



# DIE NEUE FORMEL C4

Evonik produziert im Geschäftsgebiet Performance Intermediates täglich mehrere Tausend Tonnen begehrte Industriechemikalien. Durch ein besonderes Reinigungsverfahren kann der Konzern als einziges Unternehmen weltweit dafür einen sehr speziellen Rohstoff aus Raffinerien nutzen: FCC-C4. Für die Entwicklung des Verfahrens erhielten die Forscher jetzt den Evonik-Innovationspreis.

TEXT FRANK FRICK

**E**in wesentlicher Teil der Produktion in Marl, dem größten Standort von Evonik, beruht auf der Formel C4. Sie steht für Flüssiggase, deren Moleküle vier Kohlenstoffatome enthalten. Diese Flüssiggase werden in den C4-Anlagen in Marl – ebenso wie am Standort Antwerpen (Belgien) – über mehrere Schritte hinweg immer weiter veredelt: zum Beispiel zu MTBE (Methyl-tert.-butyl-ether), das als Antiklopfmittel die Oktanzahl von Benzin erhöht und zu einer besseren Verbrennung führt, zum Weichmacher DINP (Diisononylphthalat), der sprödes PVC in ein flexibles Material verwandelt, oder zu Butadien, das zu Synthetikgummi für Autoreifen verarbeitet wird. Alle C4-Anlagen sind stofflich und energetisch eng miteinander verbunden: Selbst die Nebenprodukte eines Prozesses dienen in anderen Anlagen als Rohstoffe, und die Abwärme eines Verfahrensschrittes liefert die Energie für einen anderen.

Jahrzehntlang nutzte der Produktionsverbund in Marl ausschließlich sogenanntes Crack-C4 – einen unverarbeiteten C4-Strom aus petrochemischen Anlagen, die in Steam- oder Naphta-Crackern Rohölbestandteile thermisch zerlegen. Die Petrochemie gewinnt so unter anderem Ethylen und Propylen und nebenbei auch den Crack-C4-Strom.

## BEGEHRTER ROHSTOFF

Doch der Nachschub an Crack-C4 könnte an Grenzen stoßen: Dank des Marktwachstums der Folgeprodukte interessieren sich immer mehr Wettbewerber für diesen Rohstoffstrom. Zugleich stagniert in Europa die Zahl der Steam-Cracker – und damit auch die Menge des verfügbaren Crack-C4. In den USA boomt zwar die Förderung von Öl und Gas aus nicht konventionellen Quellen mithilfe des Fracking-Verfahrens. Das so gewonnene Material hat allerdings eine andere Zusammensetzung als das traditionelle Rohöl. Die Folge: Wird das Fracking-Material in Crackern verarbeitet, entsteht weniger Crack-C4 in schlechterer Qualität.

Steigende Nachfrage nach C4-basierten Industriechemikalien, aber stagnierende Verfügbarkeit des Rohstoffstroms: Performance Intermediates hat dieses Dilemma bereits vor zehn Jahren erkannt und nach alternativen C4-Rohstoffströmen Ausschau gehalten. Das Geschäftsgebiet stieß dabei auf das Fluid Catalytic Cracking (FCC),



Die neue Anlage zur Aufbereitung von FCC-C4 im Chemiepark Marl

ein Verfahren, mit dem Raffinerien hochsiedende Erdölrückstände katalytisch in Kraftstoffkomponenten umwandeln. Dabei entsteht wie beim Steam-Cracken ein Stoffstrom, der vor allem aus Verbindungen mit vier Kohlenstoffatomen besteht.

Doch es gibt einen deutlichen Unterschied bei der Zusammensetzung. Während Crack-C4 zu maximal fünf Prozent aus n-Butan und Isobutan besteht, sind es bei FCC-C4 mehr als 25 Prozent. Weil diese beiden Alkane aber ausschließlich Einfachbindungen enthalten, sind sie reaktionsträge und lassen sich nur schwer zu hochwertigen Chemikalien veredeln. „Damit wäre FCC-C4 als Rohstoff für den Marler Produktionsverbund klar im Nachteil gegenüber dem etablierten Crack-C4“, erläutert Dr. Markus Winterberg, der die Projektleitung bei der Verfahrensentwicklung innehatte und bei der späteren Umsetzung die Rolle des Projektverantwortlichen übernahm.

## GIFT FÜR DIE KATALYSATOREN

Im Labor zeigte sich schnell eine weitere negative Eigenschaft des FCC-C4-Stroms: Er vergiftet die Katalysatoren, die in den Anlagen des Marler Verbunds zum Einsatz kommen. Das heißt: Die Katalysatoren, die maßgeblich sind für die hohe Effizienz und Wirtschaftlichkeit der Herstellungsprozesse, ließen schon nach wenigen Stunden in ihrer Leistung nach.

Erst nachdem die Analytikexperten von Evonik neue Detektoren getestet und passende Methoden für die Gaschromatografie entwickelt hatten, die nach einem anderen Funktionsprinzip arbeiten als üblich, entdeckten sie den Grund dafür: Das FCC-C4-Gemisch enthält mehr als 50 unerwünschte stickstoff- und →

schwefelhaltige Komponenten. Der neue Detektor für Stickstoffverbindungen ist dabei so empfindlich, dass er sogar Konzentrationen von 50 ppb (parts per billion) erfassen kann – das entspricht auf 1.000 Tonnen Gemisch nur 50 Gramm Stickstoffverbindungen.

Damit war die Grundlage geschaffen, um ein Konzept für die Abtrennung dieser Komponenten zu entwickeln. Für alle Komponenten wurden zunächst Siedepunkte und andere thermodynamische Eigenschaften bestimmt. Die so ermittelten Stoffdaten flossen in Computersimulationen ein, die zeigten, welche unerwünschten Komponenten sich aus dem FCC-C4-Strom vergleichsweise einfach durch Destillation abtrennen lassen.

#### WIE WIRKEN SICH VERUNREINIGUNGEN AUS?

„Im nächsten Schritt haben wir uns auf die verbleibenden Komponenten konzentriert, die nicht durch Destillation entfernt werden können“, erläutert Dr. Stephan Peitz, der im Rahmen der Verfahrensentwicklung für die Durchführung der Laborversuche verantwortlich war. Dieser Schritt fand in Versuchsreaktoren statt mit einer Länge von höchstens drei Metern und einem Durchmesser von maximal drei Zentimetern.

In diese Versuchsreaktoren leiteten die Forscher synthetische C4-Ströme ein – synthetisch deshalb, weil sie unterschiedliche Mengen der Verunreinigungen zugesetzt hatten, die sie zuvor im FCC-C4 gefunden hatten. „Mit diesen verunreinigten Strömen haben wir wichtige Prozesse aus dem Produktionsverbund nachgestellt und getestet, wie sich die Verunreinigungen auf Katalysatoren und Prozesse auswirken“, sagt Peitz. So sammelten die Forscher Informationen darüber, ob und welche Mengen an unerwünschten Komponenten der Produktionsverbund toleriert.

#### EIGENE ENTWICKLUNGEN STATT LÖSUNGEN VON DER STANGE

Probenanalysen, Computersimulationen und Untersuchungen der katalysierten Prozesse liefen dabei nicht nacheinander, sondern parallel und iterativ ab – ansonsten wäre es nicht möglich gewesen, innerhalb weniger Jahre ein effektives und wirtschaftliches Reinigungsverfahren für den FCC-C4-Strom zu entwickeln. Denn das ursprüngliche Vorhaben, den großtechnischen Reinigungsprozess einzukaufen, musste schnell verworfen werden: Entweder trennten die am Markt erhältlichen Reinigungsverfahren die Katalysatorgifte nicht ausreichend ab, oder sie waren nicht wirtschaftlich, weil sie zu viel Energie verbrauchten oder zu viel Abfall produzierten.

Deshalb erarbeiteten die Forscher von Performance Intermediates gemeinsam mit Kollegen aus der Verfahrenstechnik, dem Engineering und der Produktion einen eigenen Prozess. Sein offensichtlichster Teil, gleichsam das Wahrzeichen, ist eine 90 Meter hohe Destillationskolonne im Chemiepark Marl. Darin werden Isobutan und andere leichtsiedende Komponenten aus dem FCC-C4-



**Dr. Markus Winterberg**  
war Projektleiter bei  
der Verfahrensentwicklung.



**Dr. Stephan Peitz**  
verantwortete die Durchführung  
der Laborversuche.

Strom abgetrennt. Ein anderer Prozessteil entfernt schwefelhaltige Verunreinigungen, indem er sie chemisch in höhersiedende Verbindungen umwandelt, die dann ebenfalls destillativ entfernt werden können. Weitere Reinigungsstufen basieren auf sogenannten Adsorptionsbetten: großformatigen Schichten aus Materialien, die die Katalysatorgifte binden.

Die gesamte Reinigungsanlage ging 2015 in Betrieb und bereitet seither pro Tag mehrere Hundert Tonnen FCC-C4 auf. „Evonik ist damit als einziges Chemieunternehmen in der Lage, diesen C4-Strom als Rohstoff für die Herstellung von Spezialchemikalien zu nutzen“, bestätigt Winterberg. Für diese Leistung wurde das Entwicklerteam Ende 2017 mit dem unternehmenseigenen Innovationspreis ausgezeichnet. Die Anlage verringert nicht nur die Abhängigkeit der Verbundproduktion von Crack-C4, sondern ermöglicht auch, die Produktionskapazitäten für die nachgefragten C4-basierten Chemikalien zu erhöhen. Das Verfahren ist so erfolgreich, dass die Reinigungsanlage derzeit erweitert wird: Noch in diesem Jahr will Performance Intermediates die Menge an FCC-C4, die mit dem neu entwickelten Reinigungsverfahren aufbereitet werden kann, kräftig erhöhen und seine Position als Technologieführer weiter festigen. —