Bedeutung, treibhausgasneutrale Kraftstoffe zu formulieren, die einerseits für die Bestandsflotte abwärtskompatibel und andererseits emissionsarm sind, um heute die Klima-, Luft- und Lebensqualität zu verbessern.

Für defossilisierte Ottokraftstoffe steht chemisch-technisch mit der Einführung der Direkteinspritzung die Partikelemission im Vordergrund des Interesses, da Stickoxide vergleichsweise leicht zu elementarem Stickstoff zu reduzieren sind. Daher fokussiert die vorliegende Arbeit auf die Partikelbildung von Ottomotoren mit Direkteinspritzung in Abhängigkeit von Kraftstoffeigenschaften, um somit eine Grundlage für zukünftiges partikelarmes Kraftstoffdesign in diesem Bereich zu legen.

2. Material und Methoden

2.1 Kraftstoffe

Um diese Einflüsse der Aromaten und Oxygenate auf die Partikelanzahlemission zu untersuchen, wurden ausgewählte chemische und physikalische Kraftstoffeigen-

schaften variiert, wobei die Aromaten sowie Ethanol und die sich daraus ableitenden physikalisch-chemischen Eigenschaften im Fokus standen.

Ein wichtiges Kriterium bei der Auswahl der Versuchskraftstoffe war deren Verfügbarkeit durch aktuelle Raffinerieströme oder solche, die sich zeitnah wirtschaftlich realisieren lassen. Ebenfalls mussten die physikalisch-chemischen Eigenschaften wie der Siedebereich und die motorischen Kennzahlen wie die Oktanzahl den Verbrennungsprozess im Ottomotor mit Direkteinspritzung erlauben. Die Grenzwerte der DIN EN 228 waren dabei richtungweisend, jedoch nicht bindend. Dies ermöglichte die Untersuchung von Extrempunkten, beispielsweise die Partikelbildungsneigung von Kraftstoffen mit erhöhtem Aromatengehalt oder solchen mit sehr raschem Siedeanstieg respektive mit einem moderaten Siedeverlauf.

Insgesamt wurden 20 der DIN EN 228 genügende und 15 außerhalb dieser Norm liegende Ottokraftstoffe (OK) unterschiedlicher Grundzusammensetzung gewählt und analysiert. Die Aromaten- und Oxygenatanteile sind in Abbildung 1 dargestellt.

Neben den 34 Versuchskraftstoffen wurde wöchentlich die Partikelanzahlemission eines Kontrollkraftstoffs (K-E10), ein handelsüblicher Ottokraftstoff mit einem Ethanolanteil von zehn Volumenprozent, gemessen, um eine mögliche Drift der Ergebnisse auszuschließen.

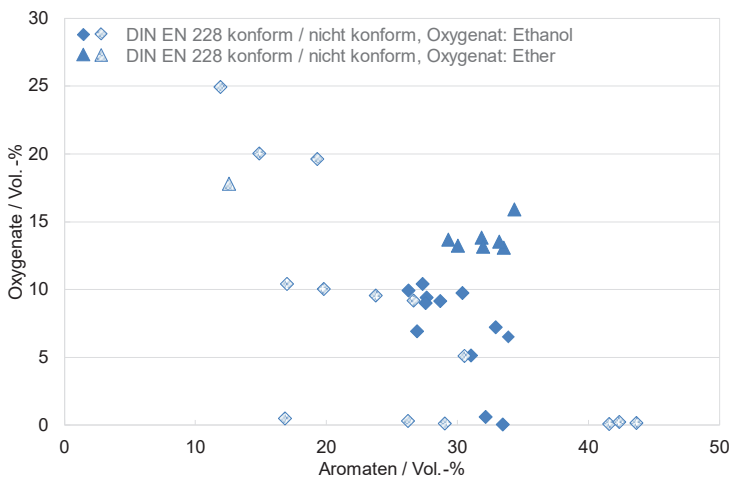


Abbildung 1: Oxygenate- und Aromatenkonzentrationen der Kraftstoffe; ausgefüllte / nicht ausgefüllte Symbole: innerhalb / außerhalb der DIN EN 228 liegende Kraftstoffe; Rauten / Dreiecke: ethanolhaltige / etherhaltige Kraftstoffe.

2.2 Stationäre Messpunkte am Motorenprüfstand

Es wurden zwei verschiedene Ottomotoren mit Abgasurboaufladung und Direkteinspritzung des Grundtyps EA 211 der Volkswagen AG am Motorenprüfstand verwendet.

Sie erfüllen die Grenzwerte nach Euro 5 und Euro 6 und können als repräsentativ für einen Großteil des europäischen Markts erachtet werden (Tabelle 1).

Tabelle 1: Technische Daten der eingesetzten Versuchsmotoren.

Motorparameter	Technische Daten	
Motor	EA 211 TSI	
Bauart	4-Zylinder-Reihenmotor	4-Zylinder-Reihenmotor
Hubraum	1395 cm ³	1395 cm ³
Kraftstoff	Super Bleifrei ROZ 95	Super Bleifrei ROZ 95
Nennleistung	103 kW bei 4500 bis 6000 min ⁻¹	92 kW bei 5000 bis 6000 min ⁻¹
Max. Drehmoment	250 Nm bei 1500 bis 3500 min ⁻¹	200 Nm bei 1400 bis 4000 min ⁻¹
Ventile pro Zylinder	4	4
Verdichtungsverhältnis	10,0:1	10,5:1
Emissionsklasse	EU5	EU6

Um die Korrelation zwischen den Partikelemissionen und den Kraftstoffeigenschaften zu erleichtern, wurde die Partikelanzahlemission in stationären Messpunkten am Motorenprüfstand erhoben. Randbedingungen wie Druck und Temperatur im Brennraum, welche die Emissionen spürbar beeinflussen, können bei der Beurteilung eines Lastpunkts als konstant angesehen werden.

Die stationären Messpunkte nebst den zugehörigen Einspritzstrategien sind in den Abbildungen 2 und 3 dargestellt.

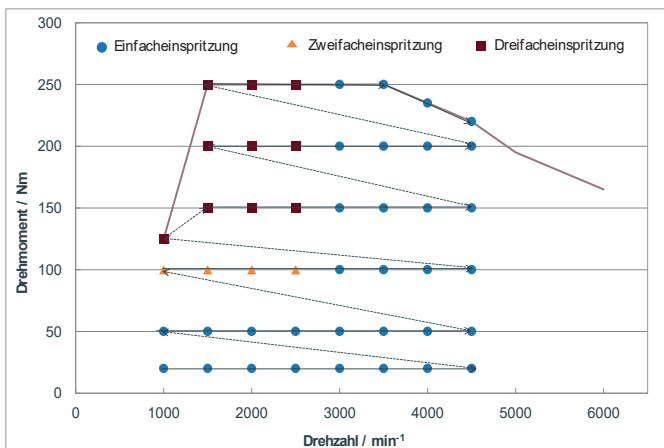


Abbildung 2: Messpunkte im Kennfeld im Screeningversuch nebst zugehöriger Einspritzstrategie.

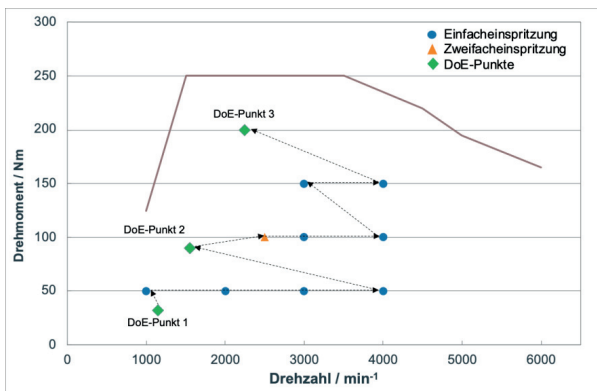


Abbildung 3: Messpunkte im Kennfeld im Vertiefungsversuch nebst zugehöriger Einspritzstrategie.

In einem Screeningversuch wurden das gesamte Lastkollektiv in 46 Lastpunkte abgebildet, um mögliche Anomalien in Abhängigkeit des Lastpunkt zu erfassen. Dabei wurden alle in Kapitel 2.1 gezeigten Kraftstoffe untersucht.

Im Vertiefungsversuch wurde aufbauend auf den Ergebnissen hinsichtlich der Streuung der Partikelemission des Referenzkraftstoffs und der Unterscheidbarkeit der Versuchskraftstoffe ein reduziertes Kennfeld entwickelt. Im Gegensatz zum Screeningversuch wurde ein gleichbleibender Referenzkraftstoff (RK) gewählt und mit jeweils Anteilen von 10, 20 und 30 Vol.-% Toluol oder Xylol versetzt.

Zusätzlich wurden drei weitere Punkte – die sogenannten volkswageninternen Design of Experiments-Punkte (DoE-Punkte) – aufgenommen. Diese DoE-Punkte wurden ursprünglich für Dieselmotoren entwickelt. Die Auswahl und Gewichtung der Punkte basierte auf Motor- und Getriebedaten relevanter Betriebspunkte des Neuen Europäischen Fahrzyklus sowie auf den prozentualen Anteilen der CO₂-Emissionen der entsprechenden Kennfeldpunkte. Tabelle 2 zeigt die Drehmomente und Drehzahlen der DoE-Punkte nebst der zugehörigen Gewichtungsfaktoren.

Tabelle 2: DoE-Punkte nebst zugehöriger Gewichtungsfaktoren.

DoE-Punkt	Drehmoment / Nm	Drehzahl / min ⁻¹	Gewichtungsfaktor
1	32	1150	0,31
2	90	1550	0,21
3	200	2250	0,02

Die Summe der gewichteten DoE-Punkte ermöglicht eine qualitative Übertragung der in stationären Messungen am Motorenprüfstand erhobenen Partikelemission auf dynamische Fahrzyklen am Rollenprüfstand (Gleichung 1). Volkswageninterne Untersuchungen haben gezeigt, dass diese Punkte für eine qualitative Einordnung der Partikelanzahlmission (in #/cm³) ebenfalls für Ottomotoren geeignet sind.

$$PN_{DoE (1+2+3)} = \sum_{i=1}^n PN_{DoE-Punkt_i} \cdot Gewichtungsfaktor_i \quad (1)$$

3. Ergebnisse und Diskussion

3.1 Partikelanzahlemission im Screeningversuch

Einen qualitativen Überblick über die Partikelanzahlemission am Vergleichspunkt DoE-Punkt₁₊₂₊₃ der Versuchskraftstoffe im Vergleich zum Kontrollkraftstoff K-E10 in Abhängigkeit von der Oxygenat- und Aromatenkonzentration zeigt Abbildung 3. Die Kraftstoffe mit einer geringeren Partikelemission als K-E10 Min sind in grün, die Kraftstoffe mit einer höheren Partikelemission K-E10 Max in rot und die Kraftstoffe mit vergleichbarer Partikelanzahlemission in grau dargestellt.

In Bezug auf die Partikelanzahlemission (PN) des Kontrollkraftstoffs K-E10 zeigen sich folgende Trends:

- Aromatenanteile unterhalb von 25 Vol.-% führen zu geringerer PN.
- Aromatenanteile oberhalb von 35 Vol.-% führen zu höherer PN.
- Aromatenanteile zwischen 25 und 35 Vol.-% führen zu vergleichbaren PN.

Dem gegenüber stehen die rot markierten Kraftstoffe OK-D, OK-G, OK-H und H1-Premium. Sie weisen trotz der zwischen 30 und 35 Vol.-% liegenden Aromatenkonzentration eine deutliche Reduktion der Partikelanzahlemission im Vergleich zu der des Kontrollkraftstoffs K-E10 auf. Die geringe Partikelanzahlemission bei hohem Aromatengehalt lässt sich weder durch eine Kompensation der Partikelanzahlemission aufgrund eines Oxygenats noch eines Additivs erklären. Sowohl die Art als auch der Anteil des Oxygenats dieser vier Kraftstoffe variieren von einem fünfprozentigen Ethanolanteil bei OK-G über einen zehnpromtigen Etheranteil bei OK-H zu einem jeweils 13-prozentigen Anteil von ETBE (Ethyltertiärbuthylether) bei H1 Premium und OK-D. Letzterer ist zugleich der einzige Kraftstoff, der weder über ein Reinigungsadditiv noch über weitere Performanceadditive verfügt, sodass die geringe Partikelanzahlemission nicht, bzw. nicht ausschließlich auf ein Reinigungsadditiv zurückzuführen sein kann. Die Gemeinsamkeit dieser Kraftstoffe liegt im hohen Anteil der C7- und C8-Aromaten (Toluol, die Isomere des Xylols sowie Ethylbenzol) von mehr als 25 Vol.-%.

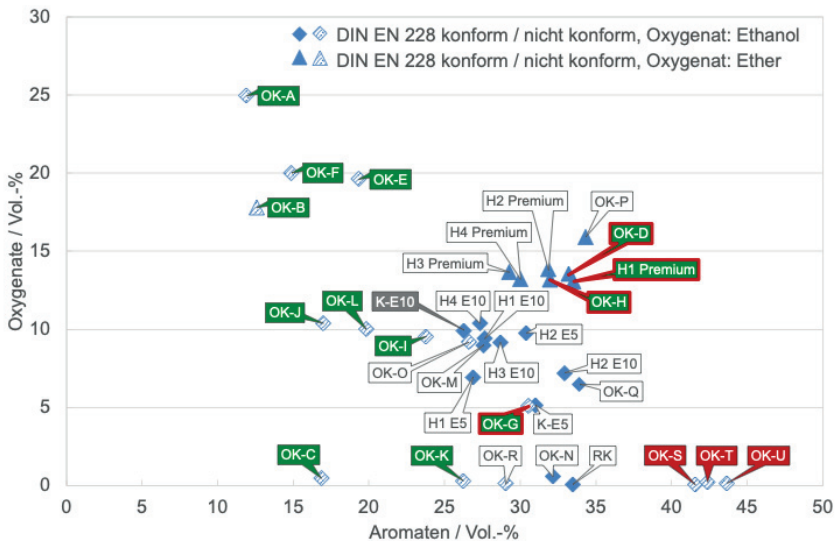


Abbildung 3: Oxygenat- und Aromatenkonzentration der Versuchskraftstoffe;
 Grün: geringeres Niveau der Partikelanzahlemission als K-E10 Min;
 Rot: höheres Niveau der Partikelemission als K-10 Max.

3.2 Partikelanzahlemission im Vertiefungsversuch

Im Gegensatz zum Screeningversuch wurde ein gleichbleibender Referenzkraftstoff gewählt, der weder Additive noch Oxygenate enthielt. Der Aromatenanteil lag bei etwa 33 Vol.-%, wobei etwa 2/3 auf C7- und C8-Aromaten entfielen und 1/3 auf höhermolekulare Aromaten zurückzuführen war. Dieser Referenzkraftstoff wurde mit jeweils Anteilen von 10, 20 und 30 Vol.-% Toluol oder Xylol versetzt. In Abbildung 4 und 5 sind die Abhängigkeit der Partikelanzahlemission vom wachsenden Anteil leichtsiedender Aromaten sowie den Messpunkten (MP) abgebildet.

Die Fehlerbalken geben stets das 95 % Konfidenzintervall der studentschen t-Verteilung an. Die Pfeile oberhalb der Säulendiagramme zeigen die Tendenz der Partikelanzahlemission in Abhängigkeit von der Konzentration des jeweils zugegebenen leichtsiedenden Aromaten. Dabei symbolisiert ein durchgezogener Pfeil eine signifikante Zu- oder Abnahme der Partikelanzahlemission zwischen dem reinen und dem mit Toluol bzw. Xylol versetzten Referenzkraftstoff, wobei zwischen mindestens zwei Konzentrationsstufen ebenfalls signifikante Unterschiede auftreten. Bei gestrichelten Pfeilen liegt keine signifikante Konzentrationsabhängigkeit der zugegebenen Aromaten vor. Hier besteht lediglich zum Referenzkraftstoff ein signifikanter Unterschied.

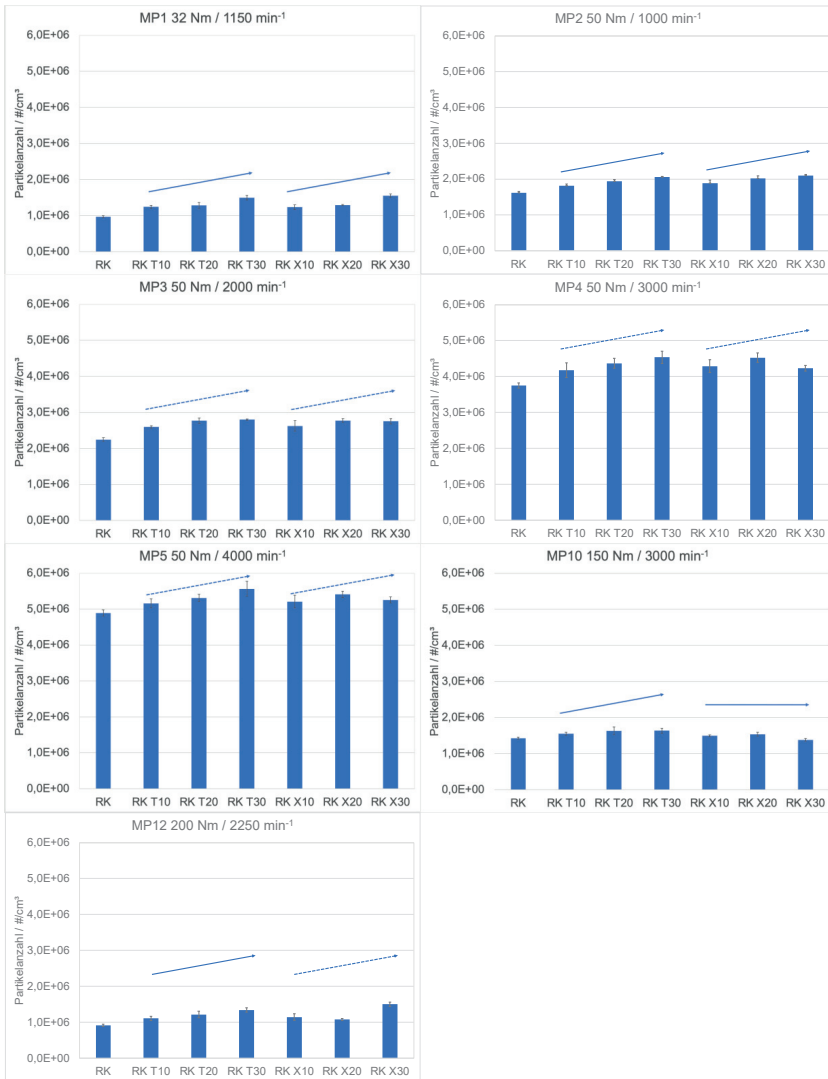


Abbildung 4: Partikelanzahlemission des Referenzkraftstoffs (RK) in Abhängigkeit des Lastpunkts sowie des Anteils von Toluol (T) und Xylol (X) mit Volumenanteilen von 10, 20 und 30 Vol.-% (I).

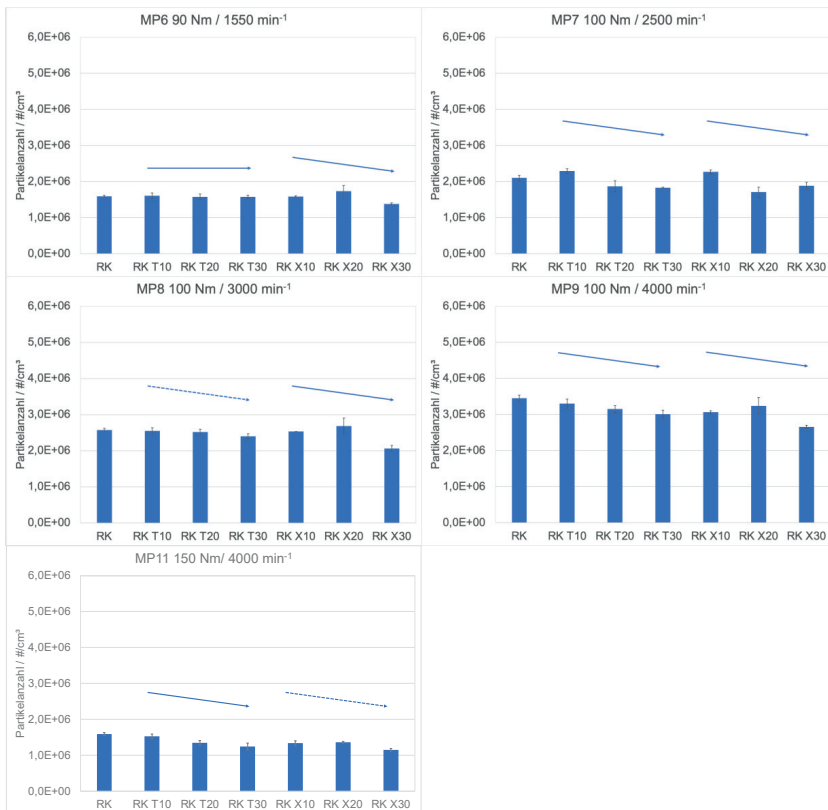


Abbildung 5: Partikelanzahlemission des Referenzkraftstoffs (RK) in Abhängigkeit des Lastpunkts sowie des Anteils von Toluol (T) und Xylol (X) mit Volumenanteilen von 10, 20 und 30 Vol.-% (II).

Es zeigt sich eine nicht erwartete Zweiteilung der Ergebnisse: Während die in Abbildung 4 dargestellte und in Abhängigkeit des Lastpunkts unterschiedlich stark ausgeprägte Zunahme der Partikelanzahlemission mit steigendem Aromatengehalt der Erwartung entspricht, wurde die bei wachsendem Aromatenanteil in Abbildung 5 gezeigte *Abnahme* der Partikelanzahlemission nicht vorhergesehen. Diese Abnahme der Partikelanzahlemission ereignet sich bei mittlerer Last von 100 und 150 Nm und ist mit zunehmender Drehzahl stärker ausgeprägt. Zwar liegt die prozentuale Abnahme der Partikelanzahlemission durchschnittlich im einstelligen Bereich bei -8 %, wohingegen im Niederlast und Hochlastbereich Zunahmen um durchschnittlich +21 % zu verzeichnen sind. Jedoch kann insbesondere vor dem Hintergrund der zehnmaligen Wiederholungsmessung des gesamten Kennfelds dieser Befund nicht durch Messunsicherheiten oder gar Messfehler erklärt und vernachlässigt werden.

Folglich zeigt eine Beimischung von Toluol und Xylol in Ergänzung zum bisherigen Kenntnisstand nicht unter allen Bedingungen eine Erhöhung der Partikelanzahlemission, sondern bei mittleren und hohen Lasten sogar eine Absenkung. Damit bietet der im Rahmen dieser Arbeit gefundene Einsatz von Toluol und Xylol als Vertreter der C7- und C8-Aromaten eine attraktive Steigerungsmöglichkeit für die Oktanzahl bei gleichzeitiger Wahrung der Partikelanzahlemissionen.

3.3 Einfluss von C7- und C8-Aromaten auf die Partikelbildung

Toluol und Xylol wiesen im Gegensatz zu größeren und damit stärker resonanzstabilisierten Aromaten ein verändertes Reaktionsverhalten auf. Literaturrecherchen und eigene Überlegungen legten den Schluss nahe, dass das aus C7- und C8-Aromaten gebildete Benzy-Radikal unter hohem Druck dazu neigt, einen Fünf- oder Siebenring zu bilden, die als solche nicht zur PAK- und Rußbildung beitragen können (Abbildung 6).

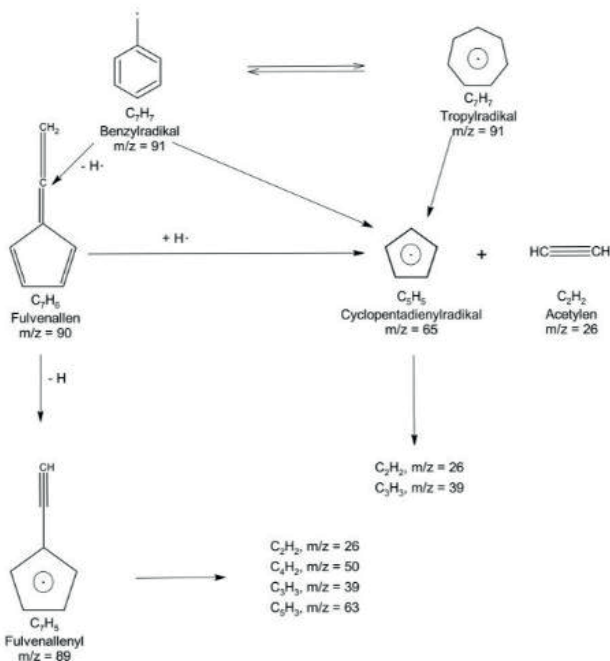


Abbildung 6: Übersicht häufig zitierter thermischer Zerfallswege des aus Toluol enthaltenen Benzylradikals.
(Die zugrunde liegende Literatur ist im folgenden Abschnitt angegeben.)

Die Rußminderung über den Weg der Fünfringbildung beruht auf der entropiegetriebenen Ringöffnung unter hohem Druck, wobei die dadurch gebildeten PAK-Vorläufersubstanzen in der Kürze der vorhandenen motorischen Verbrennungszeit den Rußaufbau nicht maßgeblich beeinflussen. Sobald das aromatische Ringsystem des Benzylradikals aufgebrochen ist und in kleine, hochstabile Fragmente zerfällt, ist die Rückreaktion kinetisch blockiert und endotherm. Die sich anschließenden Zerfallswege des Benzylradikals sind temperatur- und druckabhängig und führen zur vollständigen Fragmentierung des Benzylradikals. Der Vergleich zwischen Fulvenallen und Cyclopentadienyl zeigt, dass Fulvenallen thermodynamisch instabiler als Cyclopentadienyl ist. Allerdings liegt die kinetische Barriere für die Bildung des Cyclopentadienyl höher, wenn kein Stoßpartner vorhanden ist. Cavallotti hat beide Wege angezweifelt und eine Kombination beider Wege vorgeschlagen [1].

Die Produkte der jeweiligen Zerfallswege stellen wiederum Wachstumsspezies dar. Aufgrund der zeitlichen Limitierung pro Kolbenhub der ottomotorischen Verbrennung ist eine Aufbaureaktion zu polyaromatischen Kohlenwasserstoffen und Ruß nicht möglich. Ebenso würde eine direkte Rekombination zweier Cyclopentadienylradikale nur unter extrem hohen Konzentrationen erfolgen, wohingegen eine Ringöffnung unter hohen Temperaturen deutlich wahrscheinlicher ist [2]. Darüber zeigen Sagesse und Martin eine schnelle Ringöffnung des Cyclopentadienylradikals unter Anwesenheit von Kohlenstoffmonoxid oder Sauerstoff [3-7].

Theoretische Überlegungen zur Chemie des aus Toluol gebildeten Siebenrings zeigen, dass das radikaltragende Kohlenstoffatom des Tropyrradikals zunächst einer Rehybridisierung von einem sp^2 - zu einem sp^3 -hybridisierten Kohlenstoffatom unterliegen müsste, um in die Rußstruktur eingegliedert werden zu können. Dass durch unterschiedliche Raumstrukturen der Kohlenstoffgerüste die PAK- und Rußbildung gehemmt sein kann, darf angenommen werden. Bei einer Weiterreaktion des Tropyrradikals zum Cyclopentadienylradikal erfolgt gemäß der oben genannten Reaktionswege eine Ringöffnung unter Bildung kurzketziger Verbrennungsintermediate, die aufgrund der limitierten zur Verfügung stehenden Zeit keine Reaktionen zum Rußaufbau eingehen können [7-10].

4. Fazit

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit gelang es erstmals, durch gezielte Experimente partikelarme Kraftstoffe nicht nur zu identifizieren, sondern die in der Literatur bisher nur unter Niederdruck vorgestellten Überlegungen zur Bildung von Fünf- oder Siebenringen aus Benzylradikalen auf den dynamischen Hochdruckbetrieb im Motor zu übertragen. Dieser Effekt ist in der bekannten Literatur zur motorischen Rußbildung bisher unbekannt. Die vorliegende Arbeit eröffnet den Weg, aufgrund chemischer Überlegungen rußarme Zukunftskraftstoffe zu entwickeln und einen wesentlichen Beitrag zur nachhaltigen Mobilität und zum Gesundheitsschutz zu leisten.

Literatur

- [1] Cavallotti, C., Derudi, M., Rota, R.: On the mechanism of decomposition of the benzyl radical. DOI: 10.1016/j.proci.2008.06.203. Proceedings of the Combustion Institute. 2009.
- [2] Wang, H.: Formation of nascent soot and other condensed-phase materials in soot. DOI: 10.1016/j.proci.2010.09.009. Proceedings of the Combustion Institute. 2011.
- [3] Sagesse, C., Frassoldati, A., Cuoci, A., Faravelli, T., Ranzi, E.: A wide range kinetic modeling study of pyrolysis and oxidation of benzene. DOI: 10.1016/j.combustflame.2013.02.013. Combustion and Flame. 2013.
- [4] Martin, J., Slamanca, M., Kraft, M.: Soot inception: Carbonaceous nanoparticle formation in flames. DOI: 10.1016/j.pecs.2021.100956. Progress in Energy and Combustion Science. 2022.
- [5] Richter, H., Howard, J.: Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons and their growth to soot - a review of chemical reaction pathways. PII: S0360 1285(00)00009-5. Progress in Energy and Combustion Science. 2000.
- [6] Zhang, T., Zhang, L., Hong, X., Zhang, K., Qi, F., Law, C., Ye, T., Zhao, P., Chen, Y.: An experimental and theoretical study of toluene pyrolysis with tunable synchrotron VUV photoionisation and molecular-beam mass spectrometry. DOI: 10.1016/j.combustflame.2009.06.001. Combustion and Flame. 2009.
- [7] Martí, C., Michelsen, H., Najm, H., Zádor, J.: Comprehensive Kinetics on the C7H7 Potential Energy Surface under Combustion Conditions. DOI: 10.1021/acs.jpca.2c08035. A Journal of the American Chemical Society. 2023.
- [8] Hansen, N., Cool, T., Westmoreland, P., Kohse-Höinghaus, K.: Recent contributions of flame-sampling molecular-beam mass spectrometry to a fundamental understanding of combustion chemistry. Progress in Energy and Combustion Science. 2009.
- [9] Buckingham, G., Porterfield, J., Kostko, O., Trox, T., Ahmen, M., Robichaud, D., Minlos, M., Daily, J., Ellison, G.: The thermal decomposition of the benzyl radical in a heated micro-reactor. II. Pyrolysis of the tropyli radical. DOI: 10.1063/1.4954895. Journal of Chemical Physics. 2016.
- [10] Fischer, K., Hemberger, P., Bodi, A., Fischer, I.: Photoionisation of the tropyli radical. DOI: 10.3762/bjoc.9.77. Beilstein Journal of Organic Chemistry. 2013.

RSX = R33 2.0 Sustainable Liquid Energy

Ralf Türck, Julian Türck, Jürgen Krahl

Abstract

This work investigates the development and characterization of highly renewable diesel fuels based on the Diesel RSX fuel concept. The focus lies on the use of solketal as a functional fuel component enabling the formulation of standard-compliant diesel blends with high shares of renewable components and significant greenhouse gas savings. Due to its comparatively high density and polar character, solketal compensates for the density reduction caused by hydrotreated vegetable oil (HVO) while simultaneously influencing the miscibility and stability of renewable fuel systems. Ternary blends consisting of HVO or fossil diesel fuel, biodiesel, and solketal were investigated to analyze miscibility gaps and intermolecular interactions. The results demonstrate that biodiesel and aromatic hydrocarbons act as solubilizing components, enabling stable single-phase fuel systems. In addition, interactions of polar aging products in non-polar fuel and lubricant matrices were investigated using analytical ultracentrifugation. The findings indicate that polar molecules can either stabilize or destabilize emulsion systems depending on their chemical structure. Furthermore, Q-TOF mass spectrometry suggests that solketal may inhibit oligomerization reactions of oxidized biodiesel components through epoxide-opening reactions. Combustion investigations under diesel engine injection conditions revealed a reduction in soot formation tendency with increasing solketal content. At the same time, changes in OH* chemiluminescence indicate complex interactions within the multicomponent fuel blends. Overall, the results demonstrate the potential of solketal as a key component for highly renewable diesel fuels and highlight Diesel RSX as a promising approach for the defossilization of existing combustion engine technologies.

1. Einleitung

Eine der zentralen Aufgaben der Gesellschaft besteht in der Reduktion der Abhängigkeit von fossilen Energieträgern. Dabei liegt ein besonderer Fokus auf der Entwicklung neuer Technologien, die sowohl technisch als auch ökonomisch praktikabel sind. Ein kurzfristig wirksamer Ansatz ist die Defossilisierung bereits etablierter Technologien. Insbesondere im Bereich der globalen Mobilität dominieren weiterhin flüssige Kraftstoffe, die in Verbrennungsmotoren eingesetzt werden.

Damit alternative Kraftstoffe in bestehenden Fahrzeugflotten eingesetzt werden können, müssen diese sogenannte Drop-in-Eigenschaften aufweisen. Dies beschreibt die Fähigkeit eines Kraftstoffs, ohne Anpassungen an Motorentechnologie, Infrastruktur oder bestehenden Normen beigemischt und genutzt werden zu können. Ein Beispiel für einen regenerativen Drop-in-Kraftstoff ist Diesel R33 [1]. Dieser Kraftstoff weist einen regenerativen Anteil von 33 % auf, der sich aus 7 % Biodiesel sowie 26 % hydriertem Pflanzenöl (HVO) zusammensetzt. Aufgrund der geringeren Dichte von HVO ist

dessen Beimischung jedoch begrenzt, da andernfalls die in den Normen festgelegte untere Dichtegrenze unterschritten wird [2, 3]. Gleichzeitig erlauben die geltenden Normen lediglich eine Biodieselbeimischung von 7 % beziehungsweise 10 %. Daraus ergibt sich die Notwendigkeit, weitere regenerative Kraftstoffkomponenten mit vergleichsweise höherer Dichte zu identifizieren.

Ein vielversprechender biogener Rohstoff ist Glycerin sowie daraus abgeleitete glycerinbasierte Moleküle. Kraftstoffe, die aus Glycerin hergestellt werden, werden im Rahmen der Renewable Energy Directive (RED) als fortschrittliche Kraftstoffe eingestuft, was mit einer höheren Treibhausgasreduzierung verbunden ist [4]. Darüber hinaus führt der vergleichsweise hohe Sauerstoffgehalt dieser Moleküle zu einer erhöhten Polarität. Studien zeigen, dass polare Moleküle, insbesondere Alkohole, durch Kraftstoffalterung induzierte Präzipitate reversibel in Lösung überführen können [5]. Zudem weisen sauerstoffhaltige Moleküle aufgrund ihres hohen Sauerstoffanteils ein vielversprechendes Emissionsverhalten auf [6, 7]. Eine vielversprechende Möglichkeit zur stofflichen Nutzung von Glycerin ist dessen Umsetzung zu Solketal. Die Herstellung von Solketal ist in Abbildung 1 dargestellt.

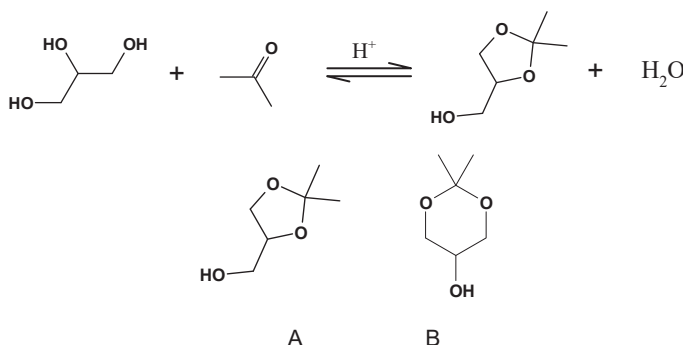


Abbildung 1: Reaktionsgleichung zur Herstellung von Solketal. Chemische Strukturen von A) Dioxolan Isomer und B) Dioxan-Isomer (entnommen aus [8]).

Solketal wird durch eine säurekatalysierte Kondensationsreaktion von Glycerin mit Aceton hergestellt, die als Ketalisierung bezeichnet wird. Als Protonenquelle können sowohl klassische homogene Katalysatoren, beispielsweise Schwefelsäure, als auch heterogene Katalysatoren wie Ionenaustauscher eingesetzt werden [9]. Darüber hinaus wurden in der Literatur auch katalysatorfreie Hochenergieprozesse unter Verwendung von überkritischem Aceton beschrieben [10]. Da die Ketalisierungsreaktion die Beteiligung von zwei Hydroxylgruppen umfasst, können zwei Konstitutionsisomere entstehen: ein Dioxolan-Derivat mit fünfringiger Struktur sowie ein Dioxan-Derivat mit sechsringiger Struktur. Dabei bildet das Dioxolan-Derivat mit etwa 99 % den Hauptanteil [11]. Solketal ist eine farblose und nicht toxische Flüssigkeit mit einem Siedebereich von 188 bis 190 °C. Darüber hinaus weist es eine Dichte von 1.063 kg/m³ auf. Trotz seiner überwiegend ottomotorischen Eigenschaften zeigen Studien, dass Solketal sowohl in Otto- als auch in Dieselmotoren eingesetzt werden kann. Grundsätzlich führt Solketal zu einer Erhöhung der Oktanzahl [12] sowie zu einer Verringerung

der Cetanzahl [13]. Zudem wurde eine Reduktion der Gumbildung [12] sowie eine Verlangsamung der Oligomerisierung beobachtet [14].

Im Folgenden werden die Eigenschaften von Solketal sowie dessen Wechselwirkungen in Dieselkraftstoffen näher betrachtet. Diese Eigenschaften bilden die Grundlage für variable Kraftstoffblends, die im weiteren Verlauf als Diesel RSX eingeführt werden.

2. Diesel RSX

Aufbauend auf den beschriebenen Eigenschaften von Solketal wurde das Kraftstoffkonzept Diesel RSX entwickelt. Dieses basiert auf Kraftstoffmischungen mit variablen Anteilen regenerativer Komponenten und verfolgt das Ziel, den Anteil fossiler Bestandteile im Dieselkraftstoff schrittweise zu reduzieren, ohne die technische Einsetzbarkeit in bestehenden Fahrzeugflotten einzuschränken. Dabei kommt Solketal eine zentrale Rolle zu, da dessen physikalische und chemische Eigenschaften die Formulierung hochregenerativer Dieselkraftstoffe ermöglichen. Insbesondere die vergleichsweise hohe Dichte von Solketal wirkt der durch HVO verursachten Dichteabsenkung entgegen. Dadurch kann der Anteil erneuerbarer Komponenten im Kraftstoff erhöht werden, ohne die in der DIN EN 590 festgelegten Dichtegrenzen zu unterschreiten. Die Entwicklung des Diesel-RSX-Konzepts erfolgt daher auf Grundlage einer gezielten Kraftstoffformulierung, bei der Solketal als strukturgebende Schlüsselkomponente eingesetzt wird. Durch die Kombination von Solketal mit den weiteren regenerativen Komponenten (wie HVO und Biodiesel) können Kraftstoffmischungen erzeugt werden, die trotz hoher biogener beziehungsweise synthetischer Anteile die relevanten physikalischen Anforderungen der DIN EN 590 erfüllen. Neben der Dichte betrifft dies unter anderem die Viskosität, dem Zündverhalten, das Destillationsverhalten sowie die Lager- und Mischstabilität.

Das Konzept ermöglicht somit die Entwicklung normkonformer Dieselkraftstoffe bis hin zu einem RS100-Kraftstoff, der vollständig auf regenerativen Komponenten basiert. Gleichzeitig sind mit diesen Kraftstoffen hohe Treibhausgaseinsparungen verbunden, wodurch Diesel RSX einen vielversprechenden Ansatz zur kurzfristigen Defossilisierung bestehender Mobilitäts- und Verbrennungstechnologien darstellt. Im Folgenden werden beispielhafte physikalischen und chemischen Wechselwirkungen innerhalb der Kraftstoffmischungen näher untersucht.

3. Blendstabilität

Bevor Kraftstoffblends sowie die damit verbundenen physikalischen und chemischen Wechselwirkungen untersucht werden können, muss zunächst die Mischstabilität der Systeme betrachtet werden. Von besonderer Bedeutung ist hierbei die Identifikation der Mischungslücke, da die vergleichsweise hohe Polarität von Solketal die vollständige Mischbarkeit mit unpolaren Dieselkraftstoffen einschränken kann. Zur Untersuchung des Mischverhaltens wurden ternäre Kraftstoffblends aus fossilem Dieselkraftstoff (DK) beziehungsweise HVO, Biodiesel und Solketal hergestellt (siehe Abbildung 2). Der wesentliche Unterschied zwischen fossilem Dieselkraftstoff und HVO liegt dabei insbesondere im Aromatengehalt des fossilen Dieselkraftstoffs. Aus diesem Grund wurden zunächst ternäre Mischungen auf HVO-Basis untersucht, um den Einfluss feh-

lender Aromaten auf das Lösungsverhalten zu analysieren. Es zeigte sich, dass Solketal keine direkte Mischbarkeit mit HVO aufweist. Daher sind die lösungsvermittelnden amphiphilen Eigenschaften des Biodiesels erforderlich, um stabile einphasige Mischungen zu ermöglichen [16]. Dabei wurde beobachtet, dass bei einem Biodieselanteil von 21 Vol.-% bis zu 9 Vol.-% Solketal mischbar waren, während bei lediglich 11 Vol.-% Biodiesel nur noch etwa 1 Vol.-% Solketal in Lösung gebracht werden konnte. Auffällig war zudem, dass sich die Mischungslücke bei Verwendung von DK zu höheren Solketalanteilen und gleichzeitig niedrigeren Biodieselgehalten verschiebt. Dies verdeutlicht die lösungsvermittelnde Wirkung der im DK enthaltenen Aromaten. Für den untersuchten DK begann die Mischungslücke bei etwa 9 Vol.-% Biodiesel und 1 Vol.-% Solketal und erstreckte sich bis zu ungefähr 7 Vol.-% Solketal bei einem Biodieselanteil von 14 Vol.-%. Abhängig vom Gesamtaromatengehalt sowie von der Verteilung der Mono-, Di-, Tri- und Polyaromaten können sogar binäre Mischungen aus DK und Solketal realisiert werden. Grundsätzlich führt die Erhöhung des Solketalanteils zu einer steigenden Polarität der Kraftstoffmischung. Dies äußert sich unter anderem in einer Zunahme der relativen Permittivität sowie in einer Verringerung der Grenzflächenspannung [15].

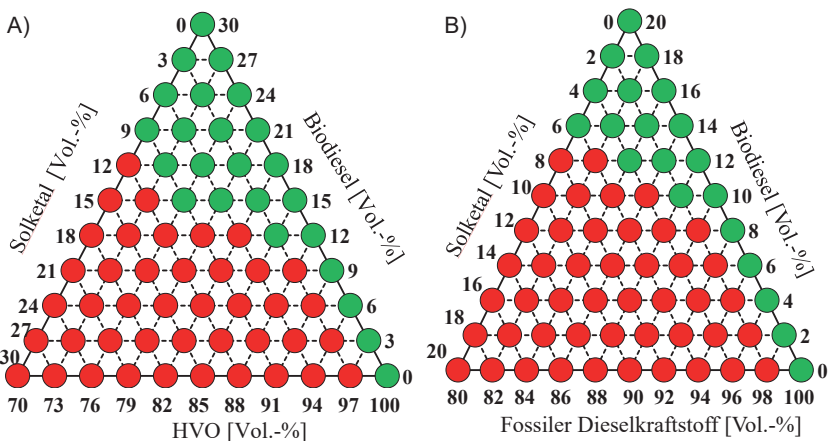


Abbildung 2: Ternäre Mischungsdiagramme von Solketal und Biodiesel mit A) HVO und B) fossilem Dieselmotorkraftstoff. (entnommen aus [15]).

4. Zusammenhang zwischen chemischer Struktur und Wechselwirkungsverhalten von Solketal

Wie bereits in der Einleitung beschrieben, birgt die Polarität von Solketal das Potenzial, der Präzipitatbildung polarer Moleküle in unpolaren Kohlenwasserstoffen entgegenzuwirken. Im Rahmen der Motorölverdünnung gelangen unverbrannte sowie voroxidierte Kraftstoffmoleküle in Kontakt mit dem überwiegend unpolaren Schmieröl, wodurch Emulsionssysteme entstehen. Vergleichbare Effekte treten auch bei oxidierten Alterungsprodukten auf, die infolge der Kraftstoffalterung in unpolaren Dieselmotorkraftstoffen,

beispielsweise HVO, vorliegen können. Eine wesentliche Herausforderung besteht daher in der Charakterisierung solcher Emulsionssysteme und ihrer Stabilität. Hierfür wurde eine analytische Methodik auf Basis der analytischen Ultrazentrifugation (AUZ) etabliert. Mithilfe der Sedimentationsgeschwindigkeiten können Aussagen über die Größenverteilung von Partikeln beziehungsweise Tröpfchen innerhalb der Emulsion getroffen werden. Die Untersuchung von Kraftstoffemulsionen ist dabei insbesondere aufgrund ihrer Polydispersität, Trübung sowie der begrenzten Stabilität anspruchsvoll, da diese Systeme im Zentrifugalfeld eine vergleichsweise schnelle Sedimentation aufweisen. In [17] wurde eine spezielle Form der AUZ eingesetzt, bei der die Messung unter variabler Drehzahl erfolgt (Gravitational Sweep). Dabei wird das System ortsaufgelöst mithilfe eines Multiwellenlängendetektors (MWA) analysiert. Dieser Detektor ermöglicht die Erfassung unterschiedlicher Extinktionsverläufe innerhalb trüber Medien und erlaubt somit eine detaillierte Untersuchung der Emulsionsstruktur und Sedimentationsvorgänge. Abbildung 3 zeigt entsprechende Emulsionssysteme aus 20 % Biodiesel in HVO beziehungsweise in Grundöl (BO), welches ein nicht additiviertes Motoröl darstellt.

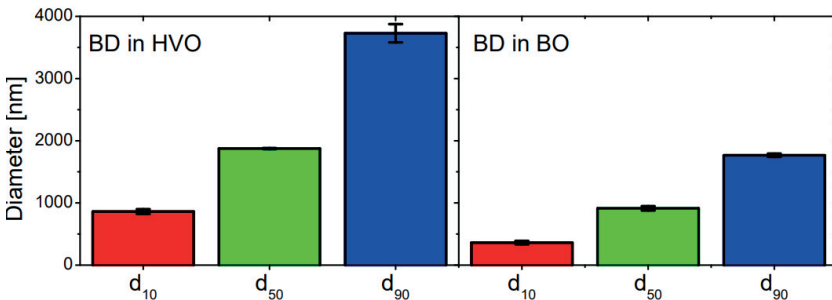


Abbildung 3: Perzentilwerte der Emulsionen von Biodiesel (BD) in HVO (links) und Grundöl (BO) (rechts) (entnommen aus [17]).

Die Perzentilwerte zeigen, dass die Emulsionen auf HVO-Basis größere Tröpfchendurchmesser ausbilden als die entsprechenden Systeme im Grundöl (BO). Dies könnte auf eine stärkere Orientierung der oxidierten beziehungsweise gealterten Biodieselskomponenten innerhalb der BO-Matrix hinweisen. Eine mögliche Ursache hierfür liegt in der unterschiedlichen chemischen Struktur der jeweiligen Kohlenwasserstofffraktionen. HVO ist hinsichtlich seines Siedebereichs dem Dieselmotorstoff zuzuordnen und besteht überwiegend aus Kohlenwasserstoffen mit Kettenlängen von C15 bis C18 [18]. Grundöle hingegen gehören zur Schmierölfraction des Rohöls und enthalten hauptsächlich Kohlenwasserstoffe mit längeren Kohlenstoffketten. Diese sterischen Unterschiede der Alkane könnten zu einer stärkeren Orientierung der polaren Alterungsprodukte des Biodiesels innerhalb der unpolaren BO-Matrix führen und dadurch die Ausbildung kleinerer, stabilerer Tröpfchen begünstigen. Zur weiteren Untersuchung des Einflusses polarer Moleküle wurde dem HVO-System Solketal in steigenden Konzentrationen von 0 bis 8 Gew.-% zugesetzt. Analog dazu wurde dem BO-System 1-Oktanol beigemischt. Dabei zeigte sich, dass Solketal zu einer Vergrößerung der Tröpfchendurchmesser innerhalb der HVO-Emulsion führt, während 1-Oktanol im BO-System eine Destabilisierung beziehungsweise ein Aufbrechen der Emul-

sion bewirkt [17]. Die Ergebnisse verdeutlichen, dass polare Moleküle je nach chemischer Struktur und Wechselwirkung mit der umgebenden Matrix sowohl emulsionsstabilisierend als auch emulsionsauflösend wirken können.

Ein weiterer Untersuchungsansatz bestand in der Analyse der inhibierenden Wirkung von Solketal auf Oligomerisierungsreaktionen. Eine solche Inhibierung könnte die Ausbildung von Emulsionssystemen bereits frühzeitig unterbinden und somit die Stabilität gealterter Kraftstoffsysteme positiv beeinflussen. Zur Identifikation möglicher Reaktionspfade innerhalb der komplexen Biodieselalterung wurde Quadrupol-Time-of-Flight-Massenspektrometrie (Q-TOF-MS) eingesetzt. Mithilfe von Ölsäuremethylester (C18:1) als Modellkomponente für Biodiesel konnten Epoxide als relevante Zwischenprodukte der Alterungs- und Oligomerisierungsreaktionen identifiziert werden [19]. Solketal besitzt eine Hydroxylgruppe, die als nukleophile Funktion wirken kann. Diese Nukleophile können mit den gebildeten Epoxiden über Epoxidöffnungsreaktionen reagieren (siehe Abbildung 4). Besitzt das eingesetzte Nukleophil keine weitere reaktive funktionelle Gruppe, kann die fortschreitende Oligomerisierung durch diese Reaktion gezielt unterbrochen beziehungsweise reaktiv gequencht werden. Darüber hinaus wird die im Reaktionsverlauf entstehende Hydroxylgruppe typischerweise weiter zu einer Ketonstruktur oxidiert.

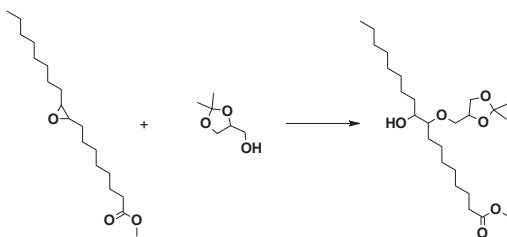


Abbildung 4: Reaktionsgleichung des reaktiven quenching (entnommen aus [19]).

5. Rußbildungsneigung von Diesel RSX

In Hochtemperatur- und Hochdruckeinspritzkammern wurde unter dieselmotorischen Einspritzbedingungen das Zünd- und Verbrennungsverhalten von Diesel RSX Kraftstoffen hinsichtlich ihrer Rußbildungsneigung untersucht. Als charakteristische Indikatoren dienten dabei die OH*-Chemilumineszenz zur Beschreibung der Hochtemperaturreaktionen sowie das Rußleuchten zur Bewertung der Rußbildung während der Verbrennung. Grundsätzlich zeigten binäre Mischungen aus Biodiesel und Solketal mit steigendem Solketalanteil eine Verringerung der Rußbildungsneigung im Vergleich zu reinem Biodiesel [8]. Aufbauend auf diesen Ergebnissen wurde das Konzept auf Diesel RSX Kraftstoffe übertragen. Hierzu wurden auf Basis eines Diesel R33 Kraftstoffs Mischungen mit unterschiedlichen Solketalanteilen untersucht. Abbildung 5 zeigt die zeitlichen Verläufe des Rußleuchtens sowie der OH*-Chemilumineszenz für die untersuchten Diesel RSX Kraftstoffe.

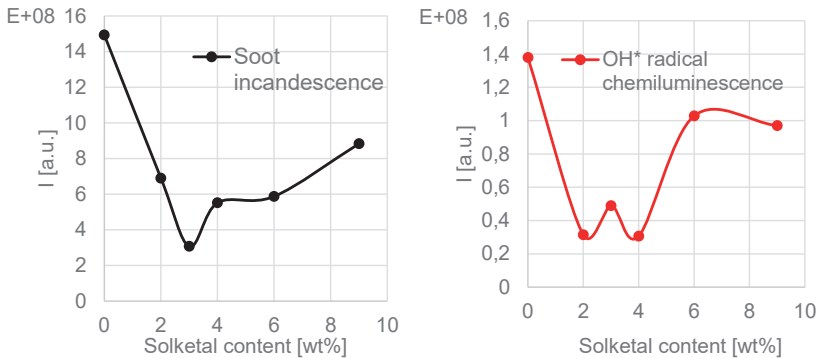


Abbildung 5: Verläufe des Rußleuchtens (links) und der OH*-Chemilumineszenz (rechts) für Diesel R33 Kraftstoffe mit steigendem Solketalgehalt (entnommen aus [8]).

Für die Untersuchungen wurden dieselmotorische Einspritzbedingungen mit einem Umgebungsdruck von 62 bar, einer Umgebungstemperatur von 627 °C sowie einem Einspritzdruck von 1.500 bar bei einer Kraftstofftemperatur von 90 °C eingestellt. Der Einfluss von Solketal wurde dabei in einem Konzentrationsbereich von 2 bis 9 Gew.-% untersucht. Die Abbildungen 9 und 10 zeigen die Verläufe des Rußleuchtens sowie der OH*-Radikal-Chemilumineszenz der analysierten Kraftstoffsysteme. Sowohl anhand des Rußleuchtens als auch der OH*-Chemilumineszenz wird deutlich, dass die Zugabe von Solketal grundsätzlich zu einer Verringerung der Signalintensitäten führt. Dies weist auf eine reduzierte Rußbildungsneigung sowie auf Veränderungen der Hochtemperaturreaktionen während der Verbrennung hin. Auffällig ist jedoch ein abweichendes Verhalten bei einem Solketalanteil von 3 Gew.-%. Während das Rußleuchten an diesem Punkt ein Minimum über den gesamten Messbereich erreicht, zeigt die OH*-Chemilumineszenz zwischen 2 und 4 Gew.-% Solketal ein lokales Maximum. Das unterschiedliche Verhalten des quaternären Kraftstoffsystems deutet auf zusätzliche Wechselwirkungen zwischen den Kohlenwasserstoffen, dem Biodiesel und Solketal hin. Eine eindeutige mechanistische Interpretation ist jedoch schwierig, da bereits geringe Änderungen des Solketalanteils von lediglich 1 Gew.-% deutliche Veränderungen der Rußbildungsneigung hervorrufen. Dies spricht gegen einen ausschließlich durch die Mischungsverhältnisse bedingten Effekt. Wahrscheinlicher ist vielmehr das Vorliegen kinetischer Wechselwirkungen innerhalb des komplexen Kraftstoffsystems.

Grundsätzlich sind derartige Anomalien in den Wechselwirkungen zwischen Kraftstoffkomponenten bekannt. Vergleichbare Effekte wurden beispielsweise bereits im Zusammenhang mit dem sogenannten B20-Effekt beschrieben [20, 21].

6. Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit untersucht die Entwicklung hochregenerativer Dieseldieselkraftstoffe auf Basis des Kraftstoffkonzepts Diesel RSX. Im Mittelpunkt steht dabei Solketal als

funktionelle Kraftstoffkomponente zur Formulierung normkonformer Kraftstoffmischungen mit hohen regenerativen Anteilen. Die Untersuchungen zeigen, dass Solketal aufgrund seiner hohen Dichte und Polarität den dichteverringern den Effekt von HVO kompensieren und gleichzeitig die Mischstabilität regenerativer Kraftstoffsysteme beeinflussen kann. Dabei wurde deutlich, dass Biodiesel sowie die Aromaten fossiler Dieselmischungen eine entscheidende lösungsvermittelnde Wirkung besitzen und stabile einphasige Systeme ermöglichen. Darüber hinaus wurden Wechselwirkungen polarer Alterungsprodukte in unpolaren Kraftstoff- und Schmierstoffsystemen untersucht. Mit Hilfe der AUZ konnten Emulsionssysteme charakterisiert und Unterschiede im Verhalten verschiedener polarer Moleküle aufgezeigt werden. Zusätzlich deuten massenspektrometrische Untersuchungen darauf hin, dass Solketal Oligomerisierungsreaktionen oxidiert Biodieselmischungen inaktivieren kann. Untersuchungen zur Rußbildungsneigung unter dieselmotorischen Bedingungen zeigten zudem, dass steigende Solketalanteile die Rußbildungsneigung reduzieren. Gleichzeitig weisen die Ergebnisse auf komplexe Wechselwirkungen innerhalb der Kraftstoffmischungen hin.

Zukünftige Arbeiten umfassen die Fertigstellung weiterer Motorprüfstandsversuche mit besonderem Fokus auf das Emissionsverhalten der Diesel RSX Kraftstoffe unter praxishnahen Betriebsbedingungen. Darüber hinaus sollen weitere Forschungsfragen, insbesondere hinsichtlich der Motoröalterung und der Wechselwirkungen zwischen Kraftstoff und Schmierstoff, untersucht werden. Ergänzend sind Flottenversuche in Kombination mit Filtertests in Zusammenarbeit mit einem Filterhersteller geplant, um die Praxistauglichkeit der Kraftstoffe unter realen Einsatzbedingungen zu bewerten. Parallel dazu soll gemeinsam mit Logistikpartnern der Markteintritt vorbereitet sowie der Ausbau weiterer Solketal Produktionskapazitäten vorangetrieben werden.

Literatur

1. Götz, K., et al., *Exhaust Gas Emissions and Engine Oil Interactions from a New Biobased Fuel Named Diesel R33*. 2016, SAE Technical Paper.
2. Zeman, P., et al., *Hydrotreated vegetable oil as a fuel from waste materials*. *Catalysts*, 2019. 9(4): p. 337.
3. Lapuerta, M., et al., *Key properties and blending strategies of hydrotreated vegetable oil as biofuel for diesel engines*. *Fuel processing technology*, 2011. 92(12): p. 2406-2411.
4. *Legislation.gov.uk. Directive (EU) 2018/2001 of the European Parliament and of the Council*. 2018; Available from: <https://www.legislation.gov.uk/eudr/2018/2001/annex/IX?utm>.
5. Munack, A., et al., *Alcohols as a means to inhibit the formation of precipitates in blends of biodiesel and fossil diesel fuel*. *Agricultural Engineering International: CIGR Journal*, 2015.
6. Manin, J., et al., *Effects of oxygenated fuels on combustion and soot formation/oxidation processes*. *SAE International Journal of Fuels and Lubricants*, 2014. 7(3): p. 704-717.
7. Neoh, K., J. Howard, and A. Sarofim. *Effect of oxidation on the physical structure of soot*. in *Symposium (International) on Combustion*. 1985. Elsevier.

8. Türck, J., et al., *Soot formation and ignition properties of diesel fuels with solketal in an injection chamber*. Energy Conversion and Management: X, 2026: p. 101714.
9. Fatimah, I., et al., *Glycerol to solketal for fuel additive: recent progress in heterogeneous catalysts*. Energies, 2019. 12(15): p. 2872.
10. Royon, D., S. Locatelli, and E.E. Gonzo, *Ketalization of glycerol to solketal in supercritical acetone*. The Journal of Supercritical Fluids, 2011. 58(1): p. 88-92.
11. Nanda, M.R., et al., *Catalytic conversion of glycerol for sustainable production of solketal as a fuel additive: A review*. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2016. 56: p. 1022-1031.
12. Mota, C.J., et al., *Glycerin derivatives as fuel additives: The addition of glycerol/acetone ketal (solketal) in gasolines*. Energy & Fuels, 2010. 24(4): p. 2733-2736.
13. Türck, J., et al., *Solketal as a renewable fuel component in ternary blends with biodiesel and diesel fuel or HVO and the impact on physical and chemical properties*. Fuel, 2022. 310: p. 122463.
14. Türck, J., *Wechselwirkung und Einfluss von Solketal auf die Alterung von Fettsäuremethylestern*. Kraftstoffe für die Mobilität von morgen: 4. Tagung der Fuels Joint Research Group am 10. und 11. Juni 2021 in Dresden-Radebeul, 2021. 30.
15. Türck, J., et al., *Drop-In Capability of Solketal in Diesel and Gasoline Fuels Containing Biodiesel, HVO, Fossil Diesel, and Gasoline Based on Standard Physical and Chemical Fuel Properties*. ACS Omega, 2026.
16. Fernando, S. and M. Hanna, *Development of a novel biofuel blend using ethanol– biodiesel– diesel microemulsions: EB-diesel*. Energy & Fuels, 2004. 18(6): p. 1695-1703.
17. Türck, J., et al., *Application of analytical ultracentrifugation in gravitational sweep mode coupled with turbidity detection for analyzing polydisperse emulsions of aged biodiesel and alkanes*. RSC advances, 2025. 15(56): p. 47840-47849.
18. Rashid, U., et al., *Standard specifications for renewable diesel*. Renewable Diesel, 2024: p. 33-63.
19. Türck, J., et al., *Extension of Biodiesel aging mechanism—the role and influence of Methyl Oleate and the contribution of Alcohols through the use of Solketal*. ChemSusChem, 2023. 16(17): p. e202300263.
20. Krahl, J., et al., *Exhaust gas emissions and mutagenic effects of diesel fuel, biodiesel and biodiesel blends*. 2008, SAE Technical Paper.
21. Schmidt, L., *Wechselwirkungen zwischen Kraftstoffkomponenten in biodieselbasierten Mischkraftstoffen unter besonderer Berücksichtigung der Alterungsprodukte von Fettsäuremethylestern*. Vol. 6. 2014: Cuvillier Verlag.

FSC² Fuel Design via Machine Learning and Optimization

Philipp Ackermann, Marian Panofen, Jan Pavšek, Jan G. Rittig, Jörn Viell, Manuel Dahmen, Alexander Mitsos

Abstract

To be a viable solution for climate-neutral transport, renewable fuels must exhibit an efficient well-to-wheel performance. Synthetic fuels can be manufactured via different technological routes. Important degrees of freedom are the raw materials, the production processing routes, the molecular structure of the fuel, and the combustion process. Selecting the most promising combination of technologies requires a systematic approach. The Integrated Fuel and Chemical Science Center at RWTH Aachen University develops methods for the design of fuels along the whole value chain from production to propulsion. Machine learning accelerates the discovery of new fuels and helps to integrate models from different domains into one holistic optimization problem.

Fuel components and mixtures must fulfill certain property requirements. Assessing key properties of molecules and mixtures in-silico is a key task in early fuel development. To predict these properties, we employ graph neural networks (GNNs). GNNs can predict ignition quality indicators like octane numbers, thermophysical properties like the boiling point, temperature-dependent properties like the vapor pressure, and binary interaction parameters like activity coefficients.

Fulfilling property requirements, however, is not enough. To achieve a competitive well-to-wheel performance, the production and propulsion processes need to be considered early on. Here, we lack data for fitting purely data-driven models. Instead, mechanistic models need to be leveraged that can be integrated into well-to-wheel optimization problems using machine-learning based surrogate models. By combining production and propulsion models, the molecular structure and composition of a fuel and also the production and combustion processes can be jointly optimized to achieve the optimal well-to-wheel performance.

1. Introduction

The energy transition requires efficient renewable technologies. Renewable fuels concern different complicated technologies, most notably processing of renewable resources, and the combustion in an engine. This complexity aggravates the development of efficient fuel technologies. The Integrated Fuel and Chemical Science Center (FSC²), a cluster of excellence at the RWTH Aachen University, develops methods to design renewable fuels in a holistic manner, covering technologies from production to propulsion.

Fuels need to have a high well-to-wheel efficiency in order to be economically competitive and effectively mitigate climate change. Well-to-wheel performance is influenced

by different design choices in ways not known at an early development stage. Specifically, the production process impacts the well-to-wheel performance, starting from the resources used, the selection of the process routes, the efficiency of the processes, from catalyst performance to the design of separation processes. The combustion process impacts the well-to-wheel performance depending on the efficiency of the combustion, which can be increased with engine designs that exploit the higher knock resistance of alternative fuels. Thus, the connecting element between production and propulsion is the fuel itself.

We identify two important stages of fuel design (see Figure 1). At the first stage, molecules need to be evaluated with respect to their general suitability as a fuel. For safe and practical handling, they need to be liquid at ambient conditions and not too volatile [1]. For proper fuel handling and functioning of the injection system, fuel vapor pressure and boiling temperature need to be in certain ranges [2]. Further properties like viscosity, surface tension, and enthalpy of vaporization can be tailored to improve the mixture formation in the engine [3]. Most importantly, the ignition quality needs to be evaluated to assess the suitability for spark-ignition or compression-ignition combustion [4]. For this purpose, auto-ignition indicators like the derived cetane number (DCN) [4] or research or motor octane numbers (RONs/MONs) [5, 6] can be used. In principle, ignition delay time measurements at different conditions conducted in rapid compression machines, shock tubes or constant volume combustion chambers (CVCCs) can also be used [7].

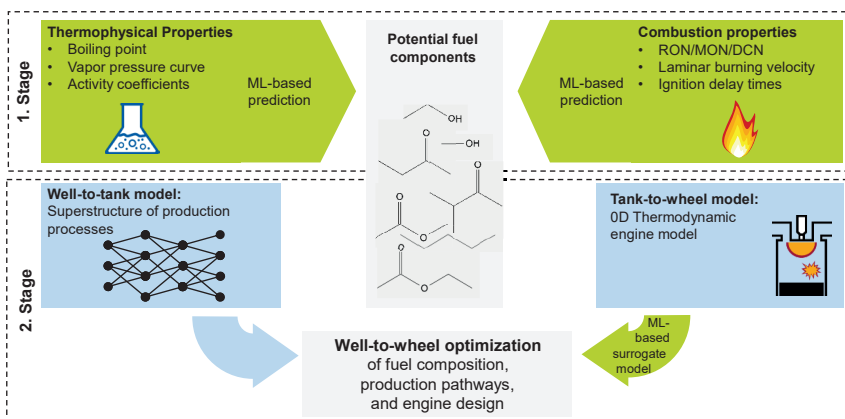


Figure 1: Overview over the systematic fuel design approach. The first stage constitutes property prediction with the end of identifying promising fuel components. The second stage constitutes the creation of well-to-tank and tank-to-wheel models with the end of well-to-wheel optimization. The green areas denote the application of machine learning models, the blue areas the application of mechanistic models.

While physical property data is available for a wide range of hydrocarbons, accurate predictions of missing data are challenging. Machine learning (ML) methods have in some cases outperformed traditional methods like group-contribution models or COSMO-RS [8, 9]. Deriving predictive models for combustion properties is particularly

challenging due to limited experimental data availability for a wide range of molecules as well as the general complexity of these properties. Here, ML-based approaches have accelerated model development in light of limited data [10].

The estimation of the production process performance is difficult as it involves complex physical phenomena not only on the scale of molecules, but also of the production plants and in between. ML methods exist to find the most efficient synthesis routes for a given molecule, but most research effort focusses on drug discovery [11], a product type that vastly differs from fuels in terms of required production volume and passable production effort. Fuel production requires very efficient use of the raw material, a small number of processing steps, and little energy effort for separation processes [12]. Moreover, fuels are usually not pure substances but multi-component mixtures. For the estimation of raw material efficiency and crude cost estimations, systematic mass-balance based comparisons offer a first assessment based on experimentally reported reactions and corresponding yields [13]. For the estimation of process emissions, the process energy demand needs to be accounted for, requiring some sort of early-stage process design. Here, shortcut-based calculations offer a trade-off between accuracy and effort [14].

Furthermore, the impact of any new fuel candidate on the propulsion system needs to be assessed. Correlations have been proposed to assess the knock resistance, e.g., the octane index [15], or the achievable engine efficiency, e.g., the so-called efficiency merit function [16]. For fuels with known combustion kinetics, thermodynamic engine models can be used to simulate engine performance. The complexity and diversity of production and propulsion models complicate a straight-forward integration into a single well-to-wheel design problem. However, ML-based surrogate models using simulation data from the complex models can enable well-to-wheel optimization [17].

This contribution reviews the ML methods developed and used within the FSC for the design of renewable fuels. First, cutting-edge ML-based property prediction methods are used to predict fuel properties for novel structures. This includes combustion properties with limited data such as ignition quality indicators and the laminar burning velocity. Then, the integration of physical models of production and propulsion using ML-based surrogate models is shown to enable the overall estimation and optimization of well-to-wheel performance.

2. From properties to fuel candidates

Predictive property models establish a quantitative relationship between the structure of the molecule and the property. Early data-driven approaches use descriptors such as the molecular weight or number of functional groups and map them to the properties by predefined functional relationships. ML models such as artificial neural networks (ANNs) enable learning such relationships from experimental data. To avoid manual selection of molecular descriptors, we use graph-neural networks (GNNs) [18]. Here, the molecule is represented as a graph, which is converted through graph convolutions into a molecular fingerprint, a vector that can be used as an input to ANNs (see Figure 2). Doing this in one step by so-called end-to-end learning allows the ML model to extract the relevant molecular features for the property from the data [10].

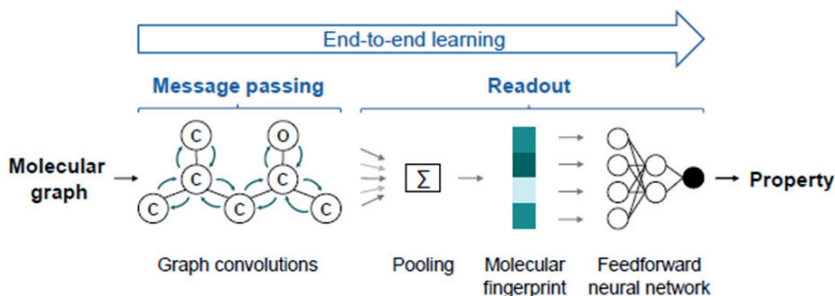


Figure 2: End-to-end learning approach for graph-neural networks (reprinted from “Graph machine learning for design of high-octane fuels” by Rittig et al. [28], licensed under CC BY 4.0.)

A key property of a fuel is the ignition quality [4]. For Diesel fuels, a high reactivity is required whereas for Otto fuels a low reactivity is desired. Established ignition quality indicators for Otto fuels are research octane number (RON) [5] and motor octane number (MON) [6], whereas cetane number (CN) [19] is used for Diesel fuels. Due to the large fuel volume needed for their determination in dedicated test engines, experimental data is relatively sparse, especially for molecule classes not used in petroleum-derived fuels. As a proxy for CN, the so-called derived cetane number (DCN) [3] can be used, which can be measured in standardized constant volume combustion chambers (CVCCs) with only small sample volumes.

RON and MON are loosely correlated, and both are somewhat inversely correlated with the DCN [20]. We exploited these correlations by training a GNN for the three properties simultaneously using multi-task learning, which outperforms creating three different models with single-task learning [10]. For advanced combustion methods, such as dual-fuel combustion, the DCN does not seem to be an optimal indicator for the high reactivity fuel [21]. We therefore expanded the GNN to predict so-called ignition delay time (IDT) maps, i.e., IDT determined in a CVCC as a function of temperature and pressure [7]. Another important combustion property is the laminar burning velocity (LBV). Here, FSC researchers trained an ANN with molecular descriptors as input [22], allowing to analyze the impact of certain functional groups on the LBV.

Fuels must also exhibit certain thermophysical properties. Importantly, volatility-related properties such as the vapor pressure, boiling points, and distillation curve need to fall into certain ranges to enable fuel handling, drivability, and cold-start. We trained GNNs for boiling points [23] and temperature-dependent vapor pressure [24]. The vapor pressure prediction is improved by using a physics-informed approach that predicts molar volumes and enthalpy of vaporization at the same time as the vapor pressure and uses the Clapeyron equation in the loss function during model training [25].

Since many renewable fuels are mixtures, capturing nonideal mixture behavior is important. Activity coefficients account for nonideal thermodynamics. For their calculations, different excess Gibbs free energy models or equations of state are typically used. However, the accurate prediction of unmeasured pairs of components remains

a challenge. We employ GNNs to predict the Gibbs free energy [26] with a model that harnesses automatic differentiation to calculate thermodynamically consistent activity coefficients.

The availability of predictive models enables the in-silico search for fuel components. The computational speed of ML-based property predictions allows screening large databases of molecules [27] or even to optimize the molecular structure using generative ML, e.g., by maximizing the octane rating of molecules [28]. Computer-aided fuel design can also include constraining the molecular space by using physical and environmental properties like the boiling point and toxicity markers [29].

3. From molecules to well-to-wheel performance

To assess the well-to-wheel performance of a novel fuel candidate, the fuel production effort must be estimated. Resource efficiency, energy demands, production cost, and carbon footprint are the most important metrics for such an assessment. Well-to-tank and tank-to-wheel performance require very different models. For the well-to-tank performance, the resource efficiency can be estimated by collecting data on the processing pathways from renewable raw materials to the fuel components and performing superstructure optimization [13, 30]. Using early-stage process design techniques, the energy demands of the reactions and downstream processes can be estimated [14, 31]. With the resource and energy demand, cost and carbon footprint can then be computed.

As the choice of fuel impacts fuel consumption and engine efficiency and therefore the tank-to-wheel performance, it is important to take the fuel combustion process in the engine into account when calculating the well-to-wheel performance. Simple algebraic correlations based on fuel properties offer a rough estimate [16, 32]. More complicated engine models have also been developed [33] and adapted to include sub-models based on alternative fuels [34]. Recently, an engine model for the prediction of pollutant emissions based on engine operation has been proposed, albeit only for methanol as a fuel [35].

Engine models can be combined with production process superstructures to achieve well-to-wheel optimization. Zhang et al. combined an algebraic engine model with a process network to optimize ethanol gasoline blends [36]. To couple engine efficiency with fuel consumption, they established a simple correlation that assumes that gained engine efficiency directly translates into lower fuel consumption. To use a more complex engine model containing ordinary differential equations, we simulate the engine performance as a function of fuel and engine design and learn this input-output relationship with an ANN, as ANNs can be efficiently integrated into the superstructure optimization [17].

We applied well-to-wheel fuel design to a case study in which we compare the different fuel types: drop-in fuels, alternative fuels with broad specifications with a RON requirement of minimum 90, and alternative fuels with high octane requirements tailored to ultra-high efficiency engines with a RON requirement of minimum 110 [17]. To this end,

we assembled a case study with renewable fuel components from biomass and electricity. Furthermore, the methanol-to-gasoline process was added as a benchmark for renewable gasoline production.

For this case study, we minimize the well-to-wheel cost and global warming impact (GWI) in a bi-objective optimization problem, resulting in a pareto front that illustrates the tradeoff between these two objectives (cf. Figure 3). The results of this analysis show that a high RON restriction can impair well-to-wheel performance. Drop-in fuels perform significantly worse than alternative fuels, as drop-in fuels have stricter property limits. No alternative fuel outperforms fossil gasoline in terms of cost, but all designed alternative fuels exhibit a much lower carbon footprint. For details, the reader is referred to the original publication [17].

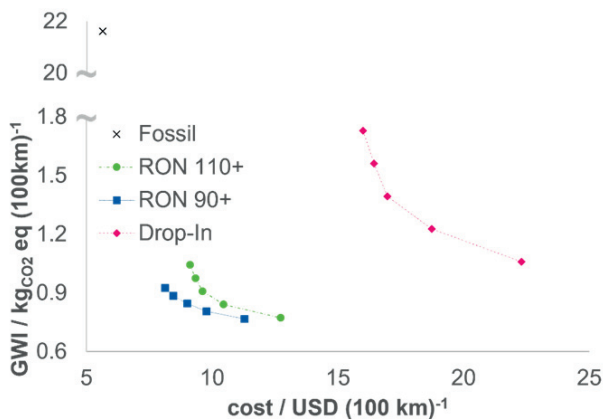


Figure 3: Well-to-wheel performance for different fuels: RON 110+ refers to alternative fuels with a RON requirement of minimum 110, RON 90+ to the alternative fuels with a RON requirement of minimum 90, and Drop-in refers to fuels with requirements derived from the current European E10 fuel standard (adapted from “Well-to-Wheel Design of Renewable Fuels for Future Spark-Ignition Engines” by Ackermann et al. [17], licensed under CC BY 4.0.).

4. Conclusion

ML can be applied in various ways to design fuels. First, ML helps to predict properties to assess new molecules. Furthermore, ML can assist in finding new molecules. To design fuels for optimal well-to-wheel performance, mechanistic models are used to predict the performance of production processing steps and fuel combustion in the engine. To combine these models for the optimization of the well-to-wheel performance, ML is used to create nonlinear surrogate models that can be embedded into superstructure optimization. In future work, we aim at developing predictive models for material compatibility of new fuel candidates, and more detailed models of drop-in fuel production processes, which will possibly require further ML-based surrogate models.

Acknowledgements

The authors gratefully acknowledge funding by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG, German Research Foundation) under Germany's Excellence Strategy - Cluster of Excellence 2186 "The Fuel and Chemical Science Center" (ID: 390919832) and under the Priority Programme "SPP 2331: Machine Learning in Chemical Engineering" (ID: 466417970). AM and MD received funding from the Helmholtz Association of German Research Centers.

Model training was performed with computing resources granted by RWTH Aachen University. The authors thank René Görden for his software engineering support.

Literature

- [1] McCormick, R. L., Fioroni, G., Fouts, L., Christensen, E., Yanowitz, J., Polikarpov, E., Albrecht, K., Gaspar, D. J., Gladden, J., and George, A. "Selection criteria and screening of potential biomass-derived streams as fuel blendstocks for advanced spark-ignition engines." *SAE International Journal of Fuels and Lubricants* 10.2017-01-0868 (2017): 442-460.
- [2] DIN German Institute for Standardization Automotive fuels - Unleaded petrol - Requirements and test methods; German version EN 228:2012+A1:2017, Berlin.
- [3] Dahmen, M., and Marquardt, W. "Model-based design of tailor-made biofuels." *Energy & Fuels* 30.2 (2016): 1109-1134.
- [4] American Society for Testing. ASTM D 6890: Standard Test Method for Determination of Ignition Delay and Derived Cetane Number (DCN) of Diesel Fuel Oils by Combustion in a Constant Vol. Chamber, 2011.
- [5] American Society for Testing and Materials. ASTM D 2699: Standard Test Method for Research Octane Number of Spark-Ignition Engine Fuel, 2018.
- [6] American Society for Testing and Materials. ASTM D 2700: Standard Test Method for Motor Octane Number of Spark-Ignition Engine Fuel, 2019.
- [7] Neumann, M., Rittig, J. G., Letaief, A. B., Honecker, C., Ackermann, P., Mitsos, A., Dahmen, M., and Pischinger, S. "Fuel ignition delay maps for molecularly controlled combustion." *Energy & Fuels* 38.14 (2024): 13264-13277.
- [8] Jirasek, F., and Hasse, H. "Perspective: Machine learning of thermophysical properties." *Fluid Phase Equilibria* 549 (2021): 113206.
- [9] Winter, B., Winter, C., Schilling, J., and Bardow, A. "A smile is all you need: predicting limiting activity coefficients from SMILES with natural language processing." *Digital Discovery* 1.6 (2022): 859-869.
- [10] Schweidtmann, A. M., Rittig, J. G., König, A., Grohe, M., Mitsos, A., and Dahmen, M. "Graph neural networks for prediction of fuel ignition quality." *Energy & Fuels* 34.9 (2020): 11395-11407.
- [11] Zhong, Z., Song, J., Feng, Z., Liu, T., Jia, L., Yao, S., Hou, T., and Song, M. "Recent advances in deep learning for retrosynthesis." *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science* 14.1 (2024): e1694.

- [12] König, A., Marquardt, W., Mitsos, A., Viell, J., and Dahmen, M. "Integrated design of renewable fuels and their production processes: recent advances and challenges." *Current Opinion in Chemical Engineering* 27 (2020): 45-50.
- [13] Voll, A., and Marquardt, W. "Reaction network flux analysis: Optimization-based evaluation of reaction pathways for biorenewables processing." *AIChE Journal* 58.6 (2012): 1788-1801.
- [14] Ulonska, K., Skiborowski, M., Mitsos, A., and Viell, J. "Early-stage evaluation of biorefinery processing pathways using process network flux analysis." *AIChE Journal* 62.9 (2016): 3096-3108.
- [15] Kalghatgi, G. T. Fuel anti-knock quality-Part II. Vehicle Studies - how relevant is Motor Octane Number (MON) in modern engines?. No. 2001-01-3585. SAE Technical Paper, 2001.
- [16] Szybist, J. P., Busch, S., McCormick, R. L., Pihl, J. A., Splitter, D. A., Ratcliff, M. A., Kolodziej, C. P., Storey, J. M., Moses-DeBusk, M., Vuilleumier, D., Sjöberg, M., Sluder, C. S., Rockstroh, T., and Miles, P. "What fuel properties enable higher thermal efficiency in spark-ignited engines?." *Progress in Energy and Combustion Science* 82 (2021): 100876.
- [17] Ackermann, P., Panofen, M., Burkardt, P., Lehrheuer, B., Viell, J., Pischinger, S., Mitsos, A., and Dahmen, M. "Well-to-Wheel Design of Renewable Fuels for Future Spark-Ignition Engines." *Energy & Fuels* 40.8 (2026): 4207-4215.
- [18] Coley, C. W., Barzilay, R., Green, W. H., Jaakkola, T. S., and Jensen, K. F. "Convolutional embedding of attributed molecular graphs for physical property prediction." *Journal of chemical information and modeling* 57.8 (2017): 1757-1772.
- [19] American Society for Testing and Materials. ASTM D 613: Standard Test Method for Cetane Number of Diesel Fuel Oil, 2015.
- [20] Perez, P. L., and Boehman, A. L. "Experimental investigation of the autoignition behavior of surrogate gasoline fuels in a constant-volume combustion bomb apparatus and its relevance to HCCI combustion." *Energy & fuels* 26.10 (2012): 6106-6117.
- [21] Honecker, C., Lehrheuer, B., Pischinger, S., and Heufer, K. A. "Molecularly-controlled high swirl combustion system for ethanol/1-octanol dual fuel combustion." *Fuel* 345 (2023): 128184.
- [22] Vom Lehn, F., vom Lehn, F., Cai, L., Caceres, B. C., and Pitsch, H. "Exploring the fuel structure dependence of laminar burning velocity: A machine learning based group contribution approach." *Combustion and Flame* 232 (2021): 111525.
- [23] Rittig, J. G., Gao, Q., Dahmen, M., Mitsos, A., and Schweidtmann, A. M. "Graph neural networks for the prediction of molecular structure–property relationships." (2023).
- [24] Pavšek, J., Mitsos, A., Dahmen, M., Tan, T. X., and Rittig, J. G. "DeepEOSNet: Capturing the dependency on thermodynamic state in property prediction tasks." *arXiv preprint arXiv:2509.17018* (2025).
- [25] Pavšek, J., Mitsos, A., Sim, E. J., and Rittig, J. G. "Clapeyron Neural Networks for Single-Species Vapor-Liquid Equilibria." *arXiv preprint arXiv:2602.18313* (2026).
- [26] Rittig, J. G., and Mitsos, A. "Thermodynamics-consistent graph neural networks." *Chemical Science* 15.44 (2024): 18504-18512.

- [27] Vom Lehn, F., Cai, L., Tripathi, R., Broda, R., and Pitsch, H. "A property database of fuel compounds with emphasis on spark-ignition engine applications." *Applications in Energy and Combustion Science* 5 (2021): 100018.
- [28] Rittig, J. G., Ritzert, M., Schweidtmann, A. M., Winkler, S., Weber, J. M., Morsch, P., Heufer, K. A., Grohe, M., Mitsos, A., and Dahmen, M. "Graph machine learning for design of high-octane fuels." *AIChE journal* 69.4 (2023): e17971.
- [29] Fleitmann, L., Ackermann, P., Schilling, J., Kleinekorte, J., Rittig, J. G., Vom Lehn, F., Schweidtmann, A. M., Pitsch, H., Leonhard, K., Mitsos, A., Bardow, A., and Dahmen, M. "Molecular design of fuels for maximum spark-ignition engine efficiency by combining predictive thermodynamics and machine learning." *Energy & Fuels* 37.3 (2023): 2213-2229.
- [30] Bao, B., Ng, D. K. S., Tay, D. H. S., Jiménez-Gutiérrez, A., and El-Halwagi, M. M. "A shortcut method for the preliminary synthesis of process-technology pathways: An optimization approach and application for the conceptual design of integrated biorefineries." *Computers & Chemical Engineering* 35.8 (2011): 1374-1383.
- [31] Kim, J., Sen, M., and Maravelias, C. T. "An optimization-based assessment framework for biomass-to-fuel conversion strategies." *Energy & Environmental Science* 6.4 (2013): 1093-1104.
- [32] Leone, T. G., Anderson, J. E., Davis, R. S., Iqbal, A., Reese, R. A., Shelby, M. H., and Studzinski, W. M. "The effect of compression ratio, fuel octane rating, and ethanol content on spark-ignition engine efficiency." *Environmental science & technology* 49.18 (2015): 10778-10789.
- [33] Gschwend, D., Soltic, P., Edinger, P., Wokaun, A., and Vogel, F. "Performance evaluation of gasoline alternatives using a thermodynamic spark-ignition engine model." *Sustainable Energy & Fuels* 1.9 (2017): 1991-2005.
- [34] Ackermann, P., et al. "Computational Co-optimization of Fuel and Spark-Ignition Engine." *Energy & Fuels* 39.8 (2025): 4079-4093.
- [35] Esposito, S., Malfi E., De Felice, M., Golc, D., Beeckmann, J., Pitsch, H., and De Bellis, V. "Methanol fuelling of a spark-ignition engine: Experiments and 0D/1D predictive modelling for combustion, performance, and emissions." *Fuel* 393 (2025): 134657.
- [36] Zhang, B., and Sarathy, S. M. "Lifecycle optimized ethanol-gasoline blends for turbocharged engines." *Applied Energy* 181 (2016): 38-53.

Experimentelle Untersuchung der turbulenten heißen Freistrahzündung magerer H₂/Luft-Gemische

Jacqueline Höltkemeier-Horstmann

1. Motivation

Angesichts des Klimawandels und der geltenden Beschränkungen für Treibhausgasemissionen ist Wasserstoff, als Kohlenstoff-freier Brennstoff, ein attraktiver Energieträger für Anwendungen wie Schwerlastmotoren und Langstrecken-LKW, wann immer eine Elektrifizierung nicht möglich ist. Vorteile des H₂-Verbrennungsmotors sind die hohe Leistungsdichte, geringe Herstellungskosten, mechanische Robustheit und die geringeren Anforderungen an Kraftstoffreinheit [1]. Aufgrund der hohen adiabatischen Flammentemperatur entstehen bei konventioneller Verbrennung jedoch hohe Stickoxidemissionen. Durch Abgasrückführung, Wassereinspritzung oder die Verwendung magerer Gemische lassen sich diese erheblich senken. Allerdings wird bei höheren Luft/Brennstoff-Äquivalenzverhältnissen mehr Energie zur Zündung benötigt, und die Verbrennungseffizienz nimmt aufgrund der niedrigeren laminaren Flammgeschwindigkeit ab. Die turbulente heiße Freistrahzündung (THJI) löst beide Probleme. In einer kleinen Vorkammer wird ein (nahezu) stöchiometrisches Gemisch mittels einer Zündkerze gezündet. Durch eine oder mehrere verbindende Düsen gelangen heiße Abgasfreistrahlen in die Hauptkammer und können eine großvolumige Zündung auslösen, die in einer schnelleren Verbrennung resultiert [2]. Erste Studien in Forschungsmotoren zeigen, dass ein nahezu NO_x-freier Betrieb möglich ist [1,3]. Das Ziel dieser Arbeit ist die Charakterisierung verschiedener Einflussparameter auf die THJI in einem Modellaufbau zur Verbesserung des Verständnisses der Zündprozesse.

2. Experimentelle Methodik

Um den Einfluss verschiedener Parameter, wie Düsendurchmesser, -geometrie, H₂-Konzentration, Temperatur und Druck auf die turbulente heiße Freistrahzündung zu untersuchen, werden die dynamischen Drücke in Vor- und Hauptkammer gemessen und zeitgleich Hochgeschwindigkeits-Bilderserien mit einem Schlieren-System sowie des OH-Eigenleuchtens aufgenommen. Als Referenz dienen Experimente mit Funkenzündung in der Hauptkammer. Dabei wurden vier Parameter evaluiert: Der Maximaldruck, die mittlere sowie die maximale Druckanstiegsrate als Maß für die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Verbrennungsreaktion und der Zeitpunkt des Druckmaximums in der Hauptkammer als zusätzlicher Parameter, da er die Verbesserung durch die THJI eindrücklicher zeigt. Mit den Schlieren-Serien können Zündung und Flammenausbreitung visualisiert werden sowie die Geschwindigkeit des kalten Freistrahls ermittelt werden. Die Aufnahme des OH-Eigenleuchtens dient der Visualisierung des Zündortes, des Zündverhaltens sowie der zeitlichen Entwicklung der Flammenfront. Derzeit erprobt wird die Ermittlung der Geschwindigkeit des heißen Freistrahls aus diesen Bildern.

3. Ergebnisse

Die THJI führt zu einer signifikanten Verbesserung der Verbrennungsgeschwindigkeit im Vergleich zur Funkenzündung. Die Zündgrenzen verschieben sich erheblich zu mageren Hauptkammer-Gemischen, wenn der Düsendurchmesser oder der H_2 -Anteil in der Vorkammer erhöht wird. Hier nimmt die Zündfähigkeit also zu. Die Geschwindigkeit des kalten Freistrahls steigt ebenfalls an. Außerdem steigert die THJI signifikant den maximal erreichten Druck sowie die Druckanstiegsrate und verbessert damit die gesamte Verbrennungsreaktion. In Bild 1 ist eine exemplarische Schlieren- und OH^* -Serie gezeigt, die verschiedene Entwicklungsstadien des Freistrahls sowie den Zündprozess und die nachfolgende Flammenausbreitung zeigt.

Alle bisherigen Experimente wurden unter den Ausgangsbedingungen Raumtemperatur und Umgebungsdruck in einer vorhandenen Messkammer durchgeführt. Zeitgleich mit diesen ersten Experimenten wurde ein zweiter Aufbau entwickelt, der einem Maximaldruck von 150 bar standhält, sowie eine Erwärmung des Gasgemisches auf 700 K (vor Zündung) erlaubt. Im ersten Teil der Experimente wurden drei Einflussparameter im Detail untersucht, außerdem konnten Erfahrungen hinsichtlich der Messtechnik und der Auswertungsroutinen gesammelt werden. Aus den Ergebnissen dieser Experimente wurde für den zweiten Teil eine sinnvolle reduzierte Messmatrix für Experimente unter motornäheren Bedingungen erstellt. Damit sollen in Zukunft Experimente durchgeführt werden, die den Einfluss von Temperatur und Druck vor der Zündung auf alle bisher ausgewerteten Parameter untersuchen.

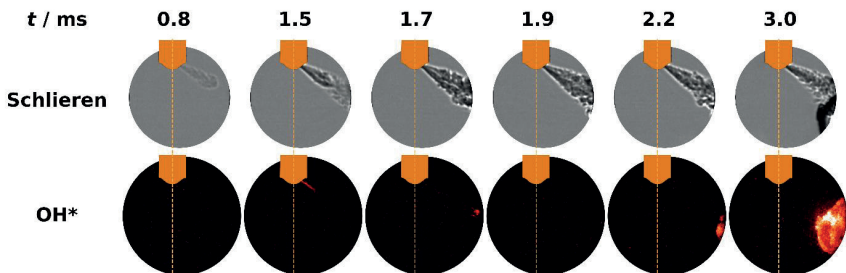


Bild 1: Exemplarische Schlieren- und OH^* -Bilder aus einer simultanen Bilderserie.

Düse: gewinkelte Einzeldüse mit $d = 1.2 \text{ mm}$,

Verbrennungsluftverhältnisse: Vorkammer $\lambda_{PC} = 1.0$, Hauptkammer $\lambda_{MC} = 2.3$.

Literatur

- [1] Dinkelacker et al., „Abschlussbericht Innovationslabor Nachhaltige Wasserstoff-Verbrennungskonzepte (WaVe)“, *EFZN Forschung*, **2025**.
- [2] Biswas, Qiao, “Prechamber Hot Jet Ignition of Ultra-Lean H_2 /Air Mixtures: Effect of Supersonic Jets and Combustion Instability”, *SAE Int. J. Engines* 9(3):1584-1592, **2016**.
- [3] Hamori, Watson, “Hydrogen Assisted Jet Ignition for the Hydrogen Fuelled SI Engine”, *16th WHEC*, **2006**.

Verbesserte Verbrennungsanalyse mittels 3D-Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy an Ammoniak-Gemischen

Niklas Warnecke

1. Motivation

Die Energiekrise hat das Interesse an alternativen Treibstoffen wie Ammoniak geweckt [1]. Ammoniak als Gemisch, z. B. mit Wasserstoff [2], sticht als CO₂-freie Energiequelle mit bestehenden Produktionsanlagen und im Vergleich zu Wasserstoff effizientem Transport und Lagerung hervor. Für optimierte Gemische und Verbrennungsbedingungen mit maximaler Effizienz und minimaler Emission ist aber eine präzise und idealerweise räumlich aufgelöste Analyse der Flammenstruktur und Reaktionskinetik nötig.

Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy (TDLAS) stellt als präzise optische Messmethode für Temperatur und Stoffmengenkonzentration eine gute Basis hierfür da. TDLAS ist aber traditionell nicht ortsvariabel. Vergangene Absorptionsmessungen haben gezeigt, dass eine solche Erweiterung sehr produktiv ist [3]. Das Ziel dieser Arbeit ist, ein 3D-TDLAS System aufzubauen und mit diesem die Konzentrations- und Temperaturverteilung von Ammoniak-Wasserstoff-Gemischen zu analysieren.

2. Messkonzept und Messaufbau

2.1 Messkonzept

Bei TDLAS werden Lasersignale verschiedener, spezifischer Wellenlängen durch die zu analysierende Spezies zu einem Detektor gesendet. Da verschiedene Spezies charakteristische Absorptionen bei spezifischen Wellenlängen haben, misst dies die Konzentration einzelner Spezies. 2-Linien-Thermometrie erlaubt die Messung der Temperatur anhand der sich ändernden Absorptionswellenlänge. Im 3D-System wird zudem die Differenz in der Absorption abhängig vom Ort betrachtet: Die Reaktionskinetik kann über die Differenz innerhalb der Absorption der Pro- und Edukte über den Verlauf der Flamme/des Reaktionssystems festgestellt werden. Hohe Differenzen in der Absorptionswellenlänge machen zudem Hotspots erkennbar.

2.2 Messaufbau

Um ein TDLAS-System für einen räumlichen Scan einzusetzen, wird ein System aus zwei Linearachsen genutzt. Diese bewegen sich in der Ebene parallel zur Flamme und erlauben so einen 2D-Scan. Für einen 3D-Scan werden die Achsen auf einer Rotationsplattform mit einer inneren Aussparung für die Flamme positioniert.

An den Achsen sind Platten mit Halterungen für Glasfasern befestigt. Diese führen das Lasersignal vom Laser zur Halterung bzw. von der Halterung zum Detektor. So muss

nicht der gesamte Aufbau bewegt werden, um ortsvariabel zu messen. Der Laser wird in mehrere Strahlen aufgeteilt, die parallel die Flamme abscannen. Dies erlaubt zeitgleiche Messungen an verschiedenen Orten. Der Aufbau ist in Bild 1 skizziert.

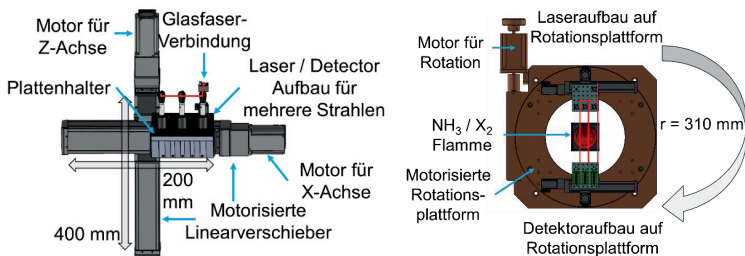


Bild 1: links: 2D-Aufbau, rechts: 3D-Aufbau (X_2 = Gemischkomponente, z. B. H_2)

3. Messungen

Es werden Messungen für Flammen von Ammoniak-Wasserstoff-Gemischen bei variablen Mischverhältnissen durchgeführt. Dies erfolgt für NH_3 , NO_2 und H_2O sowie die Temperatur anhand der ortsabhängig gemessenen Absorptionswellenlänge von H_2O . Auf dieser Basis wird ein 3D-Modell der Spezies erstellt. Es folgt die Identifikation der örtlichen Reaktionen. Grenzflächen und über die Temperaturmessung ermittelte Hotspots sind hierbei im Fokus. Über die Messung von NO_2 werden die Bedingungen für ungewollte Stickoxid-Bildung präzise ermittelt.

4. Fazit

Diese Arbeit stellt eine neue Modifikation bestehender TDLAS-Analysetechnik dar. Sie kann die chemische Struktur und Temperaturverteilung in Flammen von Ammoniak-Gemischen analysieren. Dies erlaubt Rückschlüsse über die zugehörige Chemie. Somit können Grundlagen für die Kraftstoffoptimierung gesetzt werden. Der Aufbau hat zudem hohes Potenzial in der Anwendung für Verbrennungsprozesse anderer Ammoniakgemische und Kraftstoffe im Allgemeinen.

Literatur

- [1] Valera-Medina et al. (2018). Ammonia for power. Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 69, pp. 63–102, DOI: 10.1016/j.pecs.2018.07.001
- [2] Awad et al. (2022). Characteristics of NH_3/H_2 blend as carbon-free fuels: A review. International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 47, pp. 36819–36846, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2022.09.096
- [3] McDonald, A. et al. (2025). Laser absorption spectroscopy measurements of temperature and CO profiles in opposed-flow diffusion flames of HTPB. Combustion and Flame, Vol. 279, 114325, DOI: 10.1016/j.combustflame.2025.114325.

Onboard Multi-Fuel Classification for Diesel Engines — Infrastructure and Methodology

Florian Zacherl

1. Introduction

The share of renewable fuels in diesel transport is rising worldwide, including paraffinic fuels (HVO - Hydrotreated Vegetable Oil; FT - Fischer-Tropsch) as drop-in replacements and fatty acid methyl esters (FAME) as blending components, both contributing to a substantially reduced carbon footprint when produced from renewable sources.

However, their widespread deployment requires reliable knowledge of which fuel is present in the injection system. CO₂ verification along the supply chain requires detection of fraudulent blending with fossil diesel. Furthermore, engine calibration (injection timing, rail pressure, ...) must adapt to fuel-specific properties to comply with emission limits and to prevent potential engine damage.

Dedicated hardware fuel sensors (optical-dielectric, calorimetric) exist but require additional installation, are costly, and cannot be retrofitted into existing fleets. Existing software approaches either rely on additional hardware (e.g. cylinder pressure sensors), are limited to a narrow fuel subset, or lack physically interpretable intermediate quantities. No known approach combines exclusively series-production sensors, physically grounded features, Machine Learning (ML) based multi-fuel classification, and validation across multiple injection systems.

The central hypothesis is that fuel-specific differences in density ρ , kinematic viscosity ν , heating value H_u , and cetane number CN produce measurable signatures across multiple engine subsystems ranging from injection line pressure dynamics $p(t)$ and injection rate $\dot{m}(t)$ to combustion heat release and exhaust behavior.

2. Infrastructure & Methodology

Figure 1 illustrates the complete research infrastructure and methodology pathway. Design of experiments (DoE) guided campaigns run on two test bench families: the injection system test bench (Pump-Line-Nozzle + Common-Rail (CR)) isolates hydraulic fuel property effects; the engine test bench (three CR variants with identical part numbers and ECU software versions) adds combustion-domain signals. Raw data from the test benches is unified via a data unification tool, linked to a fuel properties database ($\rho(p, T)$, $\nu(T)$, c_p , CN , H_u , GC composition for EN590, HVO, FT diesel, B100, ISO 4113) and stored in a unified data store (UDS). The unification enables bench comparison to quantify manufacturing-induced scatter across systems, providing the basis for model transferability validation. The UDS implements research data management (RDM) following FAIR principles (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) according to DFG guidelines.

Physics-informed feature extraction maps series-production signals to interpretable fuel properties, enabling virtual sub-sensors for otherwise inaccessible physical quantities. These features feed a hybrid Physics-ML model for multi-fuel classification and property prediction, combining physical robustness with data-driven flexibility and cross-system transferability. The fuel properties database serves as direct validation anchor for both extracted features and model outputs.

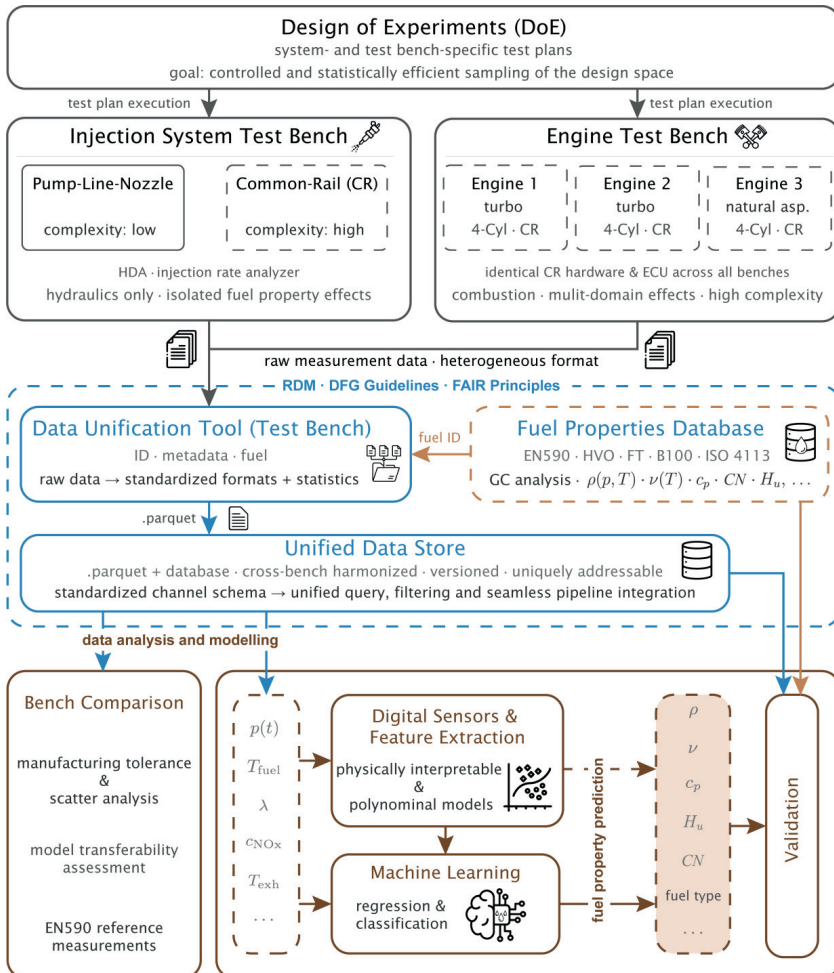


Fig. 1: Research infrastructure and data pipeline — DoE-guided test campaigns on injection system and engine test benches, FAIR-compliant data unification (Data Unification Tool → Unified Data Store), physics-informed feature extraction, and machine-learning-based fuel parameter classification validated against a comprehensive fuel property database.

eMethanol mit erhöhtem Wasseranteil in einem Rangeextender mit Abgasturbolader

Maximilian Dobberkau, Frank Atzler, Ronny Werner

1. eMethanol-Produktion

Methanol weist eine vergleichsweise hohe Volumen- und Energiedichte von 4,4 kWh/l auf, liegt unter Standard-Umgebungsbedingungen (101 325 Pa und 293 K) in flüssiger Form vor und kann über die derzeitige weltweite Infrastruktur verteilt werden. Darüber hinaus ist Methanol ein gängiger Grundstoff, dessen Syntheseverfahren gut bekannt und skalierbar ist. Daher wird es in der Wasserstoff-Importstrategie als Wasserstoffderivat [1] für den zukünftigen Energiehandel aufgeführt. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass ein Kompromiss zwischen einem sehr praktischen Energieträger und einem langwierigen Produktionsprozess mit entsprechend hohem Energiebedarf besteht. Daher ist es entscheidend, die gesamte „Well-to-Wheel“-Kette zu betrachten, um die Effizienz zu maximieren. Methanol wird in der Regel auf eine Reinheit von über 99,9 % destilliert. Die Kolbenmaschine als Energiewandler ist prinzipbedingt unempfindlich gegen Verunreinigungen im Kraftstoff. Daher bietet sich das Potential, die Destillationsenergie teilweise oder gänzlich zu sparen bzw. anderweitig zu nutzen, wenn das synthetisierte Methanol im Verbrennungsmotor genutzt werden soll. Damit kann die Gesamtwirkungsgradkette (Well-to-Wheel) gesteigert werden, falls vergleichbare Wirkungsgrade in der Kolbenmaschine erreicht werden.

2. eMethanol im Verbrennungsmotor

Methanol bietet bei der Verwendung in einem fremdgezündeten Verbrennungsmotor erhebliche Vorteile gegenüber herkömmlichem Superbenzin. Es verfügt über eine vergleichsweise hohe Verdampfungsenthalpie, was zu niedrigeren Verbrennungstemperaturen führt. Daraus resultieren geringere Wärmeverluste sowie eine deutlich reduzierte Neigung zur unkontrollierten Selbstentflammung (Klopfen), was deutliche Wirkungsgradsteigerungen durch eine thermodynamisch optimale Verbrennungslage ermöglicht. Mit Erhöhung der Wassermenge im Kraftstoff sinkt die Verbrennungstemperatur weiter, wodurch die vorteilhaften Eigenschaften von Methanol verstärkt werden. Dies ist auf zwei Effekte zurückzuführen: Wasser hat eine noch höhere Verdampfungsenthalpie als Methanol, und verdampftes Wasser wirkt als Verdünnungsmittel für das Arbeitsgas (vgl. Abgasrückführung), wodurch die Gesamtwärmekapazität der Zylinderfüllung erhöht wird. Beide Effekte senken die Temperatur des Arbeitsgases und damit den Wandwärmeverlust. Darüber hinaus kann der Motor in der Teillast entdrosselt werden, was die Ladungswechselarbeit verringert. Eine übermäßige Verdünnung des Arbeitsgases kann jedoch zu einer verlängerten Verbrennung und sogar zu lokalem Flammenauslösungen führen, was sich nachteilig auf den Wirkungsgrad auswirkt und die Emissionen von unverbranntem HC und CO erhöht. Daher gibt es für jeden Motorbetriebspunkt einen theoretisch optimalen Wassergehalt, welcher im Betrieb jedoch nicht variiert werden kann. In Bild 1 sind die erzielten indizierten Wirkungsgrad-

kennfelder mit destilliertem Methanol (Reinheit >99.9%) und nicht destilliertem Methanol aus Industrieabgasen mit einem Wassergehalt von ~18.33 % gegenübergestellt.

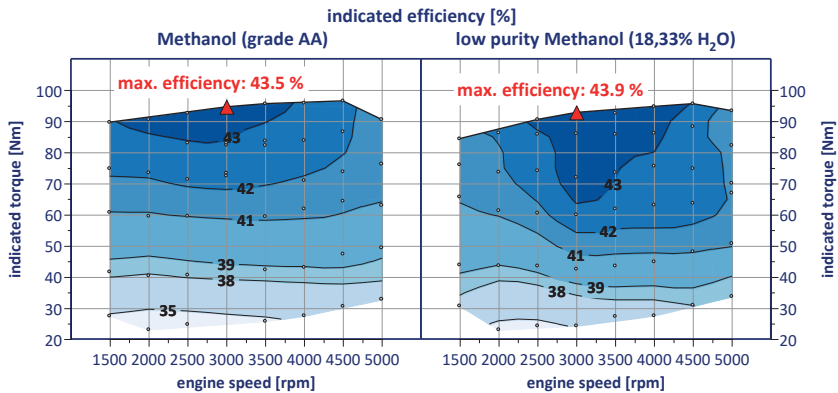


Bild 1: Indizierter Wirkungsgrad im Betriebskennfeld mit reinem Methanol (links) und wasserhaltigem Methanol (rechts)

Die zur Berechnung der Wirkungsgrade notwendigen unteren Heizwerte betragen 19,96 kJ/kg (grade AA) und 15,8 kJ/kg (18,33% Wasser). Der errechnete Wirkungsgrad für das wasserhaltige Methanol liegt sogar über dem für reines Methanol, wobei die höheren Wirkungsgrade tendenziell zu höheren Drehzahlen verschoben sind. Die Steigerung im Wirkungsgrad ist mit einem kühleren Verbrennungsprozess durch die hohe zusätzliche Verdampfungsenthalpie und die höhere Wärmekapazität im Abgas zu erklären. Damit sinkt der Wandwärmeverlust. Die Abgastemperatur sinkt ebenfalls um 50 K. Der maximale indizierte Mitteldruck liegt im gesamten Drehzahlband unter dem von Methanol, da die größere Kraftstoffmasse den Liefergrad verringert. Bei geringen Drehzahlen ist das Mitteldruckdefizit am größten, da der kühlerer Brennraum und die geringere Flammgeschwindigkeit zu einem frühzeitigen Erlöschen der Flamme führt, was sich in einer erhöhten Emission von unverbranntem Methanol zeigt. Nach Katalysator wurde dank stöchiometrischem Motorbetrieb keine Emissionserhöhung gemessen. Speziell im unteren Drehzahlbereich ergibt sich somit eine sehr hohe Exothermie über dem Drei-Wege-Katalysator. Die damit erhöhte Abgasenthalpie kann durch Anordnung eines Abgasturboladers stromabwärts nach Katalysator zur Wirkungsgradsteigerung genutzt werden, wobei fehlende Dynamik durch Erhöhung des Abgasvolumens vor der Turbine im hybridisierten Antriebsstrang elektrisch kompensiert werden kann.

Literatur

- [1] Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz (BMWK), Importstrategie für Wasserstoff und Wasserstoffderivat, Stand Juli 2024

Validierung eines ternären Diesel-Surrogats in brennerstabilisierten Niederdruckflammen

Ewald Keksel

1. Abstract

Surrogatkraftstoffe werden eingesetzt, um die Verbrennungseigenschaften realer Kraftstoffe mithilfe definierter Kohlenwasserstoffmischungen nachzubilden [1]. In dieser Arbeit wird ein ternäres Surrogat aus n-Dodecan, 1-Methylnaphthalin und Isooctan untersucht. Diese Komponenten repräsentieren wichtige Stoffklassen realer Kraftstoffe: langkettige Alkane, aromatische Verbindungen und verzweigte Alkane [2–4].

Im Gegensatz zu Untersuchungen an Einzelkomponenten erlaubt das ternäre Surrogat die gleichzeitige Betrachtung aliphatischer, verzweigter und aromatischer Reaktionspfade in einem gemeinsamen Flammensystem. Dadurch können nicht nur die Oxidationswege der einzelnen Komponenten, sondern auch ihre gegenseitige chemische Beeinflussung experimentell überprüft werden. Der Datensatz ist daher besonders geeignet, Mechanismen zu validieren, die auf reale Kraftstoffmischungen und nicht nur auf Reinsubstanzen angewendet werden sollen.

Die Untersuchungen erfolgen in laminaren, vorgemischten Niederdruckflammen unter kraftstoffreichen, stöchiometrischen und kraftstoffarmen Bedingungen bei 40 mbar. Durch eine stabile Verdampfung und Zufuhr des Brennstoffgemisches konnten brennerstabilisierte Flammen auf einem Matrixbrenner realisiert werden. Die Flammenstruktur wurde mithilfe von Elektronenionisations-Flugzeit-Massenspektrometrie sowie Temperaturmessungen charakterisiert [5]. Dabei wurden Konzentrationsprofile wichtiger Spezies und Temperaturverläufe ermittelt, die als quantitative Grundlage zur Validierung chemisch-kinetischer Reaktionsmechanismen dienen.

Zusätzlich wurden numerische Simulationen mit verschiedenen detaillierten Reaktionsmechanismen durchgeführt [1,6,7]. Bild 1 verdeutlicht, dass die experimentellen Daten über drei Äquivalenzverhältnisse hinweg konsistente Trends zeigen. Damit eignet sich der Datensatz zur Überprüfung der verwendeten Reaktionsmechanismen. Die Übereinstimmung zwischen den gemessenen Hauptspeziesprofilen und den Simulationen mit dem Bagheri-Mechanismus [6] zeigt, dass die grundlegende Oxidation des Surrogats erfasst wird, während verbleibende Abweichungen auf Unsicherheiten in der detaillierten Kraftstoff- und Zwischenproduktchemie hinweisen.

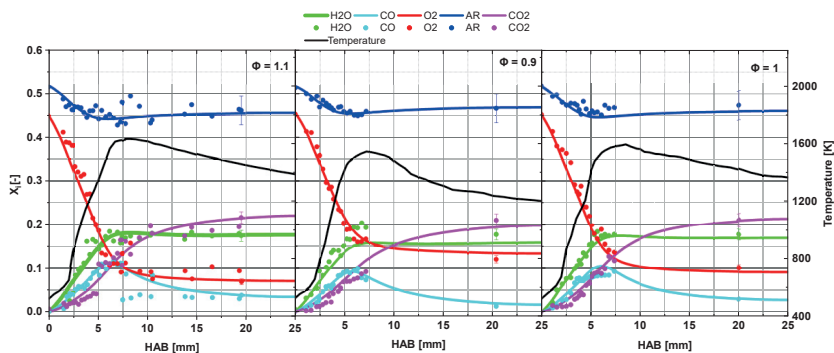


Bild 1: Hauptspezies- und Temperaturprofile der drei untersuchten Flammen. Durchgezogene Linien: Simulation mit [6]; Punkte: Messdaten

Reaktionspfad-, Produktionsraten- und Sensitivitätsanalysen verdeutlichen, dass insbesondere die Wechselwirkungen zwischen den Kraftstoffkomponenten eine wichtige Rolle spielen. Dabei beeinflussen sich aliphatische Reaktionspfade, aromatische Zwischenprodukte aus 1-Methylnaphthalin und verzweigte Alkan-Komponenten gegenseitig.

Die Ergebnisse liefern damit neue experimentelle Validierungsdaten für die Weiterentwicklung detaillierter Verbrennungsmechanismen und zeigen, dass die Kopplung zwischen aliphatischer und aromatischer Chemie für die Beschreibung von Surrogatkraftstoffen wesentlich ist.

Literatur

- [1] S. Dong et al., A new detailed kinetic model for surrogate fuels: C3MechV3.3, Appl. Energy Combust. Sci. 9, 2022.
- [2] K. Narayanaswamy et al., A chemical mechanism for low to high temperature oxidation of n-dodecane, Combust. Flame 161, 2014.
- [3] Z. Liu et al., Chemical kinetic study of gasoline surrogate with ammonia on combustion: Iso-octane modeling, Fuel 365, 2024
- [4] J. Liang et al., Development of a Detailed Chemical Kinetic Model for 1-Methylnaphthalene, Molecules 29, 2024
- [5] N. Hansen et al., Recent contributions of flame-sampling molecular-beam mass spectrometry to a fundamental understanding of combustion chemistry, Progress in Energy and Combustion Science 35, 2009
- [6] G. Bagheri et al., Comprehensive kinetic study of combustion technologies for low environmental impact, Combustion and Flame 212, 2020.
- [7] L. Cai et al., Optimized reaction mechanism rate rules for ignition of normal alkanes, Combustion and Flame 173, 2016

2D-GC-basierte Charakterisierung und Modellierung biogener Kraftstoffe

Svenja Iserloth, Yasin Incedag, Anika Sievers

1. Hintergrund

Die Prozessführung in der Raffination biogener Kraftstoffe ist stark von der verlässlichen und schnellen Bestimmung zentraler Produkteigenschaften abhängig, wie beispielsweise der Kaltflusseigenschaften. Diese Parameter sind entscheidend, um normkonforme Kraftstoffe zu erzeugen und stellen gleichzeitig die Kernaufgabe des Refinings dar, da sie direkt über Einsatzfähigkeit, Lagerstabilität und Betriebssicherheit in kritischen Anwendungen wie Schwerlastverkehr und Luftfahrt entscheiden. Die derzeit eingesetzten Standardmethoden zur Bestimmung dieser Eigenschaften liefern zu-

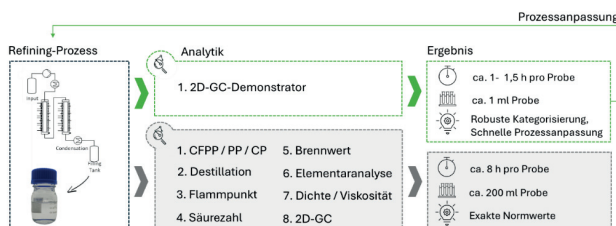


Abbildung 1: Vergleich 2D-GC-Demonstrator (Prozessanpassungsphase) vs. Standard-Analytik (finale Produktprüfung)

verlängerten Entwicklungszyklen und eingeschränkter Flexibilität bei der Kraftstoffformulierung. Daraus leitet sich die Motivation ab, einen Demonstrator zu entwickeln und zu validieren, der aus einer einzigen Messung durch 2D-GC (zweidimensionale Gaschromatographie) und geeigneten Modellen die wesentlichen Refining-Eigenschaften berechnen kann. Ziel ist ein System, durch das wichtige Produkteigenschaften, wie das Kaltflussverhalten und der Restsauerstoffgehalt unmittelbar aus 2D-GC Rohdaten abgeleitet werden können.

2. Methodik

Zum Stand der Forschung existieren bereits vielversprechende Ansätze und Methoden zur Vorhersage von chemischen Eigenschaften mittels 2D-GC [2] [3] [4]. Diese Verfahren werden aufgegriffen, angepasst und spezifisch für die im Rahmen des Projektes verfügbaren biobasierten Dieselmotoren validiert. Die chromatographischen Rohdaten werden zunächst einer rechnergestützten Vorverarbeitung bestehend aus Basislinienkorrektur, Rauschglättung, Peak-Detektion und Peak-Alignment unterzogen und die detektierten Signale anhand ihrer zweidimensionalen

Retentionszeiten chemischen Substanzklassen wie n-Alkanen, Isoalkanen, Cycloalkanen sowie mono- und polyzyklischen Aromaten zugeordnet, woraus eine normierte Peakflächenmatrix als Eingangsgröße für ein Partial-Least-Squares (PLS)-Regressionsmodell resultiert.

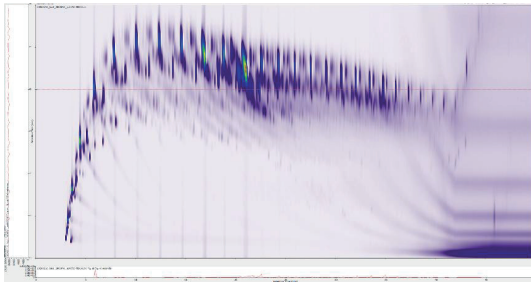


Abbildung 2: Zweidimensionales Gaschromatogramm eines Biokraftstoffs (Diesel)

Dieses stellt den Zusammenhang zwischen der chromatographisch ermittelten Zusammensetzung und der jeweiligen Zielgröße durch Projektion auf eine mittels Kreuzvalidierung optimierte Anzahl latenter Variablen dar. Aufgrund der erhöhten chromatographischen Auflösung des 2D-GC werden signifikant niedrigere Vorhersagefehler erzielt als mit vergleichbaren Modellen auf Basis eindimensionaler Gaschromatographie.

3. Output

Ziel des Vorhabens ist die Entwicklung eines datenbasierten Demonstrators, der die Zusammensetzung biogener Kraftstoffe mit deren physikalischen Eigenschaften verknüpft und damit eine schnellere in-process Bewertung komplexer Proben ermöglicht. Erwartet wird, dass sich aus den 2D-GC-Daten relevante Struktur-Eigenschafts-Beziehungen ableiten lassen, insbesondere im Hinblick auf Kaltflusseigenschaften und weitere qualitätsbestimmende Parameter.

Literatur

- [1] Umweltbundesamt, „Kraftstoffe und Antriebe“. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.umweltbundesamt.de/themen/verkehr/kraftstoffe-antriebe#>
- [2] J. Melder, J. Zinsmeister, T. Grein, S. Jürgens, M. Köhler, und P. Oßwald, „Comprehensive Two-Dimensional Gas Chromatography: A Universal Method for Composition-Based Prediction of Emission Characteristics of Complex Fuels“, *Energy Fuels*, Bd. 37, Nr. 6, S. 4580–4595, März 2023, doi: 10.1021/acs.energyfuels.2c04270.
- [3] Y. B. Lai, L. L. Cai, Y. N. Yuan, X. Chen, X. Qiao, und L. Chen, „Modeling of Biodiesel Cold Filter Plugging Point from their Chemical Composition“, *Appl. Mech. Mater.*, Bd. 448–453, S. 3050–3053, Okt. 2013, doi: 10.4028/www.scientific.net/AMM.448-453.3050.
- [4] G. Díez-Valbuena, A. García Tuero, J. Díez, E. Rodríguez, und A. Hernández Battez, „Prediction of the cold flow properties of biodiesel using the FAME distribution and Machine learning techniques“, *J. Mol. Liq.*, Bd. 400, S. 124555, Apr. 2024, doi: 10.1016/j.molliq.2024.124555.

Autoren und Autorinnen dieses Bandes

Dr.-Ing. Philipp Ackermann, Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik, RWTH Aachen University

Prof. Dr.-Ing. Frank Atzler, Technische Universität Dresden

Torsten Baufeld, Liebherr Machines Bulle, Bulle, Schweiz

Elmar Baumann, Verband der Deutschen Biokraftstoffindustrie e.V., Berlin

Moritz Beinbauer, M.Sc., WTZ Roßlau gGmbH, Dessau-Roßlau

Dr. Sören Bernhardt, Karlsruher Institut für Technologie – Institut für Kolbenmaschinen

Annalena Braun, M.Sc., Karlsruher Institut für Technologie – Institut für Kolbenmaschinen

Prof. Dr. med. Jürgen Bünger, Bünger Health Consulting, Göttingen

Dr.-Ing. Manuel Dahmen, Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik, RWTH Aachen University

Prof. Dr. Friedrich Dinkelacker, Leibniz-Universität Hannover, Institut für Technische Verbrennung

Dipl.-Ing. Maximilian Dobberkau, Technische Universität Dresden

Isabella Faddul de Almeida, Shell International Trading and Shipping Company Limited, London

Dr. Roland Fortenbach, Robert Bosch AG, Hallein

Dipl.-Ing. Josef Frank, Robert Bosch AG, Hallein

Dr.-Ing. Kati Görsch, DBFZ Deutsches Biomasseforschungszentrum gemeinnützige GMBH, Leipzig

Stephanie Hauschild, M.Sc., DBFZ Deutsches Biomasseforschungszentrum gemeinnützige GMBH, Leipzig

Jacqueline Höltkemeier-Horstmann, M.Sc., Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB), Braunschweig

Yasin Incedag, M.Sc., Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg

Svenja Iserloth, M.Sc., Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg

Ewald Keksel, M.Sc., Universität Paderborn

Dr. Johanna Klose, ehemals Volkswagen AG, Wolfsburg

Prof. Dr. Thomas Koch, Karlsruher Institut für Technologie – Institut für Kolbenmaschinen

Dr.-Ing. Andreas Kolbeck, Shell Deutschland GmbH, Hamburg

Prof. Dr. Jürgen Krahl, Technische Hochschule OWL, Lemgo

Dr. Heiko Kubach, Karlsruher Institut für Technologie – Institut für Kolbenmaschinen

Philipp Leue, M.Sc., WTZ Roßlau gGmbH, Dessau-Roßlau

Dr.-Ing. Kay Mahler, WTZ Roßlau gGmbH, Dessau-Roßlau

Dr. rer. pol. Mark Misselhorn, CAPHENIA, Bernau a. Chiemsee

Prof. Alexander Mitsos, Ph.D., Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik, RWTH Aachen University

Prof. Dr. Hinrich Mohr, GasKraft Engineering, Beckdorf

Marian Panofen, Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik, RWTH Aachen University

Jan Pavšek, Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik, RWTH Aachen University

Dr. Sascha Prehn, Universität Rostock, Lehrstuhl für Nutzfahrzeug- und Industriemotoren

Dr.-Ing. Christian Reiser, WTZ Roßlau gGmbH, Dessau-Roßlau

Dr.-Ing. Jan Gerald Rittig, Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik, RWTH Aachen University

Dr. Thilo Roß, Oberingenieur, Technische Universität Dresden

Erno Scheers, Shell International B.V., The Hague

Dipl.-Ing. Kurt Schratlbauer, Robert Bosch AG, Hallein

Dipl.-Ing. Jörg Schröder, DBFZ Deutsches Biomasseforschungszentrum gemeinnützige GMBH, Leipzig

Prof. Dr. Anika Sievers, Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg

Dipl.-Ing. Jens Olaf Stein, Robert Bosch AG, Hallein

Julian Türck, M.Sc., TECOSOL GmbH, Ochsenfurt

Dr. Ralf Türck, TECOSOL GmbH, Ochsenfurt

Dr.-Ing. Jörn Viell, Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik, RWTH Aachen University

Niklas Warnecke, M.Sc., Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB), Braunschweig

Prof. Dr.-Ing. Nicole Wermuth, Large Engines Competence Center, Graz, Österreich

Dr. Ronny Werner, Technische Universität Dresden

Dipl.-Ing. Detlef Wilde, M.Sc., Alfred Wegener Institut AWI, Bremerhaven

Stefan Witte, Technische Hochschule OWL, Lemgo

Florian Zacherl, M.Sc., OTH Regensburg, Labor Verbrennungsmotoren und Abgasnachbehandlung

Mitglieder der Fuels Joint Research Group (FJRG)

Prof. Dr.-Ing. Frank Atzler, Universität Dresden

Prof. Dr. med. Jürgen Bünger, Bünger Health Consulting, Göttingen

Prof. Dr. Friedrich Dinkelacker, Universität Hannover

Prof. Dr.-Ing. Peter Eilts, TU Braunschweig

Prof. Dr. Ravi Fernandes, PTB Braunschweig

Prof. Dr. Thomas Garbe, VW AG

Prof. Dr. Jürgen Krahl, TH OWL, Lemgo

Dr.-Ing. Bastian Lehrheuer, RWTH Aachen

Dr. Klaus Lucka, TEC4FUELS GmbH Aachen

Prof. Dr.-Ing. Axel Munack, Rötgesbüttel

Prof. Dr.-Ing. Hans-Peter Rabl, OTH Regensburg

Prof. Dr. Anika Sievers, HAW Hamburg

Prof. Dr.-Ing. Thomas Schulte, iFE der TH OWL, Lemgo

Dr. Ralf Türck, Tecosol GmbH, Ochsenfurt

Prof. Dr.-Ing. Michael Wensing, FAU Erlangen-Nürnberg

Prof. Dr.-Ing. Gennadi Zikoridse, HS Technik und Wirtschaft Dresden

Angaben zu den Arbeitsgebieten der Mitglieder und zu Publikationen der FJRG sind zu finden unter: <https://www.fuels-jrg.de>

