



Chemiekonjunktur

US-Chemiegeschäft: keine Dynamik, schwache Nachfrage, stagnierende Produktion

Seite 4



Kreislaufwirtschaft

Kunststoffrecycling: Technologiefreudigkeit statt Diskriminierung und falscher Anreize

Seiten 9 - 10



Digitalisierung

Transformation: Bei Evonik folgt die Digitalisierungsstrategie der Geschäftsstrategie

Seiten 21 - 22

Ihr Joker in der Full-Service-Dienstleistung

Besuchen Sie uns auf der **CHEMSPEC EUROPE 2024** 19.06. - 20.06.2024

MESSDÜSSELDORF STAND F190

CHEMIE. EFFIZIENT. GEDACHT. www.ursa-chemie.de

Nachhaltigkeit als Innovationstreiber

Brüggemann entwickelt Reduktionsmittel und Recyclingadditive für nachhaltige Prozesse und Produkte

Nachhaltiges Handeln erfordert langfristiges Denken. Beides zählt zur DNA des Familienunternehmens Brüggemann. Seit 155 Jahren produziert das Unternehmen hochreine Alkohole aus nachwachsenden Rohstoffen und Produktionsabfällen. Auch bei der Energieversorgung setzt der Mittelständler seit 2023 auf Biomasse und Abfallstoffe aus der Region. Spezialchemikalien, wie schwefelbasierte Reduktionsmittel, sorgen für Energieeinsparungen und umweltfreundlichere Prozesse. Und mit innovativen Recyclingadditiven unterstützt das Heilbronner Unternehmen Kunststoffrecycler aus aller Welt bei der Herstellung hochwertiger Rezyklate. Andrea Gruß sprach mit Stefan Lätsch, Geschäftsführer von Brüggemann, über die Innovations- und Wachstumsstrategie des Spezialitätenherstellers.

CHEManager: Herr Lätsch, worauf gehen die Wurzeln von Brüggemann zurück? Wie ist Ihr Geschäft heute aufgestellt?

Stefan Lätsch: Die Wurzeln des Unternehmens gehen in der Tat sehr weit zurück. Die Firma Brüggemann wurde 1868 in Heilbronn gegründet und produzierte Alkohol aus Rückständen der umliegenden Zuckerfabriken und Maische aus dem Weinbau. Alkohole für pharmazeutische, kosmetische und technische Anwendungen sind noch heute ein wichtiges Standbein unseres Geschäfts. In den 1920er Jahren kam der Bereich

Industriechemikalien hinzu, mit Zinkderivaten und schwefelbasierten Reduktionsmitteln, die vor allem in Polymerdispersionen für Coatings und Lacke Anwendung finden. Seit den 1970er Jahren produzieren wir Kunststoffadditive, insbesondere für die Modifizierung von Polyamiden. Mit diesen drei Geschäftsfeldern erzielten wir im Jahr 2023 weltweit einen Umsatz von rund 200 Mio. EUR und beschäftigten 300 Mitarbeiter.

Was macht die Herstellung von Ethanol attraktiv und profitabel für ein mittelständisches Chemieunternehmen?



S. Lätsch: Wir sind spezialisiert auf Nischen. Wir liefern zum Beispiel Ethanol, das halal oder koscher ist, für die Lebensmittelindustrie oder GMP-zertifizierte Alkohole für die Arzneimittelherstellung an die Pharmaindustrie. Im Zuge unserer Nachhaltigkeitsstrategie „Going Green“ setzen wir ausschließlich GMO-freie Rohalkohole aus nachwachsenden Rohstoffen ein. Diese beziehen wir

regional oder aus nahegelegenen EU-Ländern – bevorzugt über die Schiene oder per Schiff, um CO₂-Emissionen zu vermeiden. Einen weiteren Schwerpunkt setzen wir beim Recycling von Alkoholen. Es gibt sehr viele Märkte, in denen Restalkohole als Abfallströme anfallen, zum Beispiel bei der Herstellung alkoholfreien Biers. Dieses Ethanol reinigen und werten wir auf

und verkaufen es wieder als hochwertiges Produkt. Beim Recycling ist der Energieeinsatz über den gesamten Produktlebenszyklus deutlich geringer. Insgesamt führt das zu 70% weniger Treibhausgasemissionen im Vergleich zu konventionell hergestelltem Ethanol.

Fortsetzung auf Seite 7 ▶

NEWSFLOW

Investitionen
Evonik hat die Kapazitäten für Resorcin-Pulver in Darmstadt erweitert.
Byk baut in Wesel ein neues Laborgebäude für das Additives-Geschäft.
Covestro hat in Antwerpen eine Anlage für Polycarbonat-Copolymere eröffnet.

Mehr auf den Seiten 2, 3 und 10 ▶

M&A News
Lonza erwirbt von Roche den Biologika-Standort in Vacaville, USA.
Borealis hat die Übernahme von Integra Plastics abgeschlossen.

Mehr auf Seite 3, 10 und 14 ▶

CHEManager International
Johnson Matthey to sell its medical device components business.
Dow to build large carbonate solvents facility on the US Gulf Coast.

Mehr auf den Seiten 15 und 16 ▶

Personalia
Lonza, Sasol, CHT, ASK Chemicals, Uhde und IZB besetzen Führungspositionen neu.

Mehr auf Seite 27 ▶

Schneller, stärker, grüner: KI in der Chemie

Künstliche Intelligenz hilft bei der Entwicklung von neuen Wirkstoffen und modernen Werkstoffen

Ein neues Zeitalter der Forschung beginnt: Die Synergie aus künstlicher Intelligenz, High-Performance- und Quantencomputing revolutioniert die Entdeckung und Entwicklung in Chemie, Pharma und Materialwissenschaft und führt zu unvorstellbaren Durchbrüchen.

Die jüngste Kooperation zwischen Microsoft und dem Pacific Northwest National Laboratory (PNNL) hat ein neues Kapitel in der Chemie

und Materialwissenschaft eröffnet. Durch die innovative Verbindung von künstlicher Intelligenz (KI) und High-Performance Computing (HPC) wird der Forschungsprozess revolutioniert, indem Entdeckungen, die einst Jahrzehnte dauerten, nun in wenigen Wochen und Monaten realisiert werden können.

Die Grundlagenforschung der beiden Partner führte bereits zu ersten konkreten Anwendungen, dazu gehört die Identifizierung neuer Materialien für fortschrittliche Batterietechnologien aus Millionen von Kandidaten. Mit der Realisierung theoretisch vorhergesagter, bislang unbekannter Verbindungen hat nun die praktische Erprobung begonnen. Neben der enormen

Zeitersparnis geht es also schneller in die Produktion. Wir stehen erst am Anfang einer neuen Epoche, einer neuen Ära der Forschung, in der die Grenzen des Machbaren neu definiert werden. Um das nun Machbare besser zu verstehen, möchte ich im Folgenden die Grundzüge der neuen Technologie erklären. Für mich entscheidend ist: Ab jetzt verfügen wir über ein ebenso verlässliches wie vielseitiges Verfahren.

Durchbrüche beschleunigen und Forschungsprozesse neugestalten

Unsere Zusammenarbeit mit dem PNNL steht exemplarisch für die transformative Kraft der Digitalisie-



Wolfgang Lippert, Microsoft

rung in der wissenschaftlichen Forschung. Im Zentrum steht die Nutzung von KI und Hochleistungsrechnern, um den Prozess der Materialentdeckung und -entwicklung zu beschleunigen. Ein Schlüsselprojekt dieser Kooperation ist die Suche nach neuen Materialien für Batterietechnologien, ein Bereich, der für die Energiewende von entscheidender Bedeutung ist. Mit dem Einsatz avancierter KI-Algorithmen und der Rechenleistung von Hochleistungscomputern konnte das Forschungsteam aus über 32 Millionen möglichen Materialkandidaten jene herausfiltern, die das Potenzial für verbesserte Batterien besitzen.

Fortsetzung auf Seite 22 ▶

WILEY

Monitor **Deloitte.**

Monetizing Circular & Sustainable Products

Circular value creation in the chemical industry

Learn more: www.deloitte.com/de/monetizing-circular-products

Schneller, stärker, grüner: KI in der Chemie

◀ Fortsetzung von Seite 1

Diese Herangehensweise verändert den traditionellen Forschungsprozess radikal: Bislang wurde in langwierigen experimentellen Phasen und mit einer hohen Rate an Trial-and-Error-Verfahren gearbeitet; jetzt ermöglicht die Kombination aus KI und Computing eine präzise und schnelle Vorauswahl, wodurch die Zeit von der ersten Idee bis zum Labortest signifikant verkürzt wird.

Ein konkretes Ergebnis ist die Entdeckung eines neuen Materials, das die Effizienz und Langlebigkeit von Batterien erheblich verbessern

wecheln, da diese eine zu geringe Löslichkeit im menschlichen Verdauungstrakt besitzen. Deswegen verwenden Arzneimittelhersteller die sog. Amorphous Solid Dispersion (ASD), eine Formulierungstechnik, bei der pharmazeutische Wirkstoffe mit organischen Polymeren gemischt werden, um die Löslichkeit und damit die Bioverfügbarkeit (Wirksamkeit) von Arzneimitteln zu verbessern. Hierbei die komplexen Interaktionen auf molekularer Ebene zu verstehen, erfordert rechenintensive Simulationen, die ohne die Kapazitäten von HPC kaum realisierbar wären.



ZUR PERSON

Wolfgang Lippert

promovierte in Chemie an der Ludwig-Maximilians-Universität München und arbeitet seit mehr als 25 Jahren mit Kunden aus der chemischen Industrie. Er ist Teil des Führungsteams für das Industriekundengeschäft bei Microsoft Deutschland und verantwortet die Vertriebsaktivitäten für die Chemieindustrie und die Energiewirtschaft. Vor seiner Tätigkeit bei Microsoft war er im Führungsteam bei Google Cloud Germany und u.a. verantwortlich für die Branchen Chemie, Energie, Gesundheitswesen, Life Sciences und Technologie. Davor war er bei Salesforce für das Life-Sciences-Geschäft in EMEA verantwortlich. In früheren Jahren war er Unternehmensberater bei Accenture, Capgemini und CSC.



Wir stehen am Anfang einer neuen Ära der Forschung, in der die Grenzen des Machbaren neu definiert werden.

könnte. Das Material verwendet sowohl Lithium als auch Natrium sowie einige andere Elemente. Dadurch könnte der Lithiumgehalt der resultierenden Zellen um bis zu 70% gesenkt werden. Der Prozess befindet sich noch in einem frühen Stadium, die chemische Zusammensetzung muss noch optimiert werden.

Die Vorteile des neuen Materials sind immens. Heute wird unsere Welt zunehmend mit Lithium-Ionen-Batterien angetrieben – nach Schätzungen des US-Energieministeriums wird der Lithiumbedarf bis 2030 um das Fünf- bis Zehnfache steigen. Lithium ist schon jetzt knapp und damit teuer. Seine Gewinnung ist zudem ökologisch und geopolitisch problematisch. Und schließlich: Herkömmliche Lithium-Ionen-Batterien sind ein Sicherheitsproblem, weil sie in Brand geraten oder explodieren können. Viele Forschende sind deshalb auf der Suche nach Alternativen.

Wie pharmazeutische Wirkstoffe wirksamer und verträglicher werden

Ein weiteres Beispiel für den erfolgreichen Einsatz modernster Technologien ist das Molecular Modelling Laboratory (MML) in der Schweiz.

MML nutzt Hochleistungscomputer, um die Aufnahme von Medikamenten im menschlichen Körper zu untersuchen. Menschen haben oft Schwierigkeiten, chemisch komplizierte Verbindungen zu verstoff-

Durch cloudbasiertes HPC kann MML umfangreiche Datenmengen, die bei klinischen Tests neuer Medikamente anfallen, schneller durchsuchen und klassifizieren. Dies beschleunigt nicht nur die Identifizierung potenzieller Wirkstoffkandidaten, sondern ermöglicht auch eine präzisere Vorhersage ihrer Stabilität, Verträglichkeit und Wirksamkeit. Die Fähigkeit, komplexe Simulationen durchzuführen und große Datenmengen effizient zu analysieren, verkürzt die Entwicklungszyklen von Medikamenten erheblich und bringt innovative Therapien schneller zu den Patienten.

Cloud Computing, Datenanalyse und maschinelles Lernen spielen eine zentrale Rolle in diesem Prozess. Sie ermöglichen es den For-

Immer deutlicher zeichnen sich die Konturen einer künftigen Forschungslandschaft ab.

schenden, Experimente virtuell durchzuführen und Hypothesen zu testen, ohne auf physische Labortests angewiesen zu sein.

Der Mix aus KI, High-Performance- und Quantencomputing

Die computergestützte Datenverarbeitung hat die Prozesse wis-

senschaftlicher Forschung bereits enorm beschleunigt. Jetzt aber erhöht die Kombination aus generativer KI und Cloud Computing der nächsten Generation das Forschungstempo noch einmal immens. Immer deutlicher zeichnen sich die Konturen einer künftigen Forschungslandschaft ab.

Dabei kommt es auf den richtigen Mix an: Wie das Beispiel bei PNNL verdeutlichen sollte, filterte KI zunächst aus 32 Millionen Materialkandidaten etwa 500.000 vielversprechende aus und reduzierte diese Zahl weiter auf 800. Weil KI zwar schnell, aber oft noch nicht genau genug ist, kamen Molekulardynamiksimulationen zum Einsatz, die KI und HPC kombinierten und die Liste auf 150 Kandidaten redu-

zierten. Anschließend bewerteten Wissenschaftler mithilfe von HPC die Praxistauglichkeit der einzelnen Materialien – Verfügbarkeit, Kosten usw. –, um die Auswahl auf die 23 aussichtsreichsten Kandidaten zu verfeinern. So ermöglichte die Kombination aus menschlichen Kompetenzen sowie KI und HPC eine rasche Identifizierung der

besten Materialkandidaten in nur 80 Stunden.

Die intensive Rechenleistung ist der Engpass, selbst an Universitäten und Forschungseinrichtungen, die über Supercomputer verfügen. Denn als wertvolle Ressource werden sie hier gemeinsam genutzt, weswegen Forschende unter Umständen warten, bis sie an der Reihe sind. Auch dafür gibt es eine Lösung: KI-Tools wie bei Azure HPC stellen in der Cloud auch kleineren Forschungseinrichtungen und Unternehmen die richtigen Rechenkapazitäten zur Verfügung.

Für die weitere Zukunft erwartet man die ersten Anwendungsfälle fürs Quantencomputing. Dafür schaffen wir heute die Voraussetzungen und bieten eine technologische Plattform an, die vor allem für die Chemie und die materialwissenschaftliche Forschung im Hinblick auf das spätere Quantencomputing entwickelt wurde.

Die Zukunft der Forschung im Zeitalter von KI und Quantencomputing

Bei der Implementierung dieser fortschrittlichen Technologien ergeben sich auch Risiken. Dazu gehören Fragen des Datenmanagements und der Sicherheit, da die Verarbeitung und Speicherung sensibler Forschungsdaten hohe Anforderungen an Datenschutz und Datensicherheit stellen. Das lässt sich mit einem Cloud-System realisieren, indem bspw. mittels Confidential Computing sensible Daten im Ar-

beitspeicher verschlüsselt und erst dann verarbeitet werden, wenn die Cloudumgebung überprüft wurde.

Trotz der Herausforderungen sollten wir die immensen Chancen nicht aus den Augen verlieren. Die neuen Technologien erhöhen die Leistungsfähigkeit und Zielgenauigkeit in Forschungs- und Entwicklungsprozessen

Die Kombination aus generativer KI und Cloud Computing der nächsten Generation erhöht das Forschungstempo immens.

erheblich, indem sie es ermöglichen, anspruchsvolle Simulationen und Analysen in einem verkürzten Zeitrahmen durchzuführen: Dies führt neben einer Beschleunigung der Materialentdeckung und der Entwicklung neuer Medikamente auch zu einer Reduzierung der Kosten und Ressourcen.

Darüber hinaus tragen diese Technologien zur Nachhaltigkeit bei, indem sie die Entwicklung umweltfreundlicher Materialien und Prozesse unterstützen.

Innovation ist ein weiterer Vorteil: Grenzen des Machbaren werden erweitert und bahnbrechende Entdeckungen möglich, die mit herkömmlichen Methoden nicht realisierbar wären und vor einigen Jahren noch undenkbar waren.

Gartner erwartet, dass schon 2025 über 30% aller neuen Medikamen-

te und Materialien systematisch mit Hilfe generativer KI-Technologien entdeckt werden. Mit allen notwendigen Vorbehalten, dürfen wir dennoch an diese Zukunft glauben: Sie hat gerade erst begonnen und wir nutzen bisher nur einen Bruchteil der zukünftigen Möglichkeiten generativer KI.

Wir werden die Produktion von biologischen Materialien und Verfahren ausweiten. Insbesondere bei der Suche nach Ersatzstoffen für umwelttechnisch oder gesundheitlich bedenkliche Stoffe in Rezepturen (z.B. Farben) bzw. Materialmischungen kann die Kombination von KI und Simulation mittels HPC einen wertvollen Beitrag leisten.

Ungeahnte Möglichkeiten! Seien wir also vorbereitet – mit hinreichender Vorsicht, aber viel Entdeckerlust.

Wolfgang Lippert, Chemicals & Energy Industry Lead, Microsoft Deutschland, München

■ wlippert@microsoft.com
■ www.microsoft.com/de-de/

WILEY



<https://www.linkedin.com/company/chemanager>

Danke an über 36.000 Follower auf den CHEManager-LinkedIn-Kanälen!

www.chemanager.com

CHEManager

CHEManager

KI-gestütztes Product Data Management

Brenntag und Knowde kooperieren im IT-Bereich

Brenntag hat eine strategische Partnerschaft mit Knowde, der führenden digitalen Customer-Experience-Plattform für die Chemieindustrie, vereinbart. Die Zusammenarbeit markiert einen bedeutenden Schritt in der Nutzung von künstlicher Intelligenz (KI) bei der Bewältigung der komplexen Herausforderungen der chemischen Industrie im Bereich Produktdatenmanagement.

Christian Kohlpaintner, CEO von Brenntag erklärte: „Die rasanten Fortschritte im Bereich der künstlichen Intelligenz in den letzten Jahren haben die Wertschöpfung aus der End-to-End-Nutzung von Daten massiv verändert und neue Möglichkeiten geschaffen.“

Der Schwerpunkt der Zusammenarbeit wird darauf liegen, das Management von „unstrukturierten“ Produktinformationen in einen strukturierten, harmonisierten und multidimensionalen Datensatz umzuwandeln, eingebettet in eine Product-Information-Management-Lösung (PIM). Die KI-gestützte „Knowledge Engine“ von Knowde wird zur Standardisierung von Pro-

duktinformationen, inkl. Anwendungen und Attributen, eingesetzt, um das Benutzererlebnis für Brenntag-Kunden und -Lieferanten zu verbessern. Durch ihre Partnerschaft wollen die beiden Unternehmen u.a. die Produkteinführung und die Verkaufsprozesse optimieren, die Integration von Akquisitionen beschleunigen und die Nachverfolgung der Nachhaltigkeit verbessern.

Die Partnerschaft mit Knowde ist eine von mehreren Initiativen von Brenntag, um Mehrwert aus seinen Datenbeständen zu ziehen. Der Essener Chemiedistributionskonzern setzt KI bereits in verschiedenen Bereichen ein, u.a. im Vertrieb. Dort ermöglicht sie es, fundierte Entscheidungen für nachhaltiges Wachstum zu treffen, verbessert den Kundenservice und die Optimierung von Angebot und Nachfrage für eine KI-gestützte integrierte Geschäftsplanung.

Knowde-CEO Ali Amin-Javaheri kommentierte die Zusammenarbeit: „Unternehmen wie Brenntag, die auf Digitalisierung setzen, werden einen erheblichen Wettbewerbsvorteil haben.“ (mr)