



**Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg**

**Fakultät Life Sciences**

Simulation und Optimierung eines Prozesses zur Herstellung von Cumol

Bachelorarbeit

Verfahrenstechnik

vorgelegt von

**Franciscus Xaverius Twinkie, Augitito**



Hamburg

am 13. Februar 2020

**Gutachter:** Prof. Dr.-Ing.

Marc, Hölling

(HAW Hamburg)

**Gutachter:** Prof. Dr.

Anika, Sievers

(HAW Hamburg)



## **Eidesstaatliche Erklärung**

Ich versichere, dass ich vorliegende Arbeit ohne fremde Hilfe selbstständig verfasst und nur die angegebenen Hilfsmittel benutzt habe. Wörtlich oder dem Sinn nach aus anderen Werken entnommene Stellen sind unter Angabe der Quelle kenntlich gemacht

---

Ort, Datum

---

Unterschrift



## Zusammenfassung

Cumol stellt eine wichtige Grundchemikalie für die Herstellung von Phenol und Aceton dar. „Die weltweite Nachfrage an Cumol belief sich im Jahr 2000 auf 8.607.235 Tonnen und stieg im Jahr 2011 auf 12.394.375 Tonnen. Bis 2020 wird eine Nachfrage von 17.988.934 Tonnen erwartet“ (CompaniesandMarkets, 2013), so dass es sich hierbei um einen wichtigen verfahrenstechnischen Prozess handelt. Nach Merchant Research & Consulting Ltd. In dem Artikel „Cumene: 2019 World Market Outlook and Forecast up to 2028“ wird ein Wachstum des Cumolmarktes von etwas mehr als 4% pro Jahr erwartet. Cumol wird immer wichtiger, daher muss der Produktionsprozess untersucht werden und bessere Ideen müssen gefunden werden, um den Prozess zu optimieren, die Produktivität zu erhöhen und den Energieverbrauch zu senken. Mit der Entwicklung der Technologie ist es jetzt möglich, mit dem Simulationsprogramm wie *DWSIM - Open Source Chemical Process Simulator*, einen bestimmten Prozess zu simulieren und optimieren.

Diese Bachelorarbeit beschreibt die Auslegung, Simulation und Optimierung einer Cumol-Produktionsanlage. In dieser Arbeit wird auch der Unterschied zwischen der Cumol-Herstellung in Gas- und Flüssigphase ausgedrückt, indem die Energieverbräuche, die Produkte usw. aus den beiden Prozessphasen verglichen werden. Aus dieser Arbeit wird es deutlich behauptet, warum die Industrien heutzutage Cumol in der Flüssigphase herstellen.

Bei der Optimierung der Simulation der Cumol-Produktionsanlage ist die Variable B/P-Molverhältnis sehr wichtig (Dimian und Bildea, 2008, S. 180). In dieser Simulationsarbeit wird die Anlage mit mehreren Molverhältnissen durchgeführt, um die insgesamt bessere Leistung der Anlage und bessere Selektivität an Cumol rauszufinden. Außerdem ist der Energieverbrauch der Anlage abhängig von dem B/P-Molverhältnis. (Dimian und Bildea, 2008, S. 180)

Einige der wichtigsten Einheiten in der verfahrenstechnischen Anlage sind der Reaktor und Abscheider. Zwei unterschiedliche Reaktoren für zwei unterschiedliche Prozessphase werden in dieser Simulationsarbeit ausgelegt. Der verwendete Katalysator für die flüssig- und gasförmige Reaktion ist auch unterschiedlich, was zu verschiedener Reaktionskinetik führt. Der verwendete Katalysator für die Alkylierung in der Gasphase bildet Propylenoligomer wegen seiner starken Säurestellen (Dimian und Bildea, 2008, S. 176), was zu eine Erhöhung des B/P-Molverhältnisses auf mindestens 7:1 und Erhöhung des Energieverbrauches führt (Schmidt, 2005, S. 90). Aus dieser Simulationsarbeit wird verdeutlicht, dass die Cumol-Herstellung in der Flüssigphase mit dem gleichen B/P-Molverhältnis mehr Cumol mit niedrigerem Energieverbrauch produzieren.



## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung und Aufgabenstellung</b> .....	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b> .....	<b>3</b>
2.1	<b>Herstellung von Cumol</b> .....	<b>3</b>
2.2	<b>Cumoleigenschaften</b> .....	<b>5</b>
2.3	<b>Chemische Reaktionstechnik</b> .....	<b>5</b>
2.3.1	<b>Katalysator für die Alkylierung</b> .....	<b>7</b>
2.3.2	<b>Thermischer Effekt</b> .....	<b>9</b>
2.3.3	<b>Selektivität</b> .....	<b>9</b>
2.3.4	<b>Reaktionskinetik</b> .....	<b>10</b>
<b>3</b>	<b>Simulation der Prozesse</b> .....	<b>12</b>
3.1	<b>Alkylierung von Benzol mit Propylen</b> .....	<b>12</b>
3.2	<b>Trennprozesse</b> .....	<b>17</b>
3.2.1	<b>Entpropanierung</b> .....	<b>17</b>
3.2.2	<b>Benzolrückgewinnung</b> .....	<b>19</b>
3.2.3	<b>Cumol-Destillation</b> .....	<b>23</b>
3.3	<b>Transalkylierung von DIPB mit Benzol</b> .....	<b>25</b>
<b>4</b>	<b>Ergebnisse der Optimierung</b> .....	<b>28</b>
4.1	<b>Prozesssimulation der Cumolanlage in der Gasphase</b> .....	<b>30</b>
4.2	<b>Prozesssimulation der Cumolanlage in der Flüssigphase</b> .....	<b>31</b>
<b>5</b>	<b>Diskussion und Ausblick</b> .....	<b>32</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b> .....	<b>34</b>



## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Das konzeptionelles Fließdiagramm für die Herstellung des Cumols von Dow-Kellog Prozess. (Dimian und Bildea, 2008, S.175) .....	4
Abbildung 2: Diagramm des adiabatischen Temperaturanstieg als Funktion von dem B/P-Molverhältnis bei der Eingangstemperatur von 165°C (Dimian und Bildea, 2008, S.180).....	9
Abbildung 3: Diagramm der Selektivität an Cumol als die Funktion des B/P-Molverhältnis bei der Eingangstemperatur von 165°C (Dimian und Bildea, 2008, S.181).....	10
Abbildung 4: Simulationsdiagramm für die gasförmige und flüssigförmige Alkylierung von Benzol mit Propylen .....	13
Abbildung 5: Der Konzentrationsverlauf der Komponente von dem Produkt aus dem Reaktor, Temperatur- und Druckverlauf bei der gasförmigen Alkylierung von Benzol mit Propylen .....	14
Abbildung 6: Der Konzentrationsverlauf der Komponente von dem Produkt aus dem Reaktor, Temperatur- und Druckverlauf bei der flüssigförmigen Alkylierung von Benzol mit Propylen .	16
Abbildung 7: Das Diagramm der Selektivität an Cumol als Funktion des B/P-Molverhältnisses in der Alkylierungsreaktion der beiden Prozessphasen .....	16
Abbildung 8: Das thermodynamische Modell für die Destillationskolonne (einschließend die thermische Leitfähigkeit, thermische Zustandsgleichung, Aktivitätskoeffizient, der Dampfdruck, die Enthalpie).....	17
Abbildung 9: Simulationsdiagramm für die Trennung des Propans.....	18
Abbildung 10: Das Simulationsdiagramm für die Benzolrückgewinnung .....	20
Abbildung 11: Die Fließschema der MED zur Energieeinsparung (Dimian und Bildea, 2008,S. 189).....	21
Abbildung 12: Simulationsdiagramm für die Benzoldestillation mit MED .....	22
Abbildung 13: Simulationsdiagramm von der Cumol-Destillationskolonne .....	24
Abbildung 14 Das Simulationsdiagramm für den Prozessteil Transalkylierung .....	25
Abbildung 15: Simulationsdiagramm von dem kompletten Prozess der Cumol-Herstellung in den beiden Prozessphasen .....	29



## Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: physikalische Eigenschaften der im Produkt aus dem Alkylierungsreaktor entstehenden Komponenten (Dimian und Bildea, 2008, S. 176).....	4
Tabelle 2: Spezifikationen für Cumol (Kellog und amp; Root, LLC, 2012) .....	4
Tabelle 3: Physikalische Eigenschaften von Cumol (Lide und Haynes, 2017, S. 332).....	5
Tabelle 4: Physikalische Eigenschaften des Katalysators für die Cumol-Herstellung in der Gasphase (Turton et al., 2012, S, 1142) .....	7
Tabelle 5: Physikalische Eigenschaften von dem Zeolith-Katalysator (Dimian und Bildea, 2008, S. 180) .....	8
Tabelle 6: Molanteile, Temperatur, Druck, und Molstrom einer Strömung in der gasförmigen Cumol-Herstellung.....	13
Tabelle 7: Molanteile, Temperatur, Druck, und Molstrom einer Strömung in der flüssigförmigen Cumol-Herstellung.....	15
Tabelle 8: Spezifische Daten der Eingangsströmungen der Propankolonne in beiden Prozessphasen .....	18
Tabelle 9: Spezifische Daten der Austrittsströmungen der Propankolonne in beiden Prozessphasen .....	19
Tabelle 10: Energieverbräuche der Propankolonne in den beiden Prozessphasen.....	19
Tabelle 11: Spezifische Daten der Strömungen bei der Benzoldestillationskolonne in den beiden Prozessphasen.....	20
Tabelle 12: Energieverbräuche der Benzolkolonne in den beiden Prozessphasen.....	20
Tabelle 13: Spezifische Daten der Strömungen bei der MED Benzol-Destillationskolonne der Cumol-Herstellung in der Gasphase .....	22
Tabelle 14: Spezifische Daten der Strömungen bei der MED Benzol-Destillationskolonne der Cumol-Herstellung in der Flüssigphase .....	22
Tabelle 15: Energieverbräuche der MED Benzoldestillationskolonne in den beiden Prozessphasen .....	23
Tabelle 16: Spezifische Daten der Strömungen bei der Cumol-Destillationskolonne in den beiden Prozessphasen .....	24
Tabelle 17: Energieverbräuche der Cumol-Destillationskolonne in den beiden Prozessphasen .....	24
Tabelle 18: Spezifische Daten der Strömungen bei dem Transalkylierungsreaktor in den beiden Prozessphasen .....	26
Tabelle 19: Spezifische Daten der Strömungen bei der DIPB-Kolonne in den beiden Prozessphasen .....	26
Tabelle 20: Energieverbräuche der DIPB-kolonne in den beiden Prozessphasen.....	27
Tabelle 21: Produktivität von Cumol in den beiden Prozessphasen nach der Transalkylierungsreaktion .....	27
Tabelle 22: Ergebnisse der Simulation von Cumol-Herstellung in der Gasphase mit dem B/P-Molverhältnis von 4:1.....	30
Tabelle 23: Ergebnisse der Simulation von Cumol-Herstellung in der Gasphase mit dem B/P-Molverhältnis von 7.....	30
Tabelle 24: Ergebnisse der Simulation von Cumol-Herstellung in der Flüssigphase mit dem B/P-Molverhältnis von 4:1.....	31



Tabelle 25: Ergebnisse der Simulation von Cumol-Herstellung in der Flüssigphase mit dem B/P-Molverhältnis von 7..... 31

## Symbolverzeichnis

Symbol	Einheit	Bedeutung
$M_w$	—	Molekülmasse
$T_f$	$^{\circ}C$	Temperatur von dem Gefrierpunkt
$T_b$	$^{\circ}C$	Temperatur von dem Siedepunkt
$\rho$	$\frac{kg}{m^3}$	Dichte
$n_D$	—	Brechungsindex
$x$	—	Molanteil
$d_p$	$^{\circ}C$	Partikeldurchmesser
$\rho_{kat.}$	$\frac{kg}{m^3}$	Dichte des Katalysators
$\varepsilon$	—	Hohlraumanteil
$c$	$\frac{mol}{l}$	Konzentration des Stoffes
$c_B$	$\frac{mol}{l}$	Konzentration von Benzol
$c_P$	$\frac{mol}{l}$	Konzentration von Propylen
$c_C$	$\frac{mol}{l}$	Konzentration von Cumol
$r$	$\frac{mol}{kg_{kat.} \cdot s}$	Reaktionsgeschwindigkeit in der katalytischen Reaktion
$k_{Gasphase}$	$\frac{l^2}{kg_{kat.} \cdot mol \cdot s}$	Geschwindigkeitskoeffizient in der gasförmigen Alkylierungsreaktion
$k_{Flüssigphase}$	$\frac{kg}{m^3 \cdot s}$	Geschwindigkeitskoeffizient in der flüssigförmige Alkylierungsreaktion
$R$	$\frac{J}{mol \cdot K}$	Gaskonstante
$Q$	$kW$	Energie
$Q_h$	$kW$	Wärmeenergie
$Q_c$	$kW$	Kühlenergie



Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg  
*Hamburg University of Applied Sciences*





## 1 Einleitung und Aufgabenstellung

Isopropylbenzol, allgemein bekannt als Cumol, ist ein der wichtigsten Grundchemikalien, deren Herstellung etwa 7-8% des weltweiten Propylens verbraucht. Cumol wird bei der Herstellung von Phenol und seinem Nebenprodukt Aceton im industriellen Bereich verwendet. (Dimian und Bildea, 2008, S.173)

Cumol ist auch das Ausgangsmaterial bei der Herstellung von Methylstyrol. Cumol-Herstellung begann ursprünglich zur Erfüllung des Bedarfs an dem Flugtreibstoff während des zweiten Weltkriegs zwischen dem Jahr 1939 und 1945. Die geringfügigen Verwendungen von Cumol können außerdem als Verdüner für Farben umgefasst werden; als Bestandteilen einiger Lösungsmittel auf Erdölbasis, wie Naphtha. Cumol ist ebenfalls ein gutes Lösungsmittel für Fette und Harze, es wurde in vielen seiner industriellen Anwendungen als Ersatz für Benzol vorgeschlagen. (PubChem, 2005; Schmidt, 2005, S.89)

Mit einer Marktnachfrage von 12,4 Millionen Tonnen im Jahr 2011 entspricht dies einer Cumolproduktion von fast 20 Milliarden Dollar pro Jahr (Stephan, 2013). Der Bedarf an Cumol hängt jedoch zum größten Teil von der Verwendung von Phenolderivaten und Phenolharze ab, was zu einer Erhöhung der Produktionsraten für Cumol geführt hat. Das größte Phenolderivat ist Bisphenol-A (BPA), was das Polycarbonat (PC) und Epoxid versorgt. PC- und Epoxidharze werden in vielen Bereichen wie im Elektronik- und Automobilindustrie verwendet. Der wachsende Markt für Phenolharze wird von der Wohnbau- und Möbelindustrie angetrieben. (Schmidt, 2005, S.93, S.101)

Die Herstellung von Cumol kann sowohl in Gas- als auch Flüssigphase durchgeführt werden. Damals wurde Cumol am meisten durch die Friedel-Craft-Alkylierung von Benzol mit Propylen an einem Säurekatalysator wie feste Phosphorsäure (SPA) oder Aluminiumoxid gasförmig hergestellt. Neuerlich wird Cumol an dem Zeolith-basierenden Katalysator flüssigförmig erzeugt, da der Katalysator aktiver und selektiver für die Alkylierung von Benzol mit Propylen ist und der Prozess in der Flüssigphase wird mit der niedrigeren Temperatur durchgeführt werden. (Dandekar et al., 2005, S. 1)

Diese Bachelorarbeit befasst sich mit der Auslegung, Simulation und Optimierung einer Cumol-Produktionsanlage mit dem Simulationsprogramm *DWSIM - Open Source Chemical Process Simulator*. Ziele dieser Arbeit sind Folgende:

- Vergleichung zwischen der Prozessen in Gas- und Flüssigphase
- Auslegung eines auf Zeolith-Katalysator basierenden Cumol-Produktionsanlage.
- Optimierung des Prozesses zur Erhöhung der Produktivität der Anlage und gleichzeitig zur Einsparung des Energiebedarfs



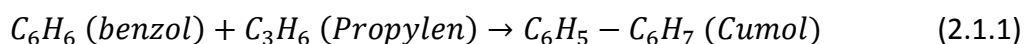
Die von Dimian und Bildea (2008) und Turton et al. (2012) beschriebenen Prozessen werden als Grundlage für die Simulation der Prozesse herangezogen und liefern die relevanten Daten, die für die Simulation des Prozesses benötigt werden. Die in die Anlage zugeführte Rohstoffe sind Benzol und Propylen, die wenig Propan enthält. Die Herstellung von Cumol wird in dieser Arbeit mit den Betriebsbedingungen wie der Druck und die Temperatur aus den oben genannten Literaturen durchgeführt.

## 2 Theoretische Grundlagen

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit den theoretischen Grundlagen, die aus den Literaturen gesammelt werden und die Basis für die Simulationsarbeit bilden. Diese umfassen die wichtigen Sachen wie die Herstellung von Cumol, die Eigenschaften von Cumol und die chemische Reaktionstechnik sowie der Katalysator für die Alkylierung, der thermische Effekt der Alkylierungsreaktion, die Selektivität und die Reaktionskinetik für die Alkylierung.

### 2.1 Herstellung von Cumol

Die Reaktion von dem Herstellungsprozess von Cumol ist grundsätzlich die Addition von Benzol an Propylen, welches Alkylierung heißt:



Bei der Alkylierung von Benzol mit Propylen entsteht eine unerwünschte Nebenreaktion, die eine Menge an Diisopropylbenzol (DIPB)  $C_6H_5 - (C_3H_7)_2$  bildet und aufgrund der Formselektivität des Katalysators können Triisopropylbenzolen (TIPB)  $C_6H_5 - (C_3H_7)_3$  und andere Nebenprodukte entstehen. „Unter normalen Bedingungen erzeugt die Hauptreaktion eine Wärmemenge von  $-113 \frac{kJ}{mol}$ “. (Dimian und Bildea, 2008, S. 173-174)

Der Unterschied zwischen der Cumol-Herstellung in Gas- und Flüssigphase liegt bei der Alkylierung von Benzol mit Propylen vor. Die Herstellung in der Gasphase bezeichnet die Alkylierung an Phosphorsäure-Katalysatoren unter der Temperatur von  $350 \text{ }^\circ\text{C}$  und dem hohen Druck von  $31 \text{ bar}$ , wobei die Mischung von Benzol und Propylen im Reaktoreingang gasförmig ist (Turton et al., 2012). Und die Alkylierung in der Flüssigphase beschreibt die Reaktion, die mit dem Zeolith-Katalysator unter der Eingangstemperatur zwischen  $160$  bis  $240 \text{ }^\circ\text{C}$  und der Druck von etwa  $35 \text{ bar}$  durchgeführt wird. (Dimian und Bildea, 2008, S. 174)

Bei der Abbildung 1 wird ein konzeptionelles Fließdiagramm für die Herstellung des Cumols von Dow-Kellog dargestellt. Mit dem Molverhältnis von Benzol und Propylen mehr als 4: 1 wird die Alkylierungsreaktion in einem Reaktor R-1 durchgeführt. Das Produkt aus dem Alkylierungsreaktor werden dann zu dem Destillationsabschnitt geleitet, in diesem Fall in die vier Destillationskolonnen: Entpropanierungskolonnen (C-1), Benzolrückgewinnungskolonnen (C-2), Cumol Destillationskolonnen (C-3) und DIPB Rückgewinnungskolonnen (C-4). Mit den Daten aus der Tabelle 1 werden dann die Kolonne so eingestellt, dass die Komponenten getrennt werden können. Die unerwünschten DIPBs

werden zu dem Transalkylierungsreaktor R-2 mit Benzol zurückgeführt, um zusätzliches Cumol zu bilden. (Dimian und Bildea, 2008, S. 173-174)

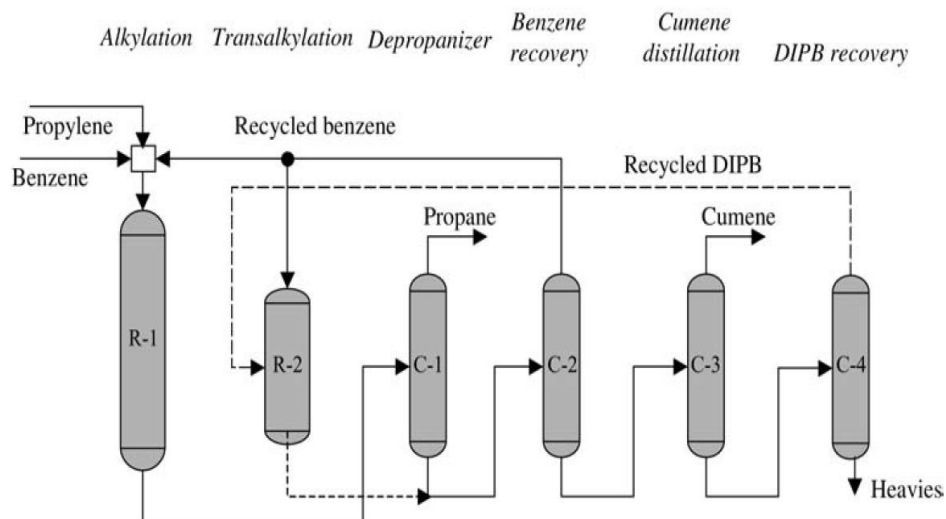


Abbildung 1: Das konzeptionelles Fließdiagramm für die Herstellung des Cumols von Dow-Kellog Prozess. (Dimian und Bildea, 2008, S.175)

Tabelle 1: physikalische Eigenschaften der im Produkt aus dem Alkylierungsreaktor entstehenden Komponenten (Dimian und Bildea, 2008, S. 176)

Komponente	Chem. Formel	$M_w$	$T_f$ in °C	$T_b$ in °C	$P_c$ in bar	$T_c$ in °C
Propylen	$C_3H_6$	42	-183,3	-47,6	46,0	91,75
Propan	$C_3H_8$	44	-181,7	-42,17	42,5	96,67
Benzol	$C_6H_6$	78	6,6	80,1	48,8	289,0
1-Hexen	$C_6H_{12}$	84	-139,7	63,5	31,4	231,0
Cumol	$C_6H_5 - C_3H_7$	120	-96,9	152,5	32,1	357,85
DIPB	$C_6H_4 - (C_3H_7)_2$	162	-	210,5	-	-
TIPB	$C_6H_4 - (C_3H_7)_3$	204	-	232	-	-

Mit dem Dow-Kellogg Prozess sollen die höheren Ausbeuten und die höhere Reinheit des Cumols mehr als 99,9 % erreicht werden. Außerdem bietet der Prozess einen niedrigen Energieverbrauch und niedrige Kapitalkosten. ("Kellogg/Dow detail new route to cumene", 1994)

Tabelle 2: Spezifikationen für Cumol (Kellogg und amp; Root, LLC, 2012) beschreibt die typische Spezifikation für das Cumolprodukt nach Dow-Kellogg.

Tabelle 2: Spezifikationen für Cumol (Kellogg und amp; Root, LLC, 2012)

Komponente	Reinheit
Cumol	>99,9 Gew.-%
N-Propylbenzol	<200 ppm
Ethylbenzol	<100 ppm
Butylbenzol	<100 ppm
Bromindex	<5

## 2.2 Cumoleigenschaften

„Cumol ist eine farblose Flüssigkeit mit aromatischem oder gasartigem Geruch. Es ist weniger dicht als Wasser und wasserunlöslich“. (PubChem, 2005)

Tabelle 3 zeigt die grundlegende physikalische Konstante von Cumol. Der Schmelzpunkt des Cumols gilt bei dem Druck von 0,05 *bar*, der Siedepunkt bei 0,2 *bar*. Die Dichte des Cumols gilt bei der Temperatur von 25 °C und die Brechzahl bei 20 °C. Cumol ist mit Aceton, Benzol und Ethanol löslich. (Lide und Haynes, 2017, S. 3, S. 332)

Der kritische Druck von Cumol ist bei 32,1 *bar* und die kritische Temperatur bei 357,85 °C. (Dimian und Bildea, 2008, S. 176)

Tabelle 3: Physikalische Eigenschaften von Cumol (Lide und Haynes, 2017, S. 332)

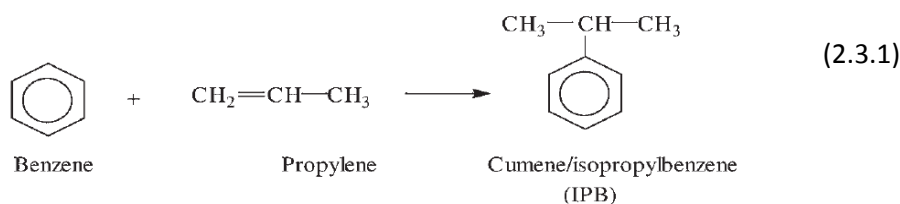
Name	Formel	$M_w$	$T_f$ in °C	$T_b$ in °C	$\rho$ in $\frac{g}{cm^3}$	$n_D$
Isopropylbenzol	$C_9H_{12}$	120,191	-96,01	152,4	0,864	1,4915

## 2.3 Chemische Reaktionstechnik

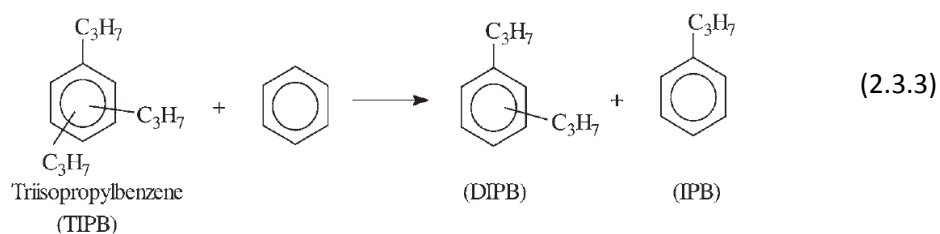
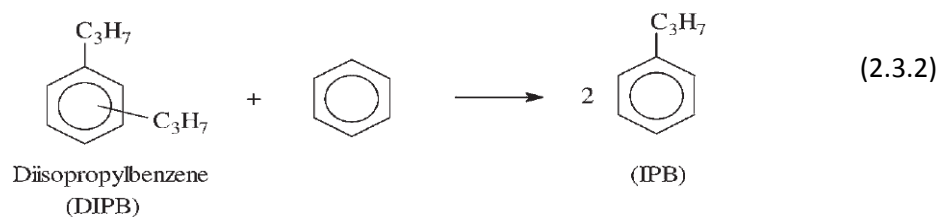
Bei diesem Herstellungsprozess sind die Hauptreaktionen Alkylierung und Transalkylierung. Die anderen beteiligten Reaktionen umfassen die Polyalkylierung, sekundäre Isomerisierung und Dimerisierung. Bei der Alkylierung von Benzol mit Propylen werden die sauren Stellen des Katalysator protoniert, was zu Iso-, Di- und Triisopropylbenzol führt. Durch die Isomerisierung entsteht n-Propylbenzol als Verunreinigung. Die Wahl des Katalysators mit der hohen Selektivität und Aktivität ist sehr wichtig, andernfalls wird die Bildung von Propylenoligomeren und anderen Kohlenwasserstoffspezies begünstigt. (Dimian und Bildea, 2008, S. 176)

Folgendes sind die gesamten chemischen Reaktionen bei der Cumol-Herstellung (Dimian und Bildea, 2008, S. 176-177) :

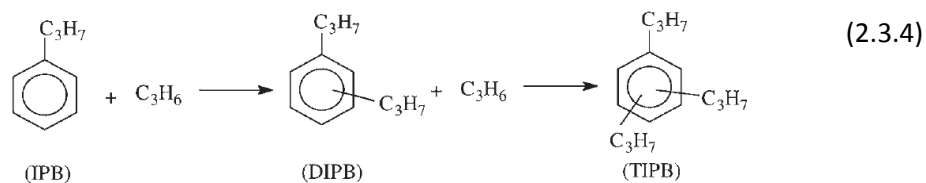
Alkylierung:



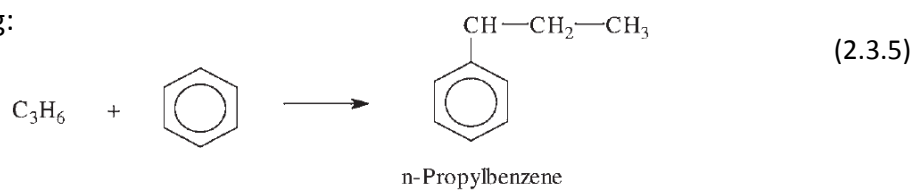
Transalkylierung:



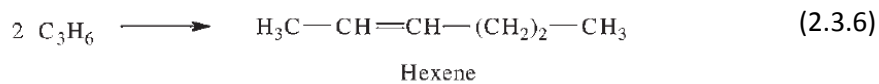
Polyalkylierung:



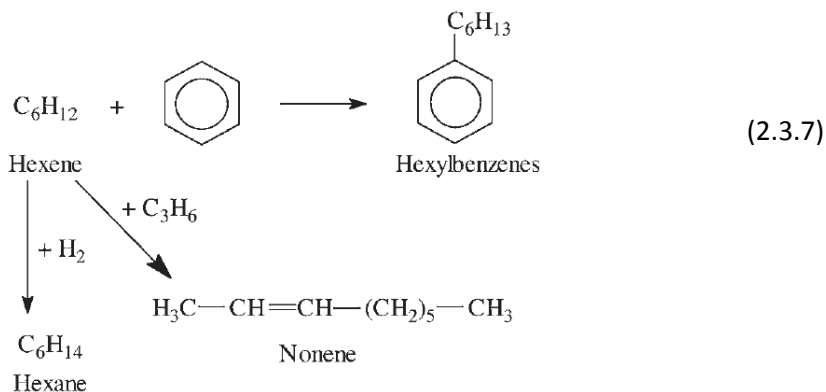
Sekundäre  
Isomerisierung:



Dimerisierung:



Nebenreaktionen:



### 2.3.1 Katalysator für die Alkylierung

Cumol wird durch Alkylierung von Benzol mit Propylen an einem Säurekatalysator hergestellt. Normalerweise werden Katalysatoren wie Aluminiumchlorid, Chlorwasserstoff und feste Phosphorsäure (SPA) verwendet. (Schmidt, 2005, S. 90)

Für die Alkylierungsreaktion in der Gasphase sind die Daten von dem Katalysator in der Tabelle 4 angegeben. Der verwendete Katalysator für die Reaktion ist Phosphorsäurekatalysator.

Tabelle 4: Physikalische Eigenschaften des Katalysators für die Cumol-Herstellung in der Gasphase (Turton et al., 2012, S. 1142)

Partikelporosität	0,5
Partikeldichte	$1600 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Partikeldurchmesser	3 mm

Nachteile der Verwendung von fester Phosphorsäure (SPA) (Schmidt, 2005, S. 90):

- Der starksäuere Katalysator begünstigt die Oligomerisierung von Propylen, welches vermieden werden und die Ausbeute an Cumol auf rund 95 % begrenzt.
- Das B/P-Molverhältnis muss dazu mindestens 7: 1 sein, welches das Kosten für die Trennungen erhöht
- Nichtregenerierbarkeit des Katalysators

Nachteile der Verwendung von Aluminiumchlorid als Katalysator (Ramli et al., 2007, S.84):

- Hohe Korrosion
- Umweltgefährdung

Heutzutage wird die Alkylierungsreaktion öfter in der Flüssigphase mithilfe des Zeolith-Katalysators durchgeführt. Der Herstellungsprozess mit diesem Katalysator ist umweltfreundlich und bietet Vorteile wie z.B. hohe Produktivität und Selektivität (Dimian und Bildea, 2008, S. 178). Außerdem wird der Katalysator bei der Alkylierung in der Flüssigphase ständig mit den Reaktanten gewaschen, was die Bildung von Kohlenstoff an den Katalysator verhindert. (Inwood et al., 1982)

Zeolith-Katalysator besteht aus Molekularsiebe, die im Allgemeinen Siliciumoxid und Aluminiumoxid-Tetraedern enthalten. Die Verwendung des Zeolith-Katalysators bietet die Vorteile wie hohe Selektivität an Cumol um > 90 %, den Propylenumsatz um > 98 % und die hohe Aktivität in der Cumol-Synthese. Der Katalysator kann im Temperaturbereich von 160 – 220 °C und bei dem Molverhältnis von Benzol/Propylen von 3,5 – 7,2. (Dimian und Bildea, 2008, S. 178 - 180)

Tabelle 5 beschreibt die physikalischen Eigenschaften von dem Zeolith-Katalysator, die bei der Simulation der Alkylierungsreaktor verwendet werden.

Tabelle 5: Physikalische Eigenschaften von dem Zeolith-Katalysator (Dimian und Bildea, 2008, S. 180)

Oberfläche	$500 - 800 \frac{m^2}{g}$
Partikelporosität	0,5
Partikeldichte	$1000 \frac{kg}{m^3}$
Partikeldurchmesser	2,4 mm
Hohlraumanteil	0.35 - 0.4
Tortuosität	5



### 2.3.2 Thermischer Effekt

Bei der Alkylierungsreaktion von Benzol mit Propylen geht es um eine exotherme Reaktion. Die durch die Reaktion entstehende Wärme kann dann in der Anlage für z.B. die Erzeugung des Dampfes ausgenutzt werden. Die Abbildung 2 stellt den adiabatischen Temperaturanstieg der Reaktion als Funktion von dem Molverhältnis von Benzol/Propylen unter der Eingangstemperatur von 160 °C, 170 °C und 180 °C dar. Die Erhöhung des Molstroms von Benzol kann den Temperaturanstieg im Reaktor reduzieren. Wie in dem unten dargestellten Diagramm gezeigt, spielt die Eingangstemperatur nur so wenig Rolle, dass diese auch in der gasförmigen Cumol-Herstellung, die eine höhere Eingangstemperatur benötigt, gilt. (Dimian und Bildea, 2008, S. 180)

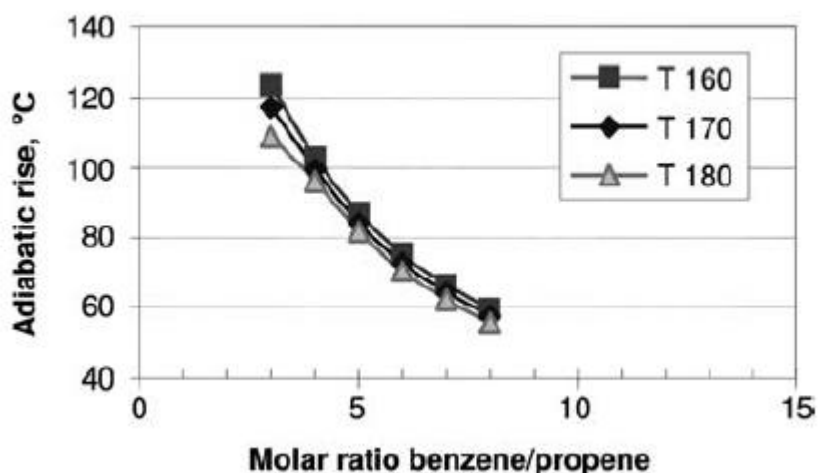


Abbildung 2: Diagramm des adiabatischen Temperaturanstieg als Funktion von dem B/P-Molverhältnis bei der Eingangstemperatur von 165°C (Dimian und Bildea, 2008, S.180)

### 2.3.3 Selektivität

Die Selektivität von der Alkylierungsreaktion von Benzol mit Propylen wird sehr stark von dem B/P-Molverhältnis beeinflusst. Andererseits von dem vorherigen Kapitel ergibt ein höheres B/P-Molverhältnis eine bessere Selektivität an Cumol, welches aber die Kosten für die Trennungen erhöhen kann (Dimian und Bildea, 2008, S. 180). Die Abbildung 3 zeigt die Selektivität an Cumol, die mit dem Zeolith-Katalysator erreicht werden kann, als Funktion des B/P-Molverhältnisses unter der Eingangstemperatur von 180 °C und 220 °C, In dem Fall, dass die Alkylierungsreaktion nur DIPB als das Nebenprodukt erzeugt. In dem Diagramm wird gezeigt, dass die Selektivität an Cumol Mit dem zunehmenden B/P-Molverhältnis verbessert wird. (Dimian und Bildea, 2008, S. 180-181)

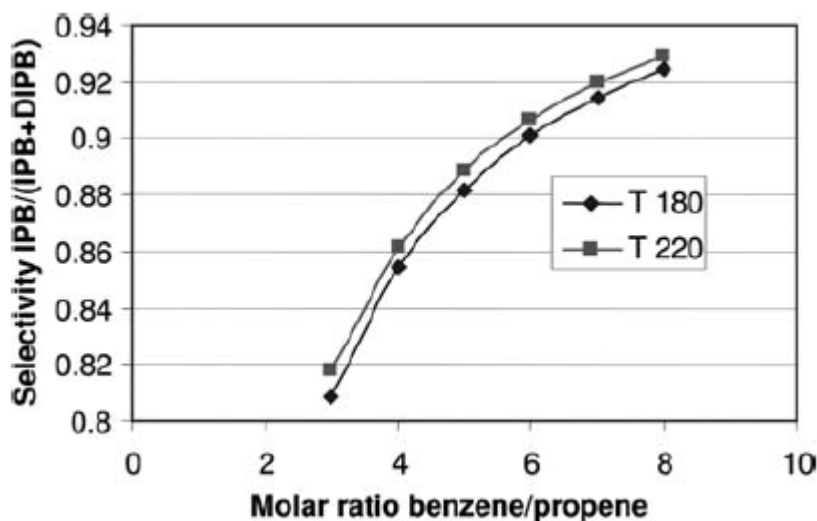


Abbildung 3: Diagramm der Selektivität an Cumol als die Funktion des B/P-Molverhältnis bei der Eingangstemperatur von 165°C (Dimian und Bildea, 2008, S.181)

Die Formel zur Berechnung der Selektivität an Cumol kann aus dem Stoffmengenanteil von Cumol und DIPB in dem Produkt aus dem Reaktor beschrieben werden (Dimian und Bildea, 2008, S. 181) :

$$\text{Selektivität an Cumol} = \frac{\chi_{\text{Cumol}}}{\chi_{\text{Cumol}} + \chi_{\text{DIPB}}} \quad (2.3.3.1)$$

### 2.3.4 Reaktionskinetik

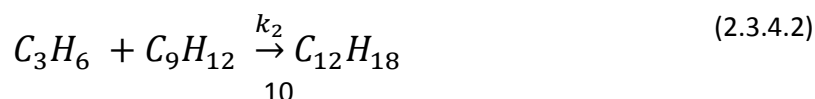
Die folgenden Daten für die Reaktionskinetik der Alkylierungsreaktion von Benzol mit Propylen umfassen die Reaktionsgleichungen, die bei der Simulationsarbeit zur Auslegung des Alkylierungsreaktors verwendet wird. In dieser Simulationsarbeit wird Cumol gas- und flüssigförmig mit den verschiedenen Katalysatoren hergestellt. Die Reaktionsgeschwindigkeit wird von dem verwendeten Katalysator beeinflusst (Dimian und Bildea, 2008, S. 180). Die physikalischen Daten für die Katalysatoren werden in dem Kapitel 2.3.1 beschreibt. Die Reaktionskinetik für die Gasphase wird von Turton et al (2012) spezifiziert und für die Flüssigphase von Dimian und Bildea (2008).

Die Reaktionskinetik für die Cumolreaktionen sind folgende:

Alkylierung von Benzol mit Propylen



Unerwünschte Nebenreaktion



Bei der Alkylierung in der Gasphase handelt es sich um eine heterogene katalytische Reaktion. Die folgenden Reaktionsgeschwindigkeiten stellen die Reaktionskinetik für die Alkylierungsreaktion an dem Phosphorsäure-Katalysator dar. Die Geschwindigkeitskoeffizienten sind folgende dargestellt (Turton et al., 2012, S. 1142) :

Benzol + Propylen -> Cumol

$$r_1 = k_{Gasphase,1} \cdot c_B \cdot c_P \text{ in } \frac{\text{mol}}{\text{kg}_{kat} \cdot \text{s}} \quad (2.3.4.3)$$

$$k_{Gasphase,1} = 3,5 \cdot 10^7 \frac{\text{l}^2}{\text{kg}_{kat} \cdot \text{mol} \cdot \text{s}} \cdot \exp\left(\frac{-104182 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}}}{R \cdot T}\right) \quad (2.3.4.4)$$

Propylen + Cumol -> DIPB

$$r_2 = k_{Gasphase,2} \cdot c_P \cdot c_C \text{ in } \frac{\text{mol}}{\text{kg}_{kat} \cdot \text{s}} \quad (2.3.4.5)$$

$$k_{Gasphase,2} = 2,9 \cdot 10^9 \frac{\text{l}^2}{\text{kg}_{kat} \cdot \text{mol} \cdot \text{s}} \cdot \exp\left(\frac{-146775 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}}}{R \cdot T}\right) \quad (2.3.4.6)$$

Die Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizienten für die flüssigförmige Alkylierungsreaktion werden von dem Arrhenius-Gesetz beschrieben. Die folgenden Geschwindigkeitsgleichungen wurden von Dimian und Bildea (2008) in einem adiabatischen Strömungsrohrreaktor getestet und können die Propylenkonversion auf 100 %. (Dimian und Bildea, 2008, S. 183)

Benzol + Propylen -> Cumol

$$k_{Flüssigphase,1} = 6510 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \cdot \exp\left(\frac{-52564 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}}}{R \cdot T}\right) \quad (2.3.4.7)$$

Propylen + Cumol -> DIPB

$$k_{Flüssigphase,2} = 450 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \cdot \exp\left(\frac{-55000 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}}}{R \cdot T}\right) \quad (2.3.4.8)$$

### 3 Simulation der Prozesse

Dieses Kapitel beschreibt aufbauend dieser Theorie die Simulation einzelnes wichtigen Prozessteils der Cumol-Anlage, die in dem Simulationsprogramm DWSIM durchgeführt wird. Die verwendete Berechnungsmethode für die Simulationsarbeit ist NRTL (Non-Random Two-Liquid). Die Cumol-Herstellung wird durch drei wichtige Prozessteile geteilt. Die Alkylierung von Benzol mit Propylen ist der wichtigste Prozessteil, da Cumol in dem Teil erzeugt wird. Das Produkt aus dem Alkylierungsteil, das eine Mischung von vielen Komponenten enthält, wird danach getrennt. Die Nebenreaktion, die bei der Alkylierungsreaktion entsteht, erzeugt Diisopropylbenzol (DIPB), welches wieder zu Cumol in dem Prozessteil Transalkylierung umgewandelt wird. Die Spezifikationen für die Reaktoren bzw. die Destillationskolonnen sowie die Daten für die Strömungen werden hier ausführlich beschreibt.

#### 3.1 Alkylierung von Benzol mit Propylen

In diesem Kapitel wird die Simulation von der Alkylierung von Benzol mit Propylen in Gas- und Flüssigphase durchgeführt. Die Betriebsbedingungen und die Daten für den Alkylierungsreaktor in der Gasphase werden von Turton et al. (2012) spezifiziert und in der Flüssigphase von Dimian und Bildea (2008).

Die Abbildung 4 stellt die Simulation der gasförmigen Alkylierung von Benzol mit Propylen an einem Phosphorsäure-Katalysator dar. Die Zufuhr für den Alkylierungsreaktor ist eine Mischung von frischem Benzol und Propylen mit 5 % Propan unter dem B/P-Molverhältnis von 4 : 1 und dem Druck von 30 *bar*, die auf 380 °C erhitzt wird. Der verwendete Reaktor für die gasförmige Alkylierungsreaktion ist ein isothermer Strömungsrohrreaktor (PFR) mit dem Volumen von 6,5  $m^3$  und der Länge von 6 *m* (Turton et al., 2012). Die benötigten physikalischen Daten für den verwendeten Katalysator werden in dem Kapitel 2.3.1 beschrieben und die Gleichungen für die Reaktionskinetik werden in dem Kapitel 2.3.4 dargestellt. Die Tabelle 6 zeigt die Zusammensetzung, den Molstrom, die Temperatur und den Druck in einer Strömung, die in den Reaktor durchfließt.

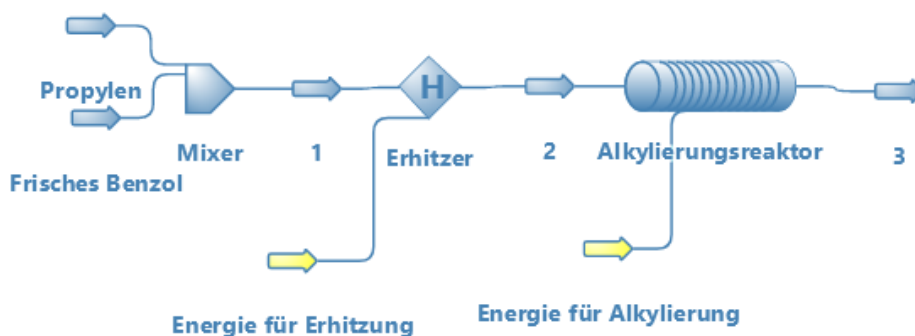


Abbildung 4: Simulationsdiagramm für die gasförmige und flüssigförmige Alkylierung von Benzol mit Propylen

Um die vergleichbaren Ergebnissen der gasförmigen Alkylierung wie in der Literaturstelle von Turton et al. (2012) zu erhalten, werden die Geschwindigkeitskoeffizienten für die Alkylierung angepasst:

$$k_{Gasphase,1} = 4,5 \cdot 10^7 \frac{l^2}{kg_{kat.} \cdot mol \cdot s} \cdot \exp\left(\frac{-104182 \frac{J}{mol}}{R \cdot T}\right) \quad (3.1.1)$$

$$k_{Gasphase,2} = 14,5 \cdot 10^9 \frac{l^2}{kg_{kat.} \cdot mol \cdot s} \cdot \exp\left(\frac{-146775 \frac{J}{mol}}{R \cdot T}\right) \quad (3.1.2)$$

Tabelle 6: Molanteile, Temperatur, Druck, und Molstrom einer Strömung in der gasförmigen Cumol-Herstellung

Strömung	Propylen	Frisches Benzol	1	2	3
$x_{Benzol}$	0,000	1,000	0,792	0,792	0,746
$x_{Propylen}$	0,950	0,000	0,198	0,198	0,004
$x_{Propan}$	0,050	0,000	0,010	0,010	0,013
$x_{Cumol}$	0,000	0,000	0,000	0,000	0,233
$x_{DIPB}$	0,000	0,000	0,000	0,000	0,004
Temperatur in °C	25,0	25,0	23,9	380,0	380,0
Druck in bar	30	30	30	30	29
Molstrom in $\frac{kmol}{h}$	105,3	400,0	505,3	505,3	406,8

Die Abbildung 5 stellt den Konzentrationsverlauf jeder Komponente, den Temperatur- und Druckverlauf als Funktion der Länge des Alkylierungsreaktor dar. Die Verweilzeit für diese Reaktion beträgt *25,24 Sekunden* und der Druckverlust im Reaktor ergibt sich *0,27 bar*. Um die isotherme Reaktionsbedingung bzw. die Temperatur konstant zu halten, wird die Energie von *12,94 kW* benötigt. Mit dem oben genannten B/P-Molverhältnis und den Betriebsbedingungen werden die Selektivität an Cumol und der Propylenumsatz von über 98 % bei der Alkylierungsreaktion erreicht. Der gesamte Energieverbrauch für die gasförmigen Alkylierung beträgt dann *9955,54 kW*.

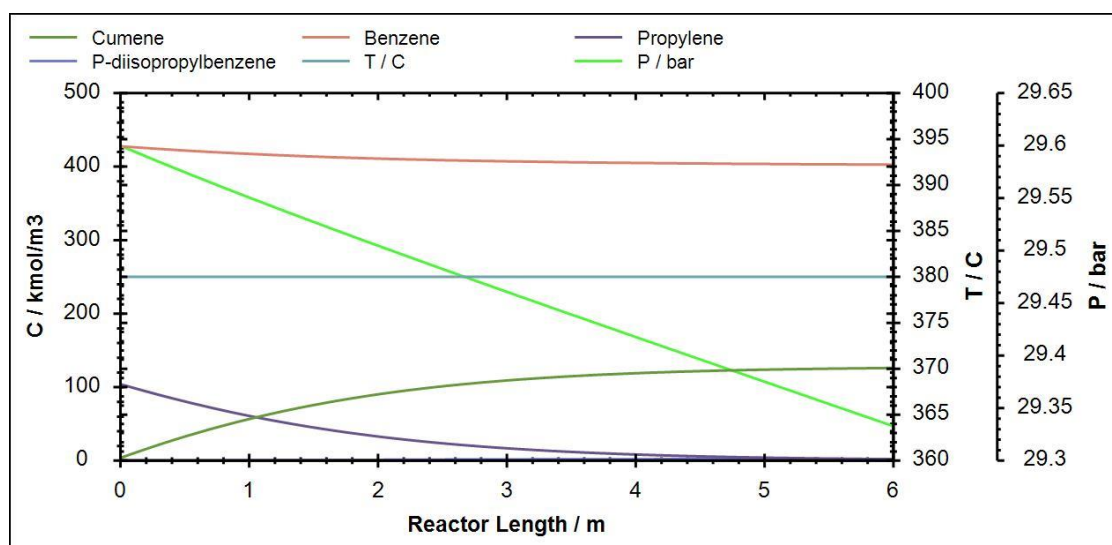


Abbildung 5: Der Konzentrationsverlauf der Komponente von dem Produkt aus dem Reaktor, Temperatur- und Druckverlauf bei der gasförmigen Alkylierung von Benzol mit Propylen

Das Simulationsdiagramm für die flüssigförmige Alkylierung ist nicht unterschiedlich von der gasförmigen Alkylierung und wird auch in der Abbildung 4 dargestellt. Bei der flüssigförmigen Cumol-Herstellung werden frisches Benzol und Propylen, das 10 % Propan beinhaltet, in den Alkylierungsreaktor unter dem B/P-Molverhältnis von 4: 1 und dem Druck von *35,5 bar* eingeführt. Die Eingangstemperatur für den Reaktor beträgt *165 °C* und der Reaktor wird adiabatisch betrieben. Der verwendete Reaktor ist auch ein Strömungsrohrreaktor und hat das Volumen von *9,29 m<sup>3</sup>* und die Länge von *7 m*. (Dimian und Bildea, 2008, S. 183)

Die physikalische Daten von dem Katalysator für die flüssigförmige Alkylierung werden in dem Kapitel 2.3.1 beschrieben. Für diesen Prozess muss die Reaktionsgleichung von der Nebenreaktion angepasst werden, um die Ergebnissen aus der Literatur von Dimian und Bildea (2008) zu vergleichen:

$$k_{\text{Flüssigphase},2} = 20000 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \cdot \exp\left(\frac{-55000 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}}}{R \cdot T}\right) \quad (3.1.3)$$

Für die Reaktionskinetik der Hauptreaktion in der flüssigförmigen Alkylierung bleibt die Reaktionsgleichung 2.3.4.7 in dem Kapitel 2.3.4 gleich. Die Strömungsdaten für diesen Prozess werden in der Tabelle 7 dargestellt.

Tabelle 7: Molanteile, Temperatur, Druck, und Molstrom einer Strömung in der flüssigförmigen Cumol-Herstellung

Strömung	Propylen	Frisches Benzol	1	2	3
$x_{\text{Benzol}}$	0,000	1,000	0,783	0,783	0,768
$x_{\text{Propylen}}$	0,900	0,000	0,195	0,195	0,000
$x_{\text{Propan}}$	0,100	0,000	0,022	0,022	0,027
$x_{\text{Cumol}}$	0,000	0,000	0,000	0,000	0,167
$x_{\text{DIPB}}$	0,000	0,000	0,000	0,000	0,038
Temperatur in °C	25,0	25,0	23,9	165,0	267,5
Druck in bar	35,5	35,5	35,5	35,1	34,9
Molstrom in $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$	111,1	400,0	511,1	511,1	411,1

Die Abbildung 6 bezeichnet den Verlauf von der Konzentration jeder Komponente, Temperatur, und dem Druck in dem Alkylierungsreaktor gegen die Länge des Reaktors. Die Temperatur im Reaktor steigt über 102 °C wegen der exothermischen Alkylierungsreaktion an. Die Verweilzeit für die Reaktion beträgt rund 175 Sekunden. Der Druckabfall in dem Reaktor ergibt sich 0,2 bar. Die Selektivität an Cumol in diesem Prozess kann mit dem B/P-Molverhältnis von 4: 1 bis auf 81 % erreichen. Und das Propylen wird hier komplett zu Cumol umgewandelt. Der gesamte Energieverbrauch für den Prozess beträgt rund 3271,78 kW.

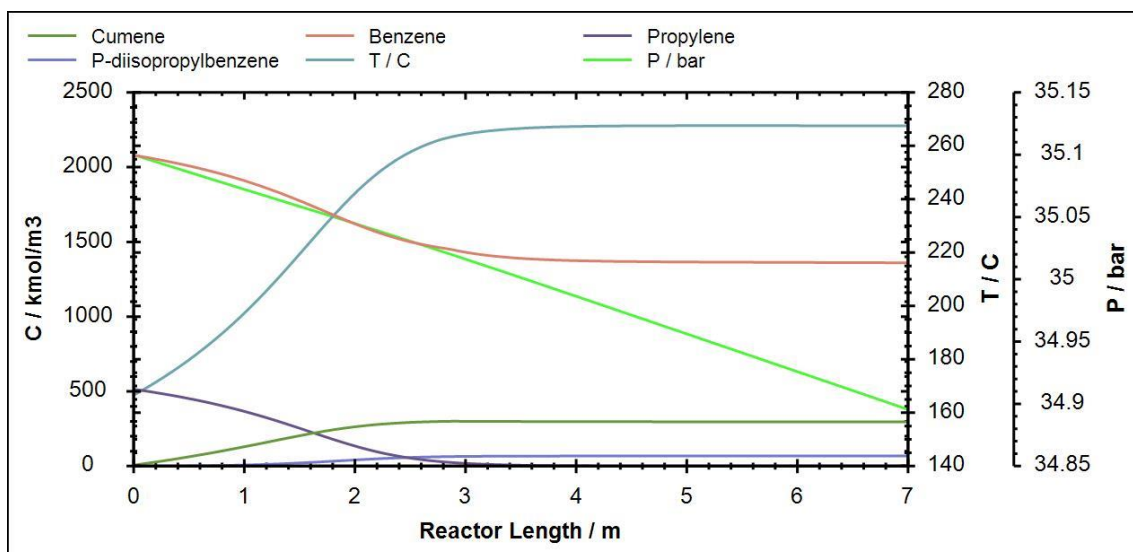


Abbildung 6: Der Konzentrationsverlauf der Komponente von dem Produkt aus dem Reaktor, Temperatur- und Druckverlauf bei der flüssigförmigen Alkylierung von Benzol mit Propylen

Um den Prozess zu optimieren bzw. bessere Selektivität an Cumol zu erreichen, werden mehrere B/P-Molverhältnisse von 4: 1 bis 10: 1 ausprobiert. Die Abbildung 7 stellt das Diagramm für die Selektivität an Cumol als Funktion von dem B/P-Molverhältnis bei der gas- und flüssigförmigen Alkylierung.

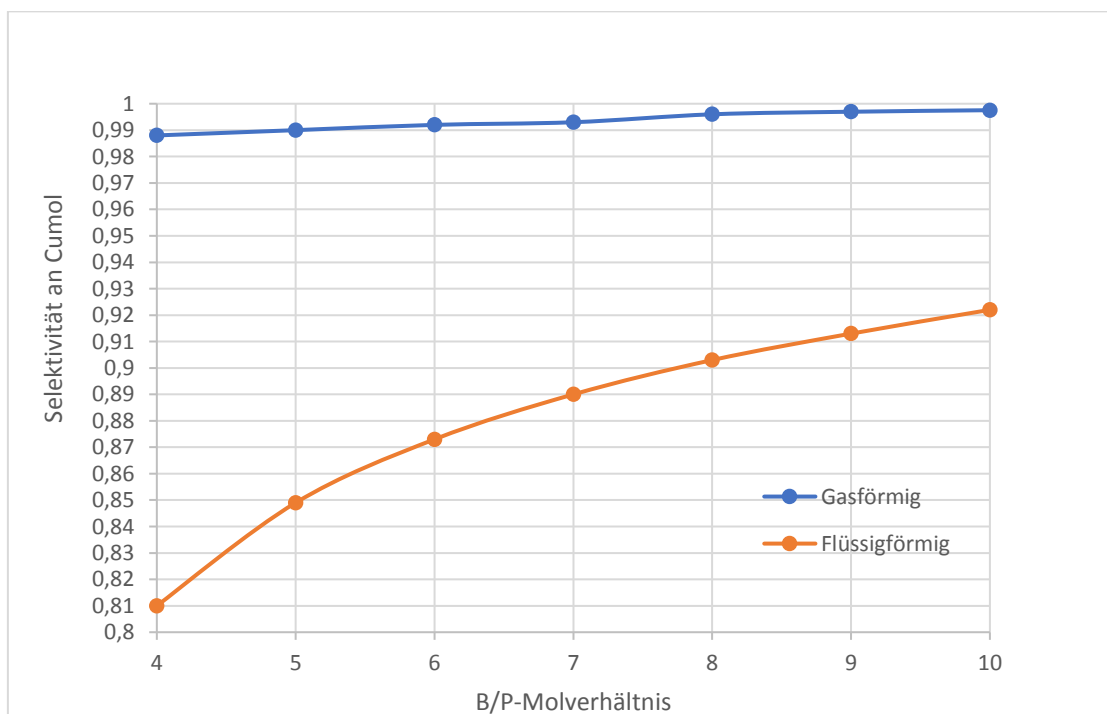


Abbildung 7: Das Diagramm der Selektivität an Cumol als Funktion des B/P-Molverhältnisses in der Alkylierungsreaktion der beiden Prozessphasen



## 3.2 Trennprozesse

Um Cumol von den anderen Komponenten, die in dem Austritt von dem Alkylierungsreaktor vorhanden sind, zu trennen, muss das Produkt aus dem Reaktor zu den Destillationskolonnen geführt werden, die Cumol, Benzol, Propan und DIPB trennen. Die ChemSep-Destillationskolonne von dem Programm DWSIM wird für die Simulation der Trennprozesse ausgewählt und die Spezifikationen für die Kolonnen wie der Druck in der Kolonne, die Rücklaufverhältnisse und die Anzahl der Destillationsstufen sind von Dimian und Bildea (2008) erhalten. Das verwendete thermodynamische Modell für die Berechnung der Destillationskolonne sind in der Abbildung 8 dargestellt:

K-value	Gamma-Phi
Equation of state	Ideal gas law
Activity coefficient	NRTL
Vapour pressure	Antoine
Enthalpy	Ideal

Abbildung 8: Das thermodynamische Modell für die Destillationskolonne (einschließend die thermische Leitfähigkeit, thermische Zustandsgleichung, Aktivitätskoeffizient, der Dampfdruck, die Enthalpie)

Außerdem werden die Produkte sowie die Energieverbräuche der Destillationen, die in der gasförmigen und flüssigförmigen Cumol-Herstellung durchgeführt werden, verglichen.

### 3.2.1 Entpropanierung

Das Produkt aus dem Alkylierungsreaktor fließt zuerst zur Propankolonne, wo das Propan, das ursprünglich in der Propylen-Zufuhr vorliegt, entfernt wird. Die Simulation von der Propandestillationskolonne wird in der Abbildung 9 dargestellt. Die Eingangstemperatur für die Propankolonne beträgt 150 °C und der Druck in der Kolonne wird bei 12 bar im oberen und unteren Teil konstant gehalten, um die Temperatur des Kondensators bei 34 °C und des Verdampfers bei 200 °C zu erreichen. Die Propankolonne hat 16 Stufen mit dem Zufuhr bei der 5. Stufe. Die Kolonne ist so eingestellt, dass das Benzol bei dem Destillatprodukt unter 100 ppm vorhanden ist. (Dimian und Bildea, 2008, S. 185-187)

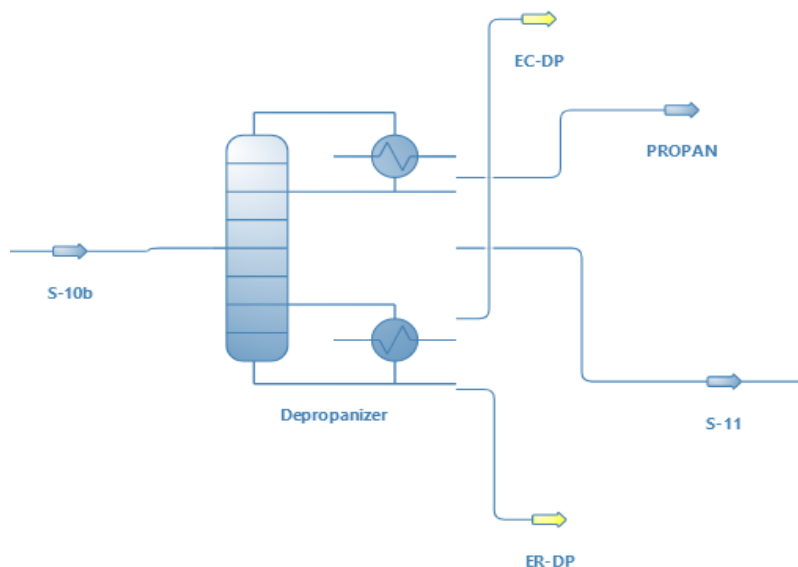


Abbildung 9: Simulationsdiagramm für die Trennung des Propanes

Hier werden die Produkte von der Propan-Destillationskolonne in der gasförmigen und flüssigförmigen Cumol-Herstellung verglichen. Die Eingangsströmung 10b für die Propankolonne stammt aus dem Alkylierungsabschnitt, der in der Kapitel 3.1 diskutiert wird. Für jede Prozessphase werden die spezifischen Daten von jeder Eingangsströmung der Propankolonne in der Tabelle 8 dargestellt.

Tabelle 8: Spezifische Daten der Eingangsströmungen der Propankolonne in beiden Prozessphasen

Eingangsströmung	$x_{Benzol}$	$x_{Propylen}$	$x_{Propan}$	$x_{Cumol}$	$x_{DIPB}$	Druck in bar	Temperatur in °C	Molstrom in $\frac{kmol}{h}$
S-10b (Gasphase)	0,746	0,004	0,013	0,233	0,004	12	150	406,8
S-10b (Flüssigphase)	0,768	0,000	0,027	0,167	0,038	12	150	411,1

Um den Energieverbrauch der Kolonne einzusparen, wird der Druck bei der Eingangsströmung der Kolonne optimiert und bei 12 bar konstant gehalten.

Mit den spezifischen Daten für die Propankolonne von Dimian und Bildea (2008) fließen bei der gasförmigen Cumol-Herstellung 77,5 % Propan mit 22,5 % Propylen aus dem oberen Teil der Kolonne raus. In dem Produkt aus dem unteren Teil sind 75,8 % Benzol, 23,7 % Cumol und 0,4 % DIPB vorhanden. Bei der flüssigförmigen Cumol-Herstellung kommt reines Propan als das Destillatprodukt der Kolonne raus und das Sumpfprodukt besteht aus 78,9 % Benzol, 17,1 % Cumol und 3,9 % DIPB. Die Tabelle 9 stellt die ausführliche Daten der Produkte aus der Propankolonne in beiden Prozessphasen dar:

Tabelle 9: Spezifische Daten der Austrittsströmungen der Propankolonne in beiden Prozessphasen

Austrittströmung	$x_{Benzol}$	$x_{Propylen}$	$x_{Propan}$	$x_{Cumol}$	$x_{DIPB}$	Druck in bar	Temperatur in °C	Molstrom in $\frac{kmol}{h}$
Propan (Gasphase)	0,000	0,225	0,775	0,000	0,000	12	32	6,7
Propan (Flüssigphase)	0,000	0,000	0,999	0,000	0,000	12	34	11,1
S-11 (Gasphase)	0,758	0,000	0,000	0,237	0,004	12	197	400,3
S-11 (Flüssigphase)	0,789	0,000	0,000	0,172	0,039	12	197	400,0

Aus der Simulationsberechnung wird der Rückflussverhältnis von 0,32 bestimmt. Der größere Austrittsmolstrom bei der Propankolonne in der Flüssigphase wird von dem größeren Inhalt des Propans in der Propylenzufuhr begründet. Und der Propyleninhalt bei dem Destillatprodukt der Propankolonne in der Gasphase verdeutlicht das nicht voll umgewandelte Propylen in dem Alkylierungsreaktor.

Die Energieverbräuche für die Destillation des Propans in den beiden Prozessphasen werden in der Tabelle 10 dargestellt:

Tabelle 10: Energieverbräuche der Propankolonne in den beiden Prozessphasen

Energieverbrauch	Propankolonne (Gasphase)	Propankolonne (Flüssigphase)
Q Kondensator in kW	-706,33	-760,72
Q Verdampfer in kW	774,20	848,54

### 3.2.2 Benzolrückgewinnung

Das Produkt aus dem unteren Teil der Propankolonne wird danach zu der Benzolkolonne geführt, wo Benzol und Cumol dann getrennt werden. Das Simulationsdiagramm von der Benzolkolonne für die beiden Prozessphasen wird in der Abbildung 10 dargestellt. Die Benzolkolonne wird unter den Bedingungen aus der Literaturstelle von Dimian und Bildea (2008) betrieben. Das Destillatprodukt bei der Kolonne ist Benzol, das anschließend in die Prozessschleife wieder zurückgeführt wird. Die Strömung S-17 enthält zum größten Teil Cumol mit wenig DIPB. Die Benzolkolonne wird bei dem atmosphärischen Druck mit 25 theoretischen Stufen und dem Zufuhr, der in der Mitte der Kolonne vorliegt, betrieben (Dimian und Bildea, 2008, S. 187). Das Rückflussverhältnis für die Kolonne wird von 0,26 auf 1 optimiert, um eine vergleichbare Ergebnisse wie in der Literaturstelle zu erhalten.

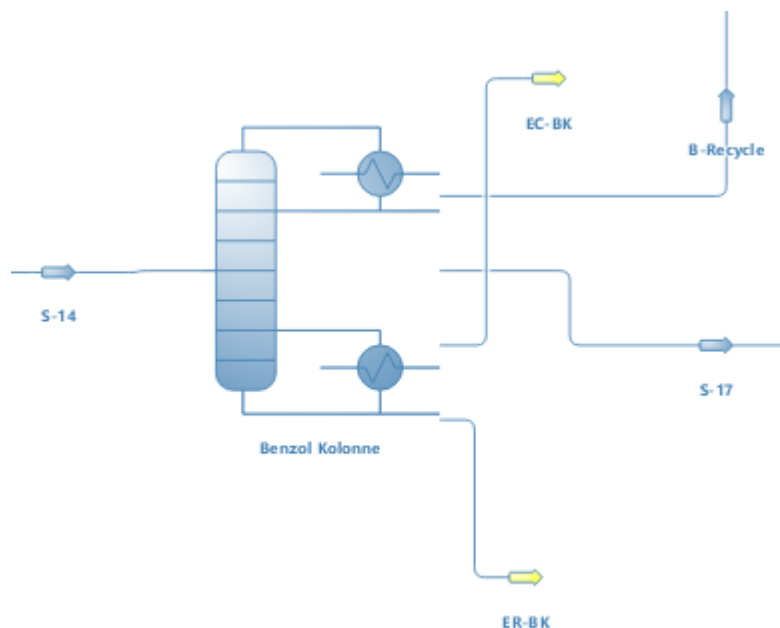


Abbildung 10: Das Simulationsdiagramm für die Benzolrückgewinnung

Die Tabelle 11 zeigt die spezifischen Daten für die Strömungen, die bei der Benzolkolonne rein und rausfließen, in den beiden Prozessphasen an:

Tabelle 11: Spezifische Daten der Strömungen bei der Benzoldestillationskolonne in den beiden Prozessphasen

Strömung	$x_{Benzol}$	$x_{Propylen}$	$x_{Propan}$	$x_{Cumol}$	$x_{DIPB}$	Druck in bar	Temperatur in °C	Molstrom in $\frac{kmol}{h}$
Eingangsstrom (Gasphase)	0,758	0,000	0,000	0,237	0,004	12	197	400,3
Eingangsstrom (Flüssigphase)	0,789	0,000	0,000	0,172	0,039	12	197	400,0
Destillatprodukt (Gasphase)	1,000	0,000	0,000	0,000	0,000	1	83	303,3
Destillatprodukt (Flüssigphase)	1,000	0,000	0,000	0,000	0,000	1	83	315,7
Sumpfprodukt (Gasphase)	0,001	0,000	0,000	0,982	0,018	1	164	96,8
Sumpfprodukt (Flüssigphase)	0,000	0,000	0,000	0,813	0,187	1	170	84,4

Die Energieverbräuche bei der Benzolkolonne in den beiden Prozessphasen werden in der Tabelle 12 dargestellt:

Tabelle 12: Energieverbräuche der Benzolkolonne in den beiden Prozessphasen

Energieverbrauch	Benzolkolonne (Gasphase)	Benzolkolonne (Flüssigphase)
Q Kondensator in kW	-5171,80	-5368,33
Q Verdampfer in kW	1806,88	3166,53

Wie in der Tabelle 12 zu sehen, die Benzol-Destillation verbraucht ziemlich viele Energie. Nach Dimian und Bildea (2008) kann die Technologie „Multieffekt-Destillation“ (MED) die Energieverbräuche für die Destillation von Benzol verringern, indem zwei Kolonnen mit dem unterschiedlichen Druck ausgelegt werden. Die Abbildung 11 stellt das Fließbild der Technologie „Multieffekt-Destillation“ für die Energieeinsparung dar.

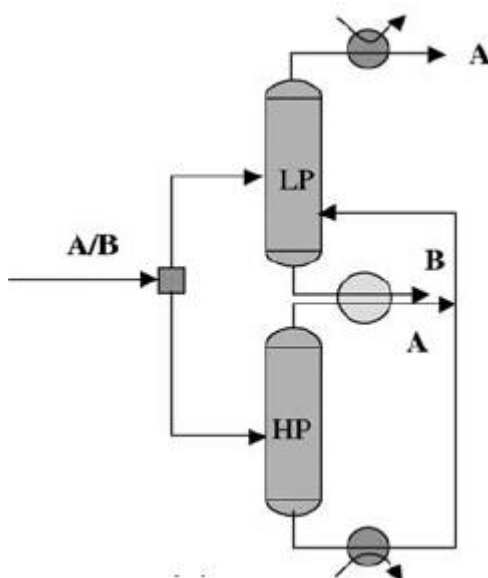


Abbildung 11: Die Fließschema der MED zur Energieeinsparung (Dimian und Bildea, 2008, S. 189)

Die Eingangsströmung der Benzolkolonne wird in 2 parallele Strömungen geteilt und zu den beiden Kolonnen geleitet. Die eine Benzolkolonne wird mit dem Druck von 3 *bar* betrieben und die andere mit dem Druck von 8 *bar*. Das Produkt aus der Kolonne mit dem höheren Druck (HP) wird zu der Kolonne mit dem niedrigen Druck (LP) geführt, um die Energie zur Erwärmung bei der LP-Kolonne zu verringern. Die Erhöhung des Drucks in der HP-Kolonne zielt darauf ab, die Energie, die bei der Kondensation entsteht, z.B. zur Dampferzeugung und zur Energieversorgung für den Verdampfer in der LP-Kolonne auszunutzen. Also, die Energie für den Verdampfer der LP-Kolonne wird komplett von der Kondensationsenergie der HP-Kolonne gedeckt (Dimian und Bildea, 2008, S. 188). Das Sumpfprodukt, das Cumol und DIPB enthält, aus der LP-Kolonne wird dann zu dem weiteren Prozessabschnitt geführt und die Destillatprodukte aus den beiden Kolonnen werden zurückgeführt.

Die Abbildung 12 stellt die Anwendung der Technologie „Multieffekt-Destillation“ zu der Benzol-Destillation bei der gas- und flüssigförmigen Cumol-Herstellung in dem Simulationsprogramm DWSIM dar. Die Spezifikationen für die beiden Kolonnen wie die theoretischen Stufen und das Rückflussverhältnis bleiben gleich wie bei der vorherigen Benzolkolonne.

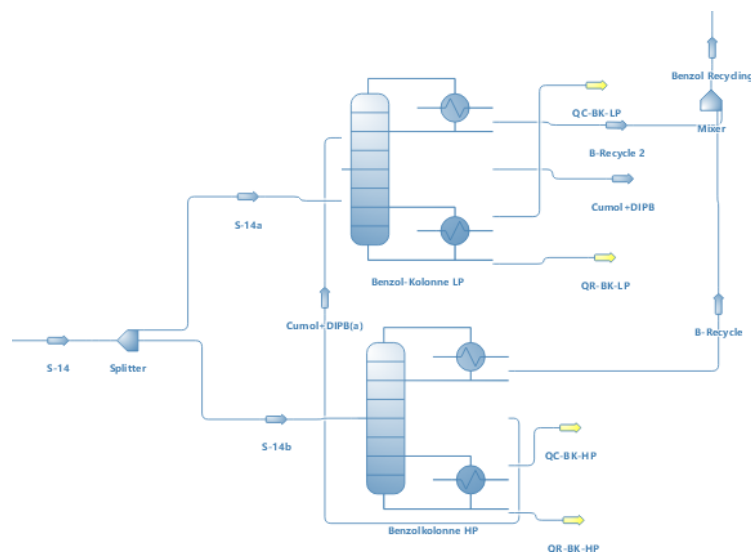


Abbildung 12: Simulationsdiagramm für die Benzoldestillation mit MED

Die Tabelle 13 und Tabelle 14 stellen die Vergleichung der Hauptprodukten und der Energieverbräuchen aus diesem Benzol-Destillationsabschnitt mit der normalen Benzol-Kolonne in den beiden Prozessphasen dar.

Tabelle 13: Spezifische Daten der Strömungen bei der MED Benzol-Destillationskolonne der Cumol-Herstellung in der Gasphase

Strömung	$x_{Benzol}$	$x_{Propylen}$	$x_{Propan}$	$x_{Cumol}$	$x_{DIPB}$	Druck in bar	Temperatur in °C	Molstrom in $\frac{kmol}{h}$
Destillatprodukt (Normal)	1,000	0,000	0,000	0,000	0,000	1	83	303,3
Ges. Destillatprodukt (MED)	1,000	0,000	0,000	0,000	0,000	5,5	147	303,4
Sumpfprodukt (Normal)	0,001	0,000	0,000	0,982	0,018	1	164	96,8
Ges. Sumpfprodukt (MED)	0,000	0,000	0,000	0,982	0,018	3	203	96,8

Tabelle 14: Spezifische Daten der Strömungen bei der MED Benzol-Destillationskolonne der Cumol-Herstellung in der Flüssigphase

Strömung	$x_{Benzol}$	$x_{Propylen}$	$x_{Propan}$	$x_{Cumol}$	$x_{DIPB}$	Druck in bar	Temperatur in °C	Molstrom in $\frac{kmol}{h}$
Destillatprodukt (Normal)	1,000	0,000	0,000	0,000	0,000	1	83	315,7
Ges. Destillatprodukt (MED)	0,999	0,000	0,000	0,001	0,000	5,5	147	316,0
Sumpfprodukt (Normal)	0,000	0,000	0,000	0,813	0,187	1	170	84,4
Ges. Sumpfprodukt (MED)	0,000	0,000	0,000	0,813	0,187	3	209	84,1

Der große Unterschied bei den Produkt-Strömungen zwischen der normalen und Multieffekt-Benzol-Destillation ist bei den Austrittstemperaturen und Drücken. Außerdem werden die Energieverbräuche mit der MED gemäß der Literaturstelle verringert.

Die gesamten Energieverbräuche für die gesamte MED-Benzoldestillation in den beiden Prozessphasen werden in der Tabelle 15 dargestellt.

Tabelle 15: Energieverbräuche der MED Benzoldestillationskolonne in den beiden Prozessphasen

Energieverbrauch	MED-Benzolkolonne (Gasphase)	MED-Benzolkolonne (Flüssigphase)
Qges. Kondensator in <i>kW</i>	-3513,04	-3158,80
Qges. Verdampfer in <i>kW</i>	1380,81	2142,34

Im Vergleich mit den Energieverbräuchen aus der Tabelle 12 werden 426,07 *kW* bei dem Verdampfer der Benzolkolonne bei der Cumol-Herstellung in der Gasphase eingespart und bei dem Kondensator ist der Energieverbrauch 1658,76 *kW* geringer. Bei der Cumol-Herstellung in der Flüssigphase nimmt der Energieverbrauch für den Verdampfer der Benzolkolonne um 1024,19 *kW* ab. Und der Energieverbrauch für den Kondensator kann bis auf 2209,53 *kW* eingespart werden.

### 3.2.3 Cumol-Destillation

Das Sumpfprodukt aus dem Benzoldestillationsabschnitt wird dann zu der Cumolkolonne geleitet, wo Cumol und DIPB getrennt werden. Die Abbildung 13 stellt das Simulationsdiagramm der Cumolkolonne dar. Die Spezifikationen für die Cumolkolonne stammen aus dem Literaturbuch von Dimian und Bildea (2008). Die Kolonne wird unter dem Vakuumsdruck betrieben, um übermäßige Temperatur bei dem Sumpfprodukt zu vermeiden. Der Druck des oberen Teils beträgt 0,5 *bar* und für den unteren Teil ergibt sich der Druck 0,6 *bar*. Außerdem hat die Kolonne 30 theoretische Stufe und das Rücklaufverhältnis von 1,2. Diese sollen eine hohe Reinheit des Cumols sicherstellen. (Dimian und Bildea, 2008, S. 187)

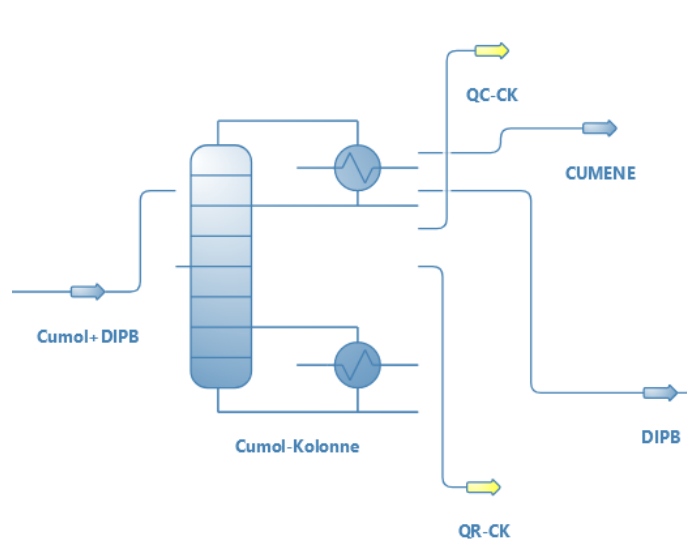


Abbildung 13: Simulationsdiagramm von der Cumol-Destillationskolonne

Der Vergleich zwischen den Strömungsdaten bei der Cumolkolonne in der gas- und flüssigförmigen Cumol-Herstellung wird in der Tabelle 16 dargestellt.

Tabelle 16: Spezifische Daten der Strömungen bei der Cumol-Destillationskolonne in den beiden Prozessphasen

Strömung	$x_{Benzol}$	$x_{Propylen}$	$x_{Propan}$	$x_{Cumol}$	$x_{DIPB}$	Druck in bar	Temperatur in °C	Molstrom in $\frac{kmol}{h}$
Cumolprodukt (Gasphase)	0,000	0,000	0,000	1,000	0,000	0,5	127	95,0
Cumolprodukt (Flüssigphase)	0,000	0,000	0,000	1,000	0,000	0,5	127	68,3
DIPB-Produkt (Gasphase)	0,000	0,000	0,000	0,000	1,000	0,6	189	1,8
DIPB-Produkt (Flüssigphase)	0,000	0,000	0,000	0,000	1,000	0,6	189	15,7

Mehr DIPBs kommen aus der Cumolkolonne in der Flüssigphase. Dies verdeutlicht die bessere Selektivität bei der Alkylierung von der Cumol-Herstellung in der Gasphase.

Die Energieverbräuche für die Cumolkolonne werden in der Tabelle 17 dargestellt.

Tabelle 17: Energieverbräuche der Cumol-Destillationskolonne in den beiden Prozessphasen

Energieverbrauch	Cumolkolonne (Gasphase)	Cumolkolonne (Flüssigphase)
Q Kondensator in kW	-2264,11	-1628,54
Q Verdampfer in kW	775,71	941,02



Der größere Energieverbrauch bei dem Verdampfer der Cumol-Kolonne in der Flüssigphase kann deutlich von dem größeren Molstrom von DIPB erklärt. Das gilt auch bei dem Kondensator der Kolonne in der Gasphase.

### 3.3 Transalkylierung von DIPB mit Benzol

DIPB oder Diisopropylbenzol, das aus dem unteren Teil der Cumol-Kolonne rausfließt, wird danach zu dem Transalkylierungsreaktor geführt, wo DIPB und Benzol sich reagieren und zusätzliches Cumol gebildet wird. Die Transalkylierungsreaktionsgleichung wird in dem Kapitel 2.3 beschrieben. Das Simulationsdiagramm von dem Prozessteil Transalkylierung wird in der Abbildung 14 dargestellt.

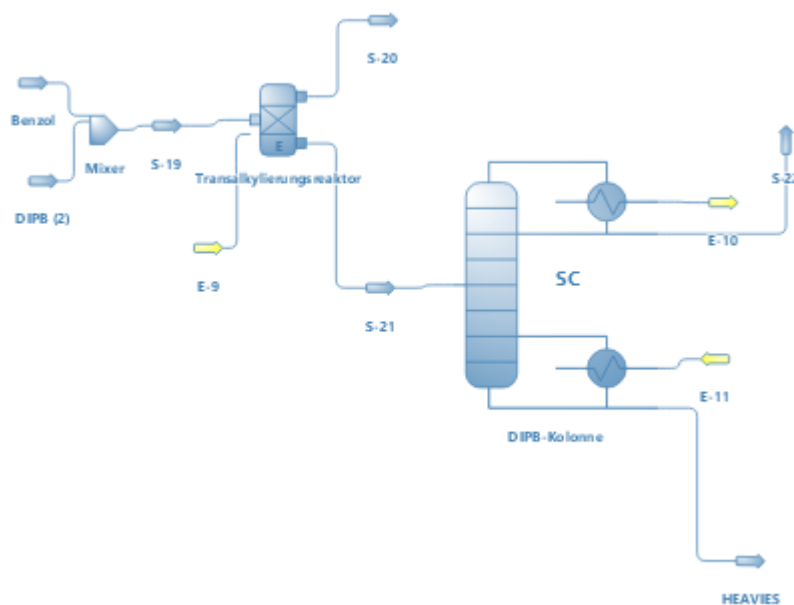


Abbildung 14 Das Simulationsdiagramm für den Prozessteil Transalkylierung

Der verwendete Reaktor für die Transalkylierungsreaktion ist der adiabatische Gleichgewichtsreaktor. Für diese Reaktion werden das Benzol/DIPB Molverhältnis von größer als 10 und die Eingangstemperatur von 160 °C benötigt (Dimian und Bildea, 2008, S. 192). Die Strömungsdaten von diesem Prozessteil in den beiden Prozessphasen werden in der Tabelle 18 dargestellt.

Tabelle 18: Spezifische Daten der Strömungen bei dem Transalkylierungsreaktor in den beiden Prozessphasen

Strömung	$x_{Benzol}$	$x_{Propylen}$	$x_{Propan}$	$x_{Cumol}$	$x_{DIPB}$	Druck in bar	Tempera- tur in °C	Molstrom in $\frac{kmol}{h}$
Benzol (Gasphase)	1,000	0,000	0,000	0,000	0,000	30	160	18,0
Benzol (Flüssigphase)	1,000	0,000	0,000	0,000	0,000	35,5	160	157,0
DIPB (Gasphase)	0,000	0,000	0,000	0,000	1,000	0,6	189	1,8
DIPB (Flüssigphase)	0,000	0,000	0,000	0,000	1,000	0,6	189	15,7
Transalkylierungs- produkt (Gasphase)	0,833	0,000	0,000	0,151	0,016	18,1	181	172,7
Transalkylierungs- produkt (Gasphase)	0,833	0,000	0,000	0,151	0,016	15,3	181	19,8

Das Produkt aus dem Transalkylierung wird danach zu der DIPB-Kolonne geführt, um DIPB von den restlichen Komponenten zu trennen. Die Kolonne wird unter dem Vakuumdruck betrieben. (Dimian und Bildea, 2008, S. 193-194)

Die Strömung, die Benzol und Cumol enthält, wird dann zurück zu der Benzolkolonne geführt. Die Tabelle 19 zeigt die Daten der Produkte aus der DIPB-Kolonne an.

Tabelle 19: Spezifische Daten der Strömungen bei der DIPB-Kolonne in den beiden Prozessphasen

Strömung	$x_{Benzol}$	$x_{Propylen}$	$x_{Propan}$	$x_{Cumol}$	$x_{DIPB}$	Druck in bar	Tempera- tur in °C	Molstrom in $\frac{kmol}{h}$
Destillatprodukt (Gasphase)	0,847	0,000	0,000	0,153	0,000	0,4	55	19,5
Destillatprodukt (Flüssigphase)	0,847	0,000	0,000	0,153	0,000	0,4	55	170,0
Sumpfprodukt (Gasphase)	0,000	0,000	0,000	0,000	1,000	0,4	174	0,3
Sumpfprodukt (Flüssigphase)	0,000	0,000	0,000	0,000	1,000	0,4	174	2,7

Mit dem B/DIPB-Molverhältnis von 10 sind die Zusammensetzung und die Temperaturen von jeder Produktströmung ähnlich bei den beiden Prozessphasen. Der Energieverbrauch von der DIPB-Kolonne in der Flüssigphase ist selbstverständlich größer wegen des größeren Molstrom, der in die Kolonne eingeführt wird. Die Tabelle 20 stellt die Vergleichung von den Energieverbräuchen der DIPB-Kolonnen von den beiden Prozessphasen dar.

Tabelle 20: Energieverbräuche der DIPB-Kolonne in den beiden Prozessphasen

Energieverbrauch	DIPB-Kolonne (Gasphase)	DIPB-Kolonne (Flüssigphase)
Q Kondensator in <i>kW</i>	-293,05	-2556,19
Q Verdampfer in <i>kW</i>	175,80	1532,72

Mit dem Prozessteil Transalkylierung wird die Produktivität von der Cumol-Herstellung verbessert. Die Tabelle 21 stellt die gesamte Cumolproduktivität der beiden Prozessphasen nach der Anwendung der Transalkylierung von Benzol mit DIPB.

Tabelle 21: Produktivität von Cumol in den beiden Prozessphasen nach der Transalkylierungsreaktion

Cumol-Herstellung	Produktionsmenge In $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$
In Gasphase	97,7
In Flüssigphase	94,5

Die Cumolproduktivität bei der Cumol-Herstellung in der Gasphase steigt um  $2,7 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$  an, während es eine signifikante Erhöhung der Cumolproduktivität bei der Flüssigphase gibt, und zwar von  $68,3 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$  auf  $94,5 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ .

## 4 Ergebnisse der Optimierung

Dieses Kapitel beschreibt die Kombination aller Prozessteile, die in dem Kapitel 3 besprochen werden, mit dem Recycling und der Ausnutzung der entstehenden Energie bei der Alkylierung von Benzol mit Propylen zur gesamter Energieeinsparung. Im Laufe dieses Kapitels werden die Ergebnisse wie z.B. der gesamte Energieverbrauch, die Produktionsmenge des Cumols zwischen der Cumol-Herstellung in Gas- und Flüssigphase verglichen. Die B/P-Molverhältnisse werden für die beiden Prozessphasen optimiert, um die besseren Ergebnissen rauszufinden.

Die Abbildung 15 stellt das Simulationsdiagramm von der Cumolanlage sowohl in der Gas- als auch Flüssigphase dar. Um das Benzol/Propylen-Molverhältnis von 4: 1 für den Alkylierungsreaktor konstant zu halten, wird in die Simulationsarbeit ein „Specification Block“ addiert, welches den Molstrom von Benzolzufuhr automatisch einstellt.

Die Mischung von der Benzolzufuhr und dem recycleten Benzol wird entsprechend geteilt, sodass das Benzol/DIPB-Molverhältnis von 10 für die Transalkylierungsreaktion erreicht werden kann. Die Transalkylierung von DIPB mit Benzol ist sehr wichtig, besonders bei der Cumol-Herstellung in der Flüssigphase, da viel DIPBs bei der flüssigförmigen Alkylierung wegen seiner Selektivität gebildet werden. Die Strömung aus dem oberen Teil der DIPB-Kolonne wird zu der Benzolkolonne geleitet, um zusätzliches Cumol zu erhalten. Dazu wird aber mehr Energie für den Trennungsprozess in der Benzolkolonne verbraucht.

Die Wärme von dem Produkt aus dem Alkylierungsreaktor wird für die Vorwärmung der Mischung von Benzol und Propylen durch einen Wärmeübertrager ausgenutzt. Die Fläche des Wärmeübertragers von  $15 \text{ m}^2$  wird dafür eingestellt. Die übertragende Energie aus der Wärme kann bis zu  $1500 \text{ kW}$  bei der Cumol-Herstellung in der Flüssigphase betragen, während die Energie von ca.  $2100 \text{ kW}$  aus der gasförmigen Alkylierung ausgenutzt werden kann. Der passende Wärmeübertrager für den Fall ist ein Rohrbündelwärmetauscher mit dem Wärmeübergangskoeffizient von 300 bis 1200 und mit den Übertragungsbedingungen: Heißdampf außerhalb und Flüssigkeit innerhalb der Rohre. (Roetzel und Spang, 2013, S. 85)

Ein Drosselventil wird vor der Propankolonne ausgelegt, um der Druck der Strömung bei  $12 \text{ bar}$  zu halten. Ziel der Auslegung ist es, eine signifikante Menge Energie für die Propankolonne einzusparen.

Der Kühler wird vor dem Propankolonne ausgelegt, um die Eingangsströmung bei der Temperatur von  $150 \text{ °C}$  zu halten und damit die Energieverbräuche bei der Propankolonne zu reduzieren. (Dimian und Bildea, 2008, S. 186)

Die Technologie Multieffektdestillation wird für die beiden Prozessphasen weiter benutzt, um mehr Energie bei der Destillation von Benzol einzusparen.

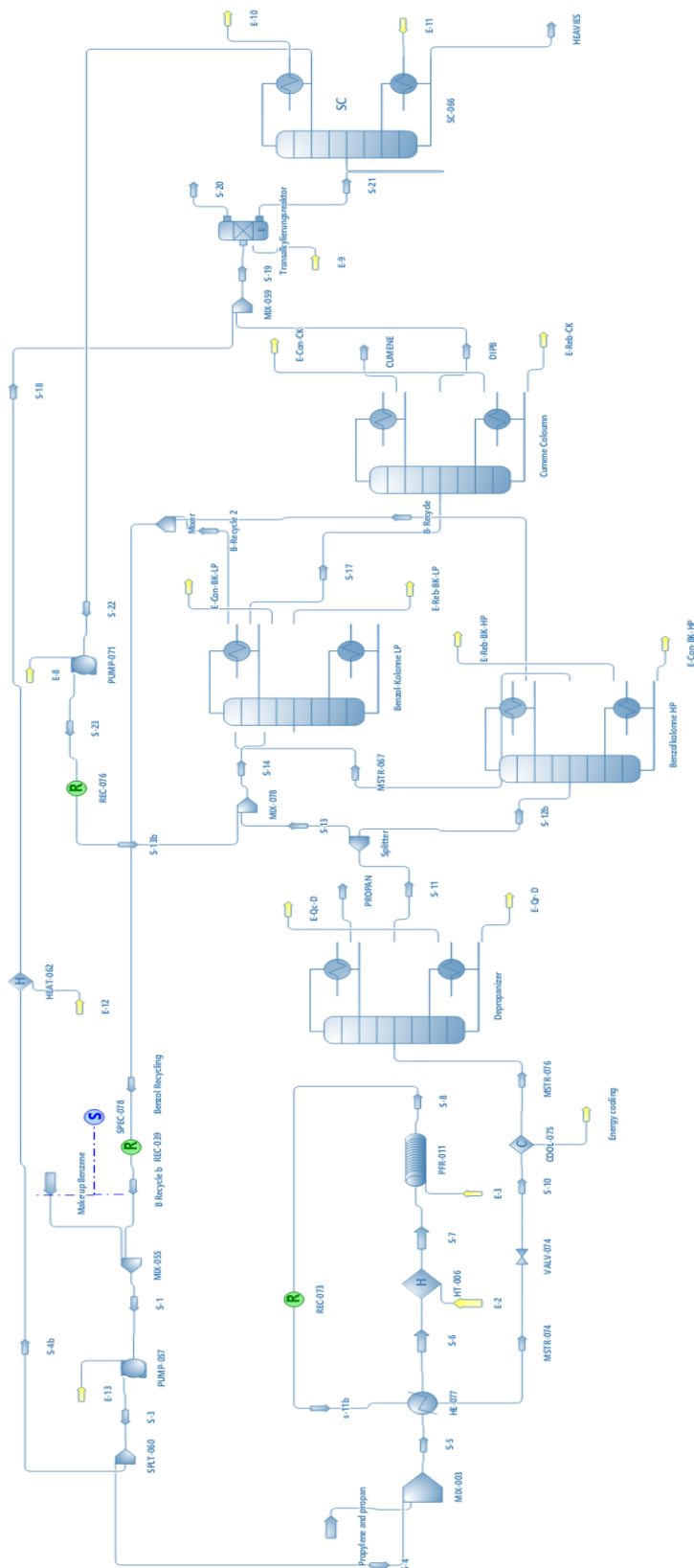


Abbildung 15: Simulationsdiagramm von dem kompletten Prozess der Cumol-Herstellung in den beiden Prozessphasen

#### 4.1 Prozesssimulation der Cumolanlage in der Gasphase

Folgendes werden die Ergebnisse der Cumol-Herstellung in der Gasphase erläutert. Mit dem konstanten B/P-Molverhältnis von 4: 1, der Phosphorsäure als der Katalysator für die Alkylierungsreaktion und der konstanten Zufuhr von Propylen von  $105,26 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$  kommen die Ergebnisse in der Tabelle 12 raus:

Tabelle 22: Ergebnisse der Simulation von Cumol-Herstellung in der Gasphase mit dem B/P-Molverhältnis von 4:1

Zufuhr von Benzol in $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$	98,1
Cumolprodukt in $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$	97,7
Gesamter Wärmeenergieverbrauch in $\text{kW}$	7780
Gesamter Kühleenergieverbrauch in $\text{kW}$	12184

In diesem Prozess werden der Propylenumsatz über 98 % und die Produktion von Cumol 102901 Tonnen pro Jahr erreicht. Wie in der Kapitel 2.3.1 erwähnt, muss aber die mit den Phosphorsäure-Katalysatoren durchgeführte Cumol-Herstellung unter dem B/P-Molverhältnis von 7: 1 betrieben, um die Oligomerisierung von Propylen zu vermeiden. Mit den gleichen Spezifikationen für die Komponenten der Anlage und der gleichen Propylenzufuhr werden die Ergebnisse von der Cumol-Herstellung unter dem Molverhältnis in der Tabelle 23 dargestellt.

Tabelle 23: Ergebnisse der Simulation von Cumol-Herstellung in der Gasphase mit dem B/P-Molverhältnis von 7

Zufuhr von Benzol in $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$	92,5
Cumolprodukt in $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$	92,3
Gesamter Wärmeenergieverbrauch in $\text{kW}$	14107
Gesamter Kühleenergieverbrauch in $\text{kW}$	20154

Hier handelt es sich um eine Cumolproduktion von 97231 Tonnen pro Jahr. Aus der Tabelle 23 kann es bestimmt werden, dass die Produktivität der Cumolanlage in der Gasphase mit dem höheren B/P-Molverhältnis abnimmt. Der Propylenumsatz in diesem Prozess beträgt 92,6 % und die Verweilzeit ergibt sich 15,6 *Sekunden*. Die Zufuhr von Benzol wird aber verringert, welches das Kosten für den chemischen Rohstoff einsparen kann. Der Wärmeenergieverbrauch hat sich fast verdoppelt, während der Kühleenergieverbrauch um 7970  $\text{kW}$  versteigert. Der größte Wärmeenergieverbraucher in dem Prozess ist der Erwärmer, der vor dem Alkylierungsreaktor vorliegt, wo die Wärmeenergie

von 9586,21  $kW$  verbraucht wird. Der Kühler vor der Propankolonne ist der größte Kühlenergieverbraucher, welcher die Kühlenergie von 10016,1  $kW$  verbraucht.

#### 4.2 Prozesssimulation der Cumolanlage in der Flüssigphase

Die Ergebnisse von der Simulation der gesamten Cumolanlage in der Flüssigphase werden in der Tabelle 24 dargestellt. Die Cumol-Herstellung wird mit dem B/P-Molverhältnis von 4: 1 und der Propylenzufuhr von  $111,1 \frac{kmol}{h}$  durchgeführt.

Tabelle 24: Ergebnisse der Simulation von Cumol-Herstellung in der Flüssigphase mit dem B/P-Molverhältnis von 4:1

Zufuhr von Benzol in $\frac{kmol}{h}$	97,2
Cumolprodukt in $\frac{kmol}{h}$	94,5
Gesamter Wärmeenergieverbrauch in $kW$	7549
Gesamter Kühlenergieverbrauch in $kW$	12204

Mit solchem B/P-Molverhältnis kann die Cumolanlage ca. 99513 Tonnen Cumol pro Jahr produzieren. Die Cumol-Herstellung wird dann weiter optimiert, indem das B/P-Molverhältnis auf 7:1 erhöht wird. Die Tabelle 25 zeigt die Ergebnisse von der Cumol-Herstellung mit dem größeren Molverhältnis an.

Tabelle 25: Ergebnisse der Simulation von Cumol-Herstellung in der Flüssigphase mit dem B/P-Molverhältnis von 7

Zufuhr von Benzol in $\frac{kmol}{h}$	98,2
Cumolprodukt in $\frac{kmol}{h}$	96,4
Gesamter Wärmeenergieverbrauch in $kW$	8808
Gesamter Kühlenergieverbrauch in $kW$	13671

Im Vergleich mit den Ergebnissen aus der Tabelle 24 steigt die Benzolzufuhr um  $1 \frac{kmol}{h}$  an, während sich das Cumolprodukt um  $1,9 \frac{kmol}{h}$  erhöht. Die Cumolanlage liefert insgesamt ca. 101460 Tonnen Cumol pro Jahr, was eine signifikante Erhöhung der Produktivität der Anlage ist. Der Wärme- und Kühlenergieverbrauch steigern sich um 1259  $kW$  und 1467  $kW$ .

## 5 Diskussion und Ausblick

Die Herstellung von Cumol in der Flüssigphase erzeugt viel mehr DIPB als die in der Gasphase. Das liegt an der besseren Selektivität an Cumol bei der Alkylierung in der Gasphase. Mit der Transalkylierung ist das aber nicht mehr das Problem für die Cumol-Herstellung in Flüssigphase, weil zusätzliches Cumol gebildet werden kann, indem Benzol und DIPB in eine Reaktion im Transalkylierungsreaktor gebracht wird. Mit dem zunehmenden B/P-Molverhältnis nimmt die Selektivität in den beiden Prozessphasen auch zu. Und der Propylenumsatz bei der flüssigförmigen Alkylierung erhöht sich auch mit, während sich die Konversion von Propylen an Cumol mit dem zunehmenden B/P-Molverhältnis in der Gasphase verschlechtert und die Verweilzeit der Reaktion nimmt ab. Dies kann durch die kleinere Reaktorgröße, die sich bei der Cumol-Herstellung in der Gasphase befindet, begründet werden. Die Propylenzufuhr der beiden Prozessphasen beinhaltet eine kleine Menge von Propan, die scheint, keinen Effekt gegenüber die Alkylierungsreaktion zu haben. Mehr Propan in der Zufuhr verursacht größeren Energieverbrauch bei der Propankolonie. Die MED (Multieffektdestillation) für die Trennung von Benzol reduziert Energiekosten für die beiden Prozessphasen. Und der größte Energieverbraucher bei der Cumol-Herstellung in der Gasphase ist der Vorwärmer vor dem Alkylierungsreaktor, der die Mischung von den Stoffen auf 380 °C erwärmt, während der größte Energieverbraucher bei der Flüssigphase die Benzolkolonne ist, die auch eine Menge von dem Transalkylierungsabschnitt aufnimmt. Das Destillatprodukt von den Benzolkolonnen enthält fast reines Benzol von 99,9 %, welches mehr Energie für die Benzolkolonne verbraucht und Vergrößerung des Rückflussverhältnisses von 0,26 auf 1 benötigt.

Durch diese Simulationsarbeit wird es verdeutlicht, warum es besser ist, Cumol mit der flüssigförmigen Alkylierung herzustellen. Am Anfang macht die Cumol-Herstellung in der Gasphase mit dem B/P-Molverhältnis von 4: 1 mehr Sinn als die in der Flüssigphase, weil die Herstellung in der Gasphase größere Produktivität mit ungefähr gleichen Energieverbräuchen und nicht so viel unterschiedlicher Benzolzufuhr liefert. Aber der starke Säurekatalysator für die gasförmige Alkylierung bildet Propylenoligomeren, was unerwünscht und vermieden wird. Um die Bildung von Propylenoligomeren zu verhindern, muss die Cumol-Herstellung in der Gasphase unter dem B/P-Molverhältnis von mindestens 7: 1 durchgeführt werden, welches die Kosten für die Trennungsprozesse und die Vorwärmung erhöht. (Schmidt, 2005, S. 90)

Mit dem gleichen B/P-Molverhältnis, dem kleineren Energieverbrauch und leicht größeren Benzolzufuhr wird Cumol in der Flüssigphase mit dem Zeolith-Katalysator mehr produziert. Die Cumol-Herstellung in der Flüssigphase mit dem größeren B/P-Molverhältnis ist auch günstiger, obwohl die Energieverbräuche und die Benzolzufuhr für die Cumol-Herstellung wie in der Kapitel 4.2 leicht zunehmen. Die Kosten für die Produkte sind in der Regel so viel höher als die Energiekosten (Luyben, 2010, S. 719), dass es





trotzdem viele Gewinne für die Cumol-Industrie bringt. Der Energieverbrauch der beiden Prozessphasen kann auch noch weiter verringert werden, indem der Wärmetauscher vor dem Erwärmer vergrößert wird.



## Literaturverzeichnis

- CompaniesandMarkets, 2013. Global cumene market expected to hit 18 million tons by 2020 [WWW Dokument]. Mynewsdesk. URL <http://www.mynewsdesk.com/uk/pressreleases/global-cumene-market-expected-to-hit-18-million-tons-by-2020-831810> (Besucht 5.1.20).
- Dandekar, A.B., Hrynyszak, M.N.M.N., Stern, D.L., 2005. PROCESS FOR PRODUCING CUMENE.
- Dimian, A.C., Bildea, C.S., 2008. Chemical process design: computer-aided case studies. Wiley-VCH, Weinheim.
- Inwood, T.V., LaHabra, Wight, C.G., Fullerton, Ward, J.W., Linda, Y., 1982. LIQUID-PHASE ALKYLATION AND TRANSALKYLATION PROCESS. United States Patent.
- Kellogg, B., amp; Root, LLC, 2012. Cumene-Dow/Kellogg Process.
- Kellogg/Dow detail new route to cumene [WWW Dokument], 1994. Icis. URL <https://www.icis.com/explore/resources/news/1994/04/04/35102/kellogg-dow-detail-new-route-to-cumene> (Besucht 4.1.20).
- Lide, D.R., Haynes, W.M., 2017. CRC handbook of chemistry and physics: a ready-reference book of chemical and physical data.
- Luyben, W.L., 2010. Design and Control of the Cumene Process. Ind. Eng. Chem. Res. 49, 719–734. <https://doi.org/10.1021/ie9011535>
- PubChem, 2005a. Cumene [WWW Dokument]. URL <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/7406> (Besucht 31.12.19).
- PubChem, 2005b. Cumene [WWW Dokument]. URL <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/7406> (Besucht 30.12.19).
- Ramli, Z., Yusoff, N.A.M., Hamdan, H., 2007. DELAMINATED ZEOLITE, ITQ-6 AS HETEROGENEOUS CATALYSTFOR FRIEDEL CRAFTS ALKYLATION. Malays. J. Anal. Sci. Vol 11 No 1 2007 84-92.
- Roetzel, W., Spang, B., 2013. C3 Typische Werte von Wärmedurchgangskoeffizienten, in: VDI e. V. (Ed.), VDI-Wärmeatlas. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, pp. 85–90. [https://doi.org/10.1007/978-3-642-19981-3\\_7](https://doi.org/10.1007/978-3-642-19981-3_7)
- Schmidt, R.J., 2005. Industrial catalytic processes—phenol production. Applied Catalysis A: General 280, Issue 1, P. 89-103.
- Stephan, D., 2013. Booming Petrochemical Industry Assures Cumene Sales to Grow by 4% [WWW Dokument]. URL <https://www.process-worldwide.com/booming-petrochemical-industry-assures-cumene-sales-to-grow-by-4-a-393591/> (Besucht 29.12.19).
- Turton, R., Bailie, R.C., Whiting, W.B., Shaeiwitz, J.A., Bhattacharyya, D. (Eds.), 2012. Analysis, synthesis, and design of chemical processes, 4th ed. ed. Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ.