

Vom Rohstoff zur Endchemikalie

- 2.1 **Verbundstruktur der chemischen Industrie – 10**
- 2.2 **Wert-, Koppel- und Nebenprodukte – 12**
- 2.3 **Ein typischer Produktstammbaum – 13**
- Literatur – 16**

2.1 Verbundstruktur der chemischen Industrie

Technisch-chemische Umsetzungen basieren auf organischen und anorganischen Rohstoffen. Zu den wichtigsten organischen Rohstoffen gehören Erdgas, Erdöl und Kohle sowie die nachwachsenden Rohstoffe. Zu den bedeutendsten anorganischen Grundstoffen gehören Schwefel, Stickstoff, Sauerstoff, Steinsalz, Wasser, Metalloxide und Phosphate.

In der chemischen Industrie werden diese Rohstoffe zu zahlreichen Zwischen- und Endprodukten umgesetzt. Dies geschieht in den unterschiedlichsten chemischen Fabriken, die sich in der Regel auf bestimmte Teilbereiche der chemischen Produktion spezialisiert haben. Eine chemische Fabrik besteht ihrerseits aus zahlreichen chemischen Anlagen, die aber in ihren Massen- und Energieströmen miteinander verbunden sind (▣ Abb. 2.1) Ein Produkt, das in einer Anlage produziert wird, wird häufig in einer nachfolgenden Anlage zu einer Folgechemikalie weiter umgesetzt. Firmen, die grundlegende Chemikalien, sogenannte Basischemikalien, herstellen, verkaufen diese weiter an andere Firmen, die daraus wertvolle Zwischenprodukte herstellen. Diese wiederum verkaufen die Zwischenprodukte an Firmen, die sich auf die Herstellung von Endchemikalien (Endprodukte) spezialisiert haben. Diese generelle Verknüpfung nennt man die **Verbundstruktur der chemischen Industrie**.

Diese Verbundstruktur lässt sich sehr gut mit einem Baum vergleichen (▣ Abb. 2.2):

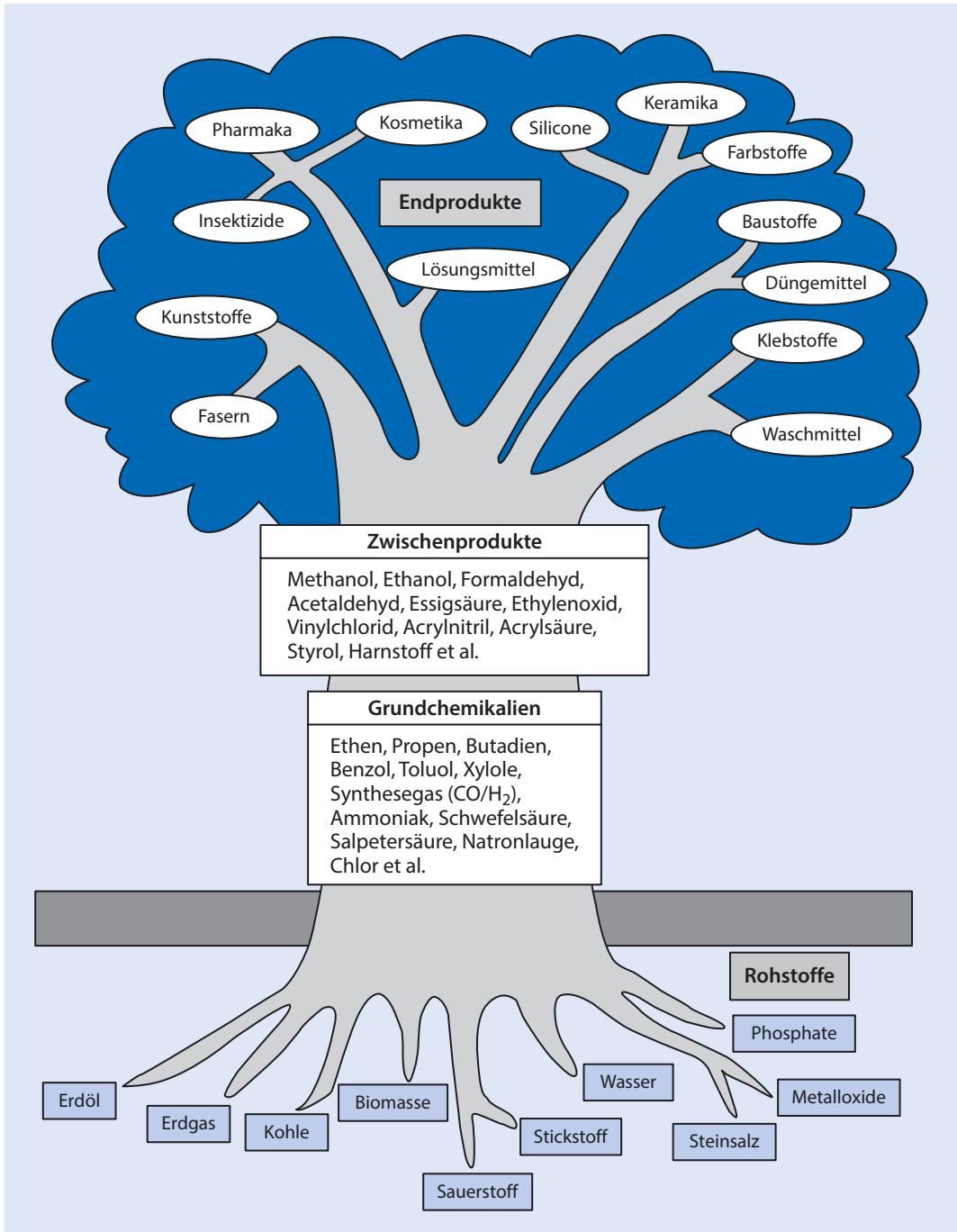
- Von den Wurzeln aus werden die *Rohstoffe* (engl. *raw materials*) aufgenommen. Beim Baum sind dies z. B. Mineralstoffe und Wasser, in der Chemiewirtschaft sind dies die oben bereits aufgeführten organischen oder anorganischen Rohstoffe oder Grundstoffe.
- In der Chemie werden ausgehend von diesen Rohstoffen ca. 20–30 *Grundchemikalien* (oder Basischemikalien; engl. *base chemicals*) hergestellt. In der anorganischen Chemiewirtschaft sind dies z. B. wichtige Säuren und Basen sowie bedeutende Elemente, wie Chlor, Wasserstoff oder Metalle. In der organischen Chemie geht man in der Regel von höhermolekularen Stoffen aus und verwandelt diese in reaktive niedermolekulare Verbindungen,



▣ Abb. 2.1 Rohrleitungstransport in einem Chemiewerk.
© The Linde Group

die sich ihrerseits wieder gut in viele andere Stoffe umwandeln lassen. So werden z. B. aus Erdöl-Destillationsschnitten die sehr reaktiven kurzkettigen Alkene, Ethen und Propen, hergestellt. Ebenfalls lässt sich aus der hochmolekularen Stärke, einem nachwachsenden Rohstoff, die niedermolekulare Glucose herstellen. Diese Grundchemikalien bilden quasi den Stamm unseres Chemiebaumes, von dem aus sich dann zahlreiche Äste verzweigen können.

- Die dritte Stufe in der chemischen Industrie sind die *Zwischenprodukte* (engl. *intermediates*), von denen es mehrere Hundert gibt. Diese Zwischenprodukte entstehen zumeist durch gezielte Verknüpfung von Grundchemikalien mit sich selber oder mit Rohstoffen. Beispiele sind die Oligomerisation von Ethen zu 1-Alkenen oder die Oxidation von Ethen mit Sauerstoff zu Acetaldehyd oder Ethylenoxid. Die Zwischenprodukte sind die großen Äste unseres Chemiebaumes.
- Auch diese Zwischenprodukte sind in der Regel noch keine Produkte, die an den Endverbraucher verkauft werden können. Dazu ist noch eine weitere, vierte Veredelungsstufe notwendig, die Umwandlung in *Endprodukte*



■ **Abb. 2.2** Der Produktionsstammbaum der chemischen Industrie

■ Tab. 2.1 Weltjahresproduktion wichtiger Chemikalien (Mio. t, Zahlen aus den Jahren 2011–2014)

Grundchemikalien	Schwefelsäure	200
	Ammoniak	143
	Chlor	63
	Ethen	156
	Propen	80
Zwischenprodukte	Methanol	65
	Ethanol	73
	Vinylchlorid	40
Endprodukte	Kunststoffe	299
	Stickstoff in Düngemitteln	105

(engl. *consumer products*). In dieser Stufe werden oftmals noch mehrere chemische Reaktionen hintereinander durchgeführt, z. B. bei der mehrstufigen Synthese kompliziert aufgebauter Pharmaka oder Insektizide. Diese letzten Stufen lassen sich mit den Zweigen und Blättern eines Baumes vergleichen. Genauso wie ein großer Baum mehrere Tausende Blätter haben kann, hat auch die chemische Industrie viele Tausende Endprodukte. Typische Beispiele sind Kunststoffe, Farbstoffe, Lösungsmittel, Düngemittel, Fasern, Waschmittel, Klebstoffe oder Kosmetika.

Für alle „Umsetzungen“ eines Baumes wird *Energie* benötigt, die in der Natur durch die Sonnenenergie geliefert wird. Auch für chemische Umsetzungen muss Energie aufgebracht werden, etwa Wärmeenergie für thermische Umsetzungen oder elektrische Energie für elektrochemische Prozesse. Die Chemiewirtschaft ist somit immer von der Versorgung mit Energieträgern, z. B. Erdgas oder Erdöl, abhängig. Große Chemiefabriken verfügen deshalb über ein eigenes Kraftwerk, in dem durch Verbrennung fossiler Rohstoffe die benötigte Energie direkt vor Ort erzeugt wird.

Um ein Gefühl für die Größenordnungen des chemischen Produktstammbaums zu erlangen, sind in ■ Tab. 2.1 von einigen wichtigen Grundchemikalien, Zwischen- und Endprodukten die Weltproduktionszahlen angegeben. Die weltweit größte

Einzelchemikalie ist die Schwefelsäure mit ca. 200 Mio. Jahrestonnen.

An dieser Stelle muss jedoch betont werden, dass die produzierte Menge eines chemischen Produkts nicht die alleinige Größe für die Bedeutung einer Chemikalie darstellt: Von manchen Pharmaka werden weltweit nur wenige Tonnen hergestellt, trotzdem handelt es sich wegen ihres hohen Wertes um äußerst wichtige Substanzen.

2.2 Wert-, Koppel- und Nebenprodukte

Die bisherige Betrachtung des Produktstammbaums ist davon ausgegangen, dass man in der chemischen Industrie z. B. von einer Basischemikalie immer gezielt zu einer gewünschten Zwischenchemikalie gelangen kann. Das ist leider nicht sehr häufig der Fall. Dazu sollen einige Grundbegriffe erläutert werden:

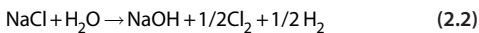
- Bei vielen chemischen Reaktionen entstehen neben dem gewünschten **Wertprodukt** häufig auch ein oder mehrere **Koppelprodukte**. Koppelprodukte sind dadurch definiert, dass sie sich – auch bei hoch selektiver Reaktionsführung – nicht vermeiden lassen, da sie von der Stöchiometrie der chemischen Umwandlung her automatisch mit entstehen müssen. Ein Beispiel ist die Chlorierung von Benzol zu Monochlorbenzol, bei der immer ein

2.3 · Ein typischer Produktstammbaum

Mol Chlorwasserstoff als Koppelprodukt mit gebildet wird [Gl. \(2.1\)](#):



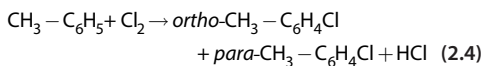
- Ebenfalls können bei einer chemischen Umsetzung auch *zwei Wertprodukte gleichzeitig* gebildet werden. So entstehen bei der Chloralkalielektrolyse von Steinsalz die beiden Wertprodukte Natronlauge und Chlor ([► Abschn. 19.4](#)). Der ebenfalls entstehende Wasserstoff ist hierbei ein oft unerwünschtes Koppelprodukt. Die formale Bruttogleichung ist in [Gl. \(2.2\)](#) wiedergegeben.



- Neben den Begriffen Wertprodukt und Koppelprodukt gibt es noch den Begriff der **Nebenprodukte**. Sie sind zumeist unerwünschte Produkte, die man durch geschickte Reaktionsführung zu vermeiden versucht. Ein Beispiel ist die bei der Benzolchlorierung mit auftretende Zweitchlorierung zu Dichlorbenzol, also eine unerwünschte *Konsekutivreaktion* [Gl. \(2.3\)](#).



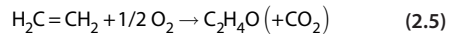
- Nebenprodukte können auch in einer *Parallelreaktion* gebildet werden. Bei der Chlorierung von Toluol entstehen – neben dem Koppelprodukt Chlorwasserstoff – die beiden isomeren Produkte *ortho*- und *para*-Chlortoluol. Möchte man nun eine Feinchemikalie aufbauend auf *ortho*-Chlortoluol herstellen, dann ist dieses Isomer das Wertprodukt und das *para*-Chlortoluol das Nebenprodukt. In einem anderen Fall kann dies aber genau umgekehrt gültig sein [Gl. \(2.4\)](#).



In der chemischen Industrie versucht man aus Gründen der Wirtschaftlichkeit, die gebildeten Koppel- und Nebenprodukte möglichst sinnvoll zu nutzen. Auch hier zeigt sich wieder das vorteilhafte Prinzip der Verbundwirtschaft: Ein eigentlich unerwünschtes Koppel- oder Nebenprodukt einer Reaktion kann zum gewünschten Ausgangsprodukt für eine zweite Reaktion werden.

Kann man die Nebenprodukte nicht nutzen, ist man natürlich bemüht, ihre Bildung zu minimieren. Das kann in der Technik durch geeignete Katalysatoren oder durch eine optimierte Reaktionsführung geschehen. Diese Optimierungen sind in der Großchemie von entscheidender Bedeutung.

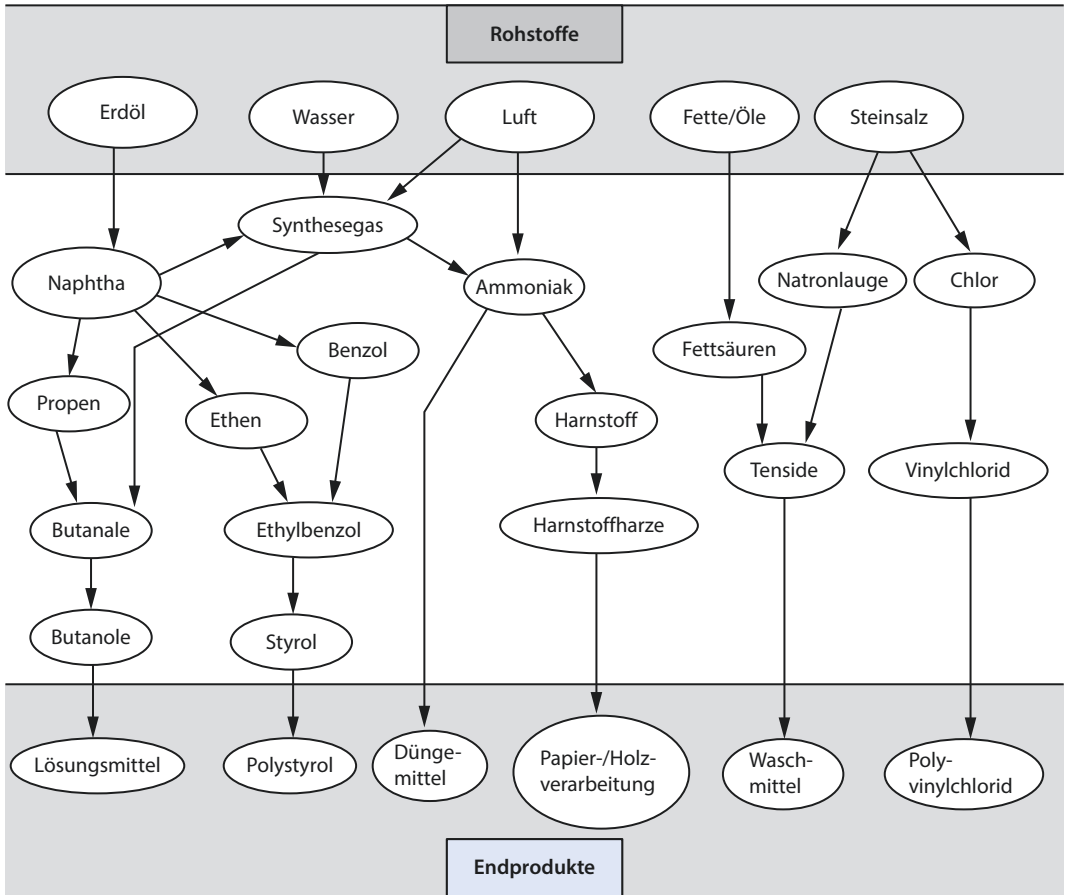
Betrachten wir dazu wieder ein Beispiel: Durch katalytische Oxidation von Ethen mit Sauerstoff kann großtechnisch Ethylenoxid produziert werden. Leider entsteht hierbei aber auch immer etwas Kohlendioxid, ein unerwünschtes Nebenprodukt [Gl. \(2.5\)](#):



Bei einer 100 % igen Ausbeute kann man nach dieser Gleichung aus 28 g Ethen 44 g Ethylenoxid herstellen. Im Labormaßstab kann man meistens darüber hinwegsehen, ob die Ausbeute 100 % oder nur 95 % beträgt. In der chemischen Technik arbeitet man aber mit anderen Größenordnungen. Ethylenoxidanlagen haben heutzutage eine Jahreskapazität von mehreren Hunderttausend Tonnen. Setzt man z. B. in einer Ethylenoxidanlage pro Jahr 300.000 t Ethen ein, würden sich bei einer 100 % selektiven Reaktion gemäß der Stöchiometrie 471.429 t Ethylenoxid herstellen lassen. Beträgt die Ausbeute aber nur 95 %, würden 23.570 Tonnen weniger Ethylenoxid und stattdessen nicht verkäufliches Kohlendioxid produziert. Eine Tonne Ethylenoxid kostet derzeit auf dem Markt ca. 900 €, d. h. die Ethylenoxid-Produktionsfirma hätte pro Jahr um ca. 21,2 Mio. € geringere Einnahmen. Dies wäre ein gewaltiger Verlust, und jede Firma ist natürlich daran interessiert, den maximal möglichen Profit zu erzielen ([► Kap. 20](#)).

2.3 Ein typischer Produktstammbaum

In diesem einführenden Lehrbuch ist es nicht möglich, den gesamten Produktverbund der chemischen Industrie ausgehend von 10–20 Rohstoffen bis hin zu 20.000–30.000 Endprodukten auch nur annähernd darzustellen. Es wurde deshalb versucht, eine charakteristische Auswahl zu treffen und anhand typischer Beispiele aufzuzeigen, wie die chemische Industrie üblicherweise vorgeht. In den folgenden Kapiteln der *Einführung in die*



■ **Abb. 2.3** Ein typischer Produktstammbaum in der chemischen Industrie

Technische Chemie werden zuerst einmal die wichtigsten Grundlagen der Technischen Chemie vermittelt, wie die Maßstabvergrößerung chemischer Prozesse und Apparate, die technische Thermodynamik und Kinetik in Teil I sowie die Reaktions- und Trenntechnik in Teil II. Im Anschluss daran, bei der Verfahrensentwicklung (Teil III) und bei den Chemischen Prozessen (Teil IV), werden wichtige Beispiele industrieller Produktionsverfahren detailliert vorgestellt.

Im vorliegenden Abschnitt wird schon einmal eine Kurzübersicht über diese Produktionsverfahren gegeben, die alle in einem Produktverbund miteinander zusammenhängen. Der zugehörige Produktstammbaum ist in ■ **Abb. 2.3** wiedergegeben und wird im Folgenden kurz erläutert. In diese Erläuterungen wurden Querverweise auf

die späteren, detaillierteren Kapitel dieses Buches eingefügt.

Ein wichtiger Rohstoff für die industrielle organische Chemie ist das *Erdöl* (► **Kap. 14**). Es besteht überwiegend aus Kohlenwasserstoffen, enthält aber auch sauerstoff-, stickstoff- und schwefelhaltige Verbindungen. Typische Kohlenwasserstoffe im Erdöl sind nichtcyclische Alkane, Cycloalkane sowie Aromaten. Erdöl wird durch Tiefbohrungen gewonnen und anschließend in einer *Rektifikation* (► **Kap. 7**) bei Normaldruck in verschiedene Fraktionen aufgetrennt. Eine bedeutende Fraktion ist das *Naphtha* (Leichtbenzin), ein wichtiger Ausgangsstoff zur industriellen Gewinnung von kurzkettigen Alkenen und Aromaten.

Dazu wird Naphtha im *Steamcracker* (► **Abschn. 14.4**) kurzfristig auf hohe Temperaturen erhitzt.

2.3 · Ein typischer Produktstammbaum

Dabei werden C–H- und C–C-Bindungen gespalten. Die Bruchstücke bilden dann insbesondere *Ethen* und *Propen*, die Butene, Butadien, Benzol, Methan und Wasserstoff. Aus diesen Alkenen und Aromaten werden in der chemischen Industrie Dutzende von wichtigen Folgeprodukten hergestellt, wie Ethylenoxid, Ethylbenzol, Ethanol, Acetaldehyd, Acrylnitril oder Acrylsäure (► Kap. 11 und 15). Aus Ethylbenzol wird durch Dehydrierung *Styrol* produziert, das in großem Umfang zu *Polystyrol* polymerisiert wird (► Kap. 16). Alkene und Aromaten werden aber auch in zahlreiche Feinchemikalien, z. B. in *Pharmaka* und *Vitamine*, überführt (► Kap. 17).

Neben der Chemie der Alkene und Aromaten spielt auch die Chemie des *Synthesegases* eine große Rolle in der chemischen Industrie. Dabei handelt es sich um ein Gemisch aus Kohlenmonoxid und Wasserstoff, das einfach aus fossilen Rohstoffen, Wasser und Luft zugänglich ist (► Kap. 12). Durch eine homogen katalysierte Reaktion, die Hydroformylierung (► Abschn. 13.2), können Alkene mit Synthesegas zu Aldehyden oder Alkoholen umgesetzt werden, z. B. *Propen* zu den *Butanalen* und *Butanolen*, einer wichtigen Klasse von Lösungsmitteln.

Wasserstoff aus dem Synthesegas kann auch mit dem Stickstoff der Luft mithilfe von heterogenen Katalysatoren in *Ammoniak* überführt werden (► Kap. 12). Mit diesem „Haber-Bosch-Verfahren“ werden weltweit jährlich über 140 Mio. t Ammoniak hergestellt (► Tab. 2.1), die z. B. zur Herstellung von *Düngemitteln* und *Harnstoffharzen* verwendet werden. Diese Harze sind wichtige Hilfsstoffe bei der Papier- und Holzverarbeitung.

Zunehmend werden auch *nachwachsende Rohstoffe*, wie Fette und Öle oder Kohlenhydrate, in der chemischen Industrie eingesetzt. Aus Fetten und Ölen sind langkettige Carbonsäuren und ihre Ester zugänglich, die in zahlreiche gut abbaubare *Tenside* überführt werden können. Diese Tenside sind Hauptbestandteil unserer Waschmittel (► Abschn. 18.2.1).

Neben thermischen und katalytischen Verfahren spielen auch elektrochemische Verfahren eine große Rolle, insbesondere in der industriellen anorganischen Chemie (► Kap. 19). Wichtige elektrochemische Verfahren führen zur Gewinnung von *Chlor*, *Natronlauge* sowie von *Metallen*. Chlor wird in großem Umfang zu *Vinylchlorid* (► Abschn. 15.1.2)

verarbeitet, das Monomer für den wichtigen Massenkunststoff *Polyvinylchlorid*.

Der Produktstammbaum in ► Abb. 2.3 belegt anschaulich, wie es der chemischen Industrie in relativ wenigen Prozessschritten gelingt, aus fossilen und nachwachsenden organischen Rohstoffen sowie aus wenigen anorganischen Rohstoffen eine Vielfalt wichtiger Wertprodukte herzustellen.

Zusammenfassung (take-home messages)

- Wichtige **Rohstoffe für die organisch-technische Chemie** sind die fossilen Rohstoffe Erdöl, Erdgas und Kohle sowie die nachwachsenden Rohstoffe Fette/Öle und Kohlenhydrate.
- Wichtige **Rohstoffe für die anorganisch-technische Chemie** sind Wasser, Luft, Salze, Schwefel, Phosphate und Metalloxide.
- Aus diesen Rohstoffen werden in der chemischen Industrie ca. 20–30 **Grundstoffe (Basischemikalien)** hergestellt.
- Bedeutende **organische Basischemikalien** sind die Alkene Ethen und Propen, das 1,3-Dien Butadien und die Aromaten Benzol, Toluol sowie die isomeren Xylole.
- Wichtige **anorganische Basischemikalien** sind Ammoniak, Schwefelsäure, Salpetersäure, Natronlauge und Chlor.
- Aus den organischen Basischemikalien werden durch gezielte Folgereaktionen, meist unter Einführung von sauerstoff- oder stickstoffhaltigen Gruppen, mehrere Hundert **Zwischenprodukte** hergestellt. Typische organische Zwischenprodukte sind Alkohole, Aldehyde, Ketone, Carbonsäuren, Amine, Nitrile und halogenhaltige Produkte.
- Diese Zwischenprodukte sind wiederum die Grundlage zur Herstellung der eigentlichen Verkaufsprodukte, der **Endprodukte**. Wichtige organische Endprodukte sind Kunststoffe und Fasern, Pharmaka, Insektizide, Lösungsmittel, Farbstoffe, Klebstoffe, Kosmetika und Waschmittel. Wichtige anorganische Endprodukte sind Baustoffe, Düngemittel,

Keramika, anorganische Fasern und Silicone.

- Die Rohstoffe, Basischemikalien, Zwischenprodukte und Endprodukte befinden sich in der chemischen Industrie in einem eng verzahnten **Produktverbund**, der sich in Form von **Produktstammbäumen** darstellen lässt.
- Innerhalb dieses Produktverbundes bemüht sich die chemische Industrie, auch **Koppel-** und **Nebenprodukte** möglichst sinnvoll zu nutzen.
- Ist dies nicht möglich, muss die Bildung von Nebenprodukten unbedingt minimiert werden. Jedes Prozent an **Ausbeuteverlust** kann bei einer Großchemikalie den Verlust mehrerer Millionen Euro pro Jahr bedeuten.
- Die Minimierung der Nebenprodukte erfolgt in der Technik durch Optimierung der Reaktionsbedingungen und durch den Einsatz von selektiven homogenen und heterogenen **Katalysatoren**.

9. Wie kann man versuchen, Nebenprodukte zu minimieren?
10. Nennen Sie ein Beispiel für eine homogene und eines für eine heterogene Katalyse!

... und zum Abschluss des Kapitels noch ein Fußballerzitat:

„Kevin hat drei Wochen Urlaub in Dortmund gemacht. Der kam kreidebleich zu uns. Aber mit schönen Tattoos.“ (Jürgen Klopp über Kevin Großkreutz)

Literatur

- Benvenuto MA (2014) Industrial Chemistry. De Gruyter, Berlin/Boston
- Moulin JA, Makkee M, van Diepen AE (2013) Chemical Process Technology. Wiley, Chichester
- Murzin DY (2015) Chemical Reaction Technology. De Gruyter Textbook
- Staudigl R (2004) Chemieindustrie: Herausforderungen und Antworten. Chem. Ing. Tech. 76: 21–29
- Verband der Chemischen Industrie – VCI: Chemiewirtschaft in Zahlen. Frankfurt am Main, jährliche Neuauflage, verfügbar auch über www.vci.de
- Wittcoff HA, Reuben B, Plotkin JS (2013) Industrial Organic Chemicals. 3rd ed., Wiley

? Zehn „Quickies“ zu Kapitel 2

1. Nennen Sie vier wichtige organische Rohstoffe der chemischen Industrie!
2. Wie kann man aus dem Rohstoff Erdöl niedermolekulare Alkene und Aromaten herstellen?
3. Gehören die kurzkettigen Alkene zu den Basischemikalien oder zu den Zwischenprodukten?
4. Wie werden aus Basischemikalien Zwischenprodukte hergestellt? Nennen Sie fünf wichtige Gruppen von organischen Zwischenprodukten!
5. Nennen Sie drei große anorganische Grundchemikalien!
6. Nennen Sie fünf wichtige Gruppen organischer Endprodukte!
7. Nennen Sie fünf wichtige Gruppen anorganischer Endprodukte!
8. Unterscheiden Sie zwischen Koppel- und Nebenprodukten!



<http://www.springer.com/978-3-662-52855-6>

Einführung in die Technische Chemie

Behr, A.; Agar, D.W.; Jörissen, J.; Vorholt, A.J.

2016, XII, 316 S. 221 Abb., 157 Abb. in Farbe.,

Hardcover

ISBN: 978-3-662-52855-6