

Inhaltsverzeichnis

1	Geschichte	1
2	Die Natur des aromatischen Charakters	8
2.1	Molekulare Betrachtungen	8
2.2	Mechanistische Betrachtungen	13
2.2.1	Elektrophile aromatische Substitution	14
2.2.1.1	Orientierungsregeln	17
2.2.2	Nucleophile Aromatensubstitution	19
2.2.3	Radikalreaktionen	20
2.2.3.1	Pyrolyse-Verfahren	20
2.2.3.2	Oxidationsreaktionen	21
2.2.4	Umlagerungen	23
2.3	Nomenklatur	24
3	Rohstoffquellen für Aromaten	27
3.1	Entstehung der fossilen Rohstoffe und ihre Zusammensetzung	28
3.2	Kohle	31
3.2.1	Vorkommen, Zusammensetzung und Verwendung der Kohle	31
3.2.2	Thermische Kohleveredelung - Teer- und Rohbenzol-Gewinnung	35
3.2.3	Teerraffination	37
3.2.4	Aromatenanfall bei der Kohlevergasung	44
3.2.5	Aromatenherstellung durch Kohleverflüssigung	46
3.2.5.1	Geschichtliche Entwicklung	46
3.2.5.2	Mechanismen der Kohleverflüssigung	48
3.2.5.3	Weiterentwicklung der Kohlehydrierung seit 1970	52
3.2.5.4	Hydropyrolyse	56
3.3	Mineralöl	57
3.3.1	Vorkommen und Eigenschaften von Mineralöl	57
3.3.2	Raffination des Mineralöls	61

X Inhaltsverzeichnis

3.3.2.1	Destillation	61
3.3.2.2	Katalytische Crack-Verfahren	64
3.3.2.3	Katalytische Reformier-Verfahren	69
3.3.2.4	Hydrocrack-Verfahren	75
3.3.2.5	Thermisches Cracken von Kohlenwasserstoffen	79
3.3.2.5.1	Dampfpyrolyse zur Herstellung von Olefinen	79
3.3.2.5.2	Herstellung von Olefinen aus Rohöl	83
3.3.2.5.3	Sonstige thermische Crack-Verfahren	85
3.4	Herstellung aromatischer Kohlenwasserstoffe mit Hilfe von Zeolith-Katalysatoren	88
3.4.1	Aromaten aus Alkoholen	88
3.4.2	Aromaten aus kurzkettigen Alkanen	91
3.5	Nachwachsende Rohstoffe	92
3.5.1	Furfural	94
3.5.2	Lignin	95
3.5.3	Vanillin	97
3.6	Zusammenfassende Übersicht über die Herstellungsverfahren von Aromaten	99

4 Herstellung von Benzol, Toluol und Xylolen 102

4.1	Geschichte	102
4.2	Vorbehandlung der rohe Aromaten enthaltenden Gemische	103
4.2.1	Gewinnung der Aromaten.	108
4.2.1.1	Flüssig-Flüssig-Extraktion	110
4.2.1.2	Extraktiv- und Azeotropdestillation	115
4.3	Auftrennung der Aromatengemische in die Einzelkomponenten	118
4.4	Dealkylierung, Isomerisierung und Dismutation von BTX-Aromaten	126
4.4.1	Dealkylierung von Toluol und Xylolen zur Benzol-Herstellung	126
4.4.2	Isomerisierung von Xylolen	129
4.4.3	Dismutation	131
4.5	Qualitätsstandard	132
4.6	Wirtschaftliche Daten	133
4.7	Verfahrensübersicht	134

5 Herstellung und Verwendung von Benzol-Derivaten 137

5.1	Ethylbenzol	138
5.1.1	Isolierung von Ethylbenzol aus Aromatengemischen	138
5.1.2	Synthese von Ethylbenzol	138
5.1.3	Herstellung von Styrol	142

5.1.4	Substituierte Styrole	150
5.2	Cumol	151
5.3	Phenol	154
5.3.1	Phenol aus Cumol	154
5.3.2	Alternative Synthesewege zur Phenol-Erzeugung . . .	157
5.3.3	Isolierung von Phenol aus Kohlepyrolyseprodukten .	161
5.3.4	Phenol-Derivate	163
5.3.4.1	Bisphenol A	164
5.3.4.2	Cyclohexanol und Cyclohexanon	167
5.3.4.3	Alkylphenole	169
5.3.4.3.1	Kresole	170
5.3.4.3.2	Xylenole	177
5.3.4.3.3	Höhere Alkylphenole	179
5.3.4.4	Salicylsäure	181
5.3.4.5	Chlorierte Phenole	182
5.3.4.6	Nitrophenole	185
5.3.4.7	Sonstige Phenol-Derivate	187
5.3.4.8	Mehrwertige Phenole	189
5.4	Benzol-Hydrierung – Cyclohexan	196
5.5	Nitrobenzol und Anilin	199
5.5.1	Nitrobenzol	200
5.5.2	Anilin	202
5.5.3	Anilin-Derivate	205
5.5.3.1	4,4'-Diphenylmethandiisocyanat (MDI)	205
5.5.3.2	Cyclohexylamin und Benzothiazol-Derivate	208
5.5.3.3	Sekundäre und tertiäre Anilin-Basen	209
5.5.3.4	Sonstige Anilin-Derivate	211
5.6	Alkylbenzole und Alkylbenzolsulfonate	217
5.7	Maleinsäureanhydrid	221
5.8	Chlorbenzole	225
5.8.1	Chlorbenzol	225
5.8.1.1	Nitrochlorbenzole	230
5.8.2	Dichlorbenzole	237
5.8.3	Hexachlorcyclohexan	241
5.9	Verfahrensübersicht	242

6 Herstellung und Verwendung von Toluol-Derivaten 244

6.1	Nitroderivate des Toluols	245
6.1.1	Mononitrotoluole und ihre Folgeprodukte	245
6.1.2	Dinitrotoluole und ihre Folgeprodukte	251
6.1.3	Trinitrotoluol-Verbindungen	255
6.2	Benzoessäure	255
6.3	Chlor-Derivate des Toluols	258
6.3.1	Seitenkettenchlorierung von Toluol	258
6.3.1.1	Benzychlorid	259

XII Inhaltsverzeichnis

6.3.1.2	Benzalchlorid	264
6.3.1.3	Benzotrichlorid	267
6.3.2	Kernchlorierung von Toluol	268
6.4	Sulfonsäure-Derivate des Toluols	270
6.5	Toluolsulfochlorid	272
6.6	Sonstige Toluol-Derivate	273

7 Herstellung und Verwendung von Xylol-Derivaten 274

7.1	o-Xylol und seine Folgeprodukte	274
7.1.1	Oxidation von o-Xylol zu Phthalsäureanhydrid . . .	274
7.1.2	Herstellung von Phthalsäureestern	281
7.1.3	Sonstige Phthalsäureanhydrid-Folgeprodukte	284
7.1.4	Nitrierung von o-Xylol	287
7.2	m-Xylol und seine Folgeprodukte	289
7.2.1	Herstellung von Isophthalsäure	289
7.2.2	Sonstige Folgeprodukte von m-Xylol	290
7.3	p-Xylol und seine Folgeprodukte	292
7.3.1	Terephthalsäure	292
7.3.2	Sonstige p-Xylol-Derivate	300

8 Mehrfach alkylierte Benzole – Herstellung und Verwendung . 301

8.1	Pseudocumol	302
8.2	Mesitylen	304
8.3	Durol	305
8.4	Weitere Cumol-Derivate	306
8.4.1	Nitrocumol und Isoproturon	306
8.4.2	Cumolsulfonsäure	306
8.5	Indan und Inden	307

9 Naphthalin – Herstellung und Verwendung 308

9.1	Geschichte	308
9.2	Gewinnung von Naphthalin	309
9.2.1	Naphthalin aus Steinkohlenteer	309
9.2.2	Naphthalin aus petrostämmigen Rohstoffen	316
9.3	Naphthalin-Derivate	319
9.3.1	Herstellung von Phthalsäureanhydrid aus Naphthalin	319
9.3.2	Herstellung und Verwendung von Naphthochinon .	321
9.3.3	Herstellung und Verwendung der Naphthole	324
9.3.3.1	α -Naphthol und seine Folgeprodukte	324
9.3.3.2	β -Naphthol und seine Folgeprodukte	327

9.3.4	Sulfonsäure-Derivate des Naphthalins	334
9.3.5	Nitro- und Aminonaphthaline	339
9.3.6	Herstellung von Tetralin und Tetralon	340
9.3.7	Herstellung von Isopropylnaphthalin-Derivaten . . .	341
9.3.8	Sonstige Alkylnaphthaline aus Naphthalin	343
9.4	Verfahrensübersicht	344

10 Alkylnaphthaline und weitere Zweikernaromaten

- Herstellung und Verwendung 346

10.1	Diphenyl	346
10.2	Methylnaphthaline	348
10.3	Acenaphthen/Acenaphthylen	352

11 Anthracen - Herstellung und Verwendung 355

11.1	Gewinnung von Anthracen	355
11.2	Herstellung von Anthrachinon	358
11.2.1	Oxidation von Anthracen zu Anthrachinon	358
11.2.2	Aufbauende Synthese von Anthrachinon	360
11.3	Anthrachinon-Derivate	362
11.3.1	Herstellung von Anthrachinon-Derivaten aus Anthrachinon	362
11.3.2	Aufbauende Synthese von Anthrachinon-Derivaten .	367
11.4	Höherkondensierte Farbstoffe aus Anthrachinon . .	370
11.5	Anthrachinon als Katalysator bei der Wasserstoffperoxid-Erzeugung	372
11.6	Holzaufschluß mit Anthrachinon	373

12 Sonstige Mehrkernaromaten - Herstellung und Verwendung 375

12.1	Phenanthren	375
12.2	Fluoren	377
12.3	Fluoranthren	378
12.4	Pyren	378

13 Herstellung und Verwendung von Kohlenstoffprodukten

aus Gemischen von kondensierten Aromaten 381

13.1	Pyrolyse von aromatischen Kohlenwasserstoff- Gemischen in der Flüssigphase	382
13.1.1	Mesophasenbildung	382
13.1.2	Herstellung und Verwendung von Koks aus aromatischen Rückständen nach dem Delayed-Coking-Verfahren	388

XIV Inhaltsverzeichnis

13.1.3	Pechverkokung im Horizontalkammerofen	394
13.1.4	Herstellung von Kohlenstoff-Fasern	394
13.2	Pyrolyse von Aromatengemischen in der Gasphase – Ruß-Erzeugung	396

14 Aromatische Heterocyclen – Herstellung und Verwendung . . 401

14.1	Fünfring-Heterocyclen	402
14.1.1	Furan	402
14.1.2	Thiophen	403
14.1.3	Pyrrol	403
14.1.4	Fünfring-Heterocyclen mit zwei und mehr Heteroatomen	405
14.2	Sechsring-Heterocyclen	408
14.2.1	Pyridin	408
14.2.2	Pyridin-Derivate	415
14.2.3	Alkylierte Pyridine	418
14.3	Pyrimidin	426
14.4	Triazine	427
14.5	Kondensierte Heterocyclen	431
14.5.1	Thionaphthen	431
14.5.2	Indol	432
14.5.3	Benzothiazol	433
14.5.4	Benzotriazol	433
14.5.5	Chinolin und Isochinolin	434
14.5.6	Carbazol	438
14.5.7	Diphenylenoxid	440

15 Toxikologie/Produktumweltschutz 442

15.1	Toxikologische Grundsatzbetrachtungen	442
15.2	Arbeitsmedizinische Aspekte und gesetzliche Rahmenbedingungen	443
15.3	Umweltschutzaspekte und biologischer Abbau von Aromaten	461

16 Zukunftsaspekte der Aromatenchemie 463

Anhang 465

Literaturverzeichnis 471

Sachverzeichnis 489