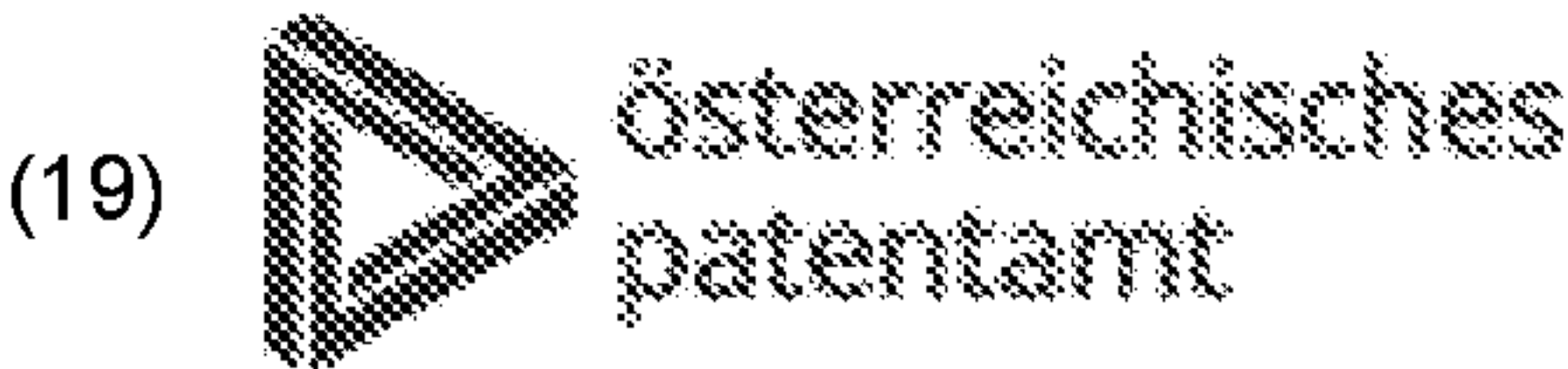




(10) **AT 522389 A1 2020-10-15**

(12) **Österreichische Patentanmeldung**

(21)	Anmeldenummer:	A 51129/2019	(51)	Int. Cl.:	C10G 9/00	(2006.01)
(22)	Anmeldetag:	19.12.2019			C10G 9/36	(2006.01)
(43)	Veröffentlicht am:	15.10.2020			C10G 57/02	(2006.01)
					C10L 1/04	(2006.01)

(30)	Priorität: 03.04.2019 FI FI 20195271 beansprucht.	(71)	Patentanmelder: NESTE OYJ 02150 Espoo (FI)
(56)	Entgegenhaltungen: WO 2016058953 A1 WO 2014111598 A2 EP 3095844 A1	(72)	Erfinder: Jamieson John 06101 Porvoo (FI) Ojala Antti 06101 Porvoo (FI)
		(74)	Vertreter: Sonn & Partner Patentanwälte 1010 Wien (AT)

(54) **Verfahren und Ausgangsstoff zur Herstellung von Kohlenwasserstoffen**

(57) Es sind ein Verfahren zur Herstellung eines Crackprodukts, aufweisend ein Gemisch aus Kohlenwasserstoffen, ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken, ein Crackprodukt, aufweisend ein Gemisch aus Kohlenwasserstoffen, und ein Verfahren zur Herstellung von Polymeren unter Verwendung des Crackprodukts bereitgestellt.

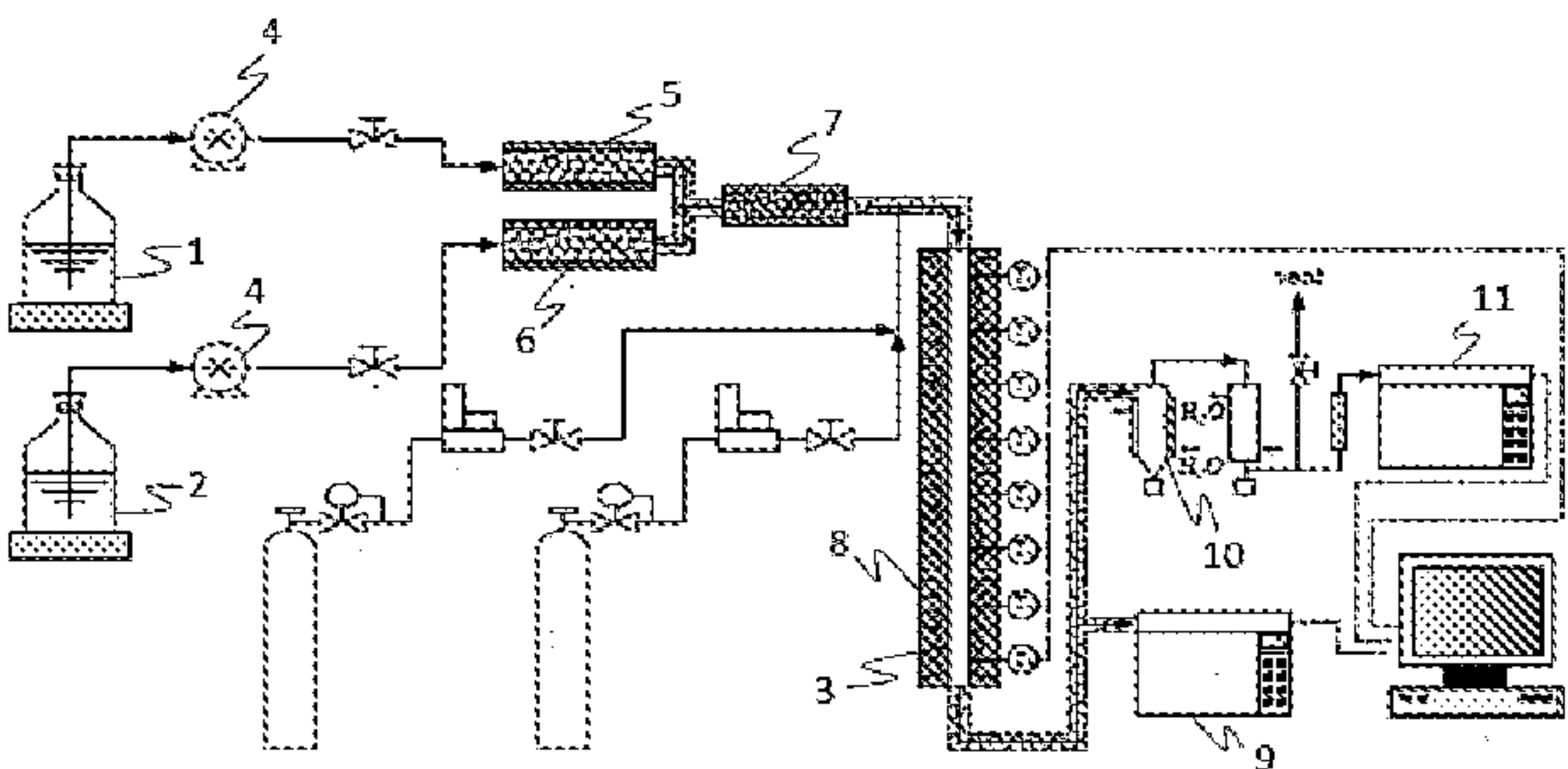


Fig. 1

Zusammenfassung

Es sind ein Verfahren zur Herstellung eines Crackprodukts, aufweisend ein Gemisch aus Kohlenwasserstoffen, ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken, ein Crackprodukt, aufweisend ein Gemisch aus Kohlenwasserstoffen, und ein Verfahren zur Herstellung von Polymeren unter Verwendung des Crackprodukts bereitgestellt.

(FIG. 1)

TECHNISCHES GEBIET

Die vorliegende Erfindung betrifft im Allgemeinen ein Verfahren zur Herstellung von Kohlenwasserstoffen durch thermisches Cracken. Die Erfindung betrifft insbesondere, wenn auch nicht ausschließlich, ein Verfahren zur Herstellung eines Kohlenwasserstoffe aufweisenden Crackprodukts durch thermisches Cracken eines mindestens teilweise aus erneuerbaren Quellen stammenden Ausgangsstoffs, wobei bevorzugt mindestens ein Teil des Crackprodukts zur Herstellung von Polymeren verwendet wird.

ALLGEMEINER STAND DER TECHNIK

Dieser Abschnitt stellt nützliche Informationen zum Stand der Technik dar, ohne dass eines der hierin beschriebenen Verfahren als repräsentativ für den Stand der Technik angesehen wird.

Dampfcracken ist ein wichtiges Verfahren zur Herstellung von Chemikalien aus fossilen Kohlenwasserstoffen. Wertvolle Produkte einer Crackanlage für scharfes Spalten von fossilem Naphtha sind beispielsweise Ethen, Propen, 1,3-Butadien und BTX (Benzol, Toluol, Xylol). Dampfcracken ist die Hauptquelle von Rohstoffen für die herkömmliche Petrochemie und insbesondere für die Polymerindustrie. Hauptpolymere, wie Polyethylen (PE), Polypropen (PP) und Polyethylenterephthalat (PET) werden herkömmlicherweise aus Rohstoffen erhalten, die durch Dampfcracken fossiler Kohlenwasserstoffe hergestellt werden. In jüngster Zeit wurde vorgeschlagen, mindestens einen Teil der fossilen Rohstoffe, die herkömmlich als Ausgangsstoff für Dampfcrackanlagen verwendet werden, durch nachhaltigere Rohstoffe aus erneuerbaren Quellen zu ersetzen, um Umweltbelangen Rechnung zu tragen.

Beim Dampfcracken werden hauptsächlich Kohlenwasserstoffe hergestellt, als Nebenprodukte werden jedoch beispielsweise CO und CO₂ produziert.

KURZDARSTELLUNG

Gemäß einem ersten Aspekt der Erfindung wird ein Verfahren bereitgestellt, welches die folgenden Schritte aufweist: a) Bereitstellen eines Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, der 1

bis 100 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken aufweist, wobei die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist, wobei von den Paraffinen 10 bis 95 Gew.-% Isoparaffine sind, und das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen weniger als 0,15 beträgt, und 0 bis 99 Gew.-% fossiles Naphtha des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas mindestens 90 Gew.-% des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken beträgt; und b) thermisches Cracken des in Schritt a) bereitgestellten Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, um ein Crackprodukt zu bilden, das ein Gemisch aus Kohlenwasserstoffen aufweist. Die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die in dem Crackschritt gebildet wird, ist niedriger, wenn ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken, der eine erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweist, thermisch gecrackt wird, wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung weniger als 0,15 beträgt, verglichen mit dem thermischen Cracken eines Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, das eine erneuerbare Paraffinzusammensetzung aufweist, welche das Kriterium nicht erfüllt.

In bestimmten Ausführungsformen weist der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 50 bis 100 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken und 0 bis 50 Gew.-% fossiles Naphtha des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken auf. In bestimmten Ausführungsformen weist der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 50 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 50 Gew.-% fossiles Naphtha, vorzugsweise 60 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 40 Gew.-% fossiles Naphtha, bevorzugter 70 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 30 Gew.-% fossiles Naphtha, des

Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken auf. Die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung fördert die Bildung hochwertiger Chemikalien (Ethen, Propen, 1,3-Butadien, Benzol, Toluol und Xylol) in dem thermischen Crackschritt im Vergleich zu dem thermischen Cracken fossilen Naphthas. Diese Wirkung wird ausgeprägter, je mehr die Gewichtsprozent-Menge der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung in dem Ausgangsstoff für thermisches Cracken zunimmt, und dementsprechend ist ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken bevorzugt, der mindestens 50 Gew.-% der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist. Durch Erhöhung der Gewichtsprozent-Menge der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung erhöht sich die Gewichtsprozent-Menge an erneuerbaren Rohstoffen in dem Ausgangsstoff für thermisches Cracken, und damit in dem Crackprodukt.

In bestimmten Ausführungsformen beträgt die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas mindestens 95 Gew.-%, bevorzugt mindestens 99 Gew.-%, des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken. Für das thermische Cracken eignen sich insbesondere Ausgangsstoffe, die hauptsächlich die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und fossiles Naphtha aufweisen.

In bestimmten Ausführungsformen beträgt das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung weniger als 0,12, bevorzugt weniger als 0,10, bevorzugter weniger als 0,05. Das Verringern des Verhältnisses der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung verringert weiter die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die in dem thermischen Crackschritt gebildet wird.

In bestimmten Ausführungsformen liegen mindestens 80 Gew.-%, bevorzugt mindestens 85 Gew.-%, bevorzugter mindestens 90 Gew.-%, noch bevorzugter mindestens 95 Gew.-%, der Isoparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung im Bereich der

Kohlenstoffzahl C14 bis C18. Die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die in dem thermischen Crackschritt gebildet wird, wird weiter verringert, wenn ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken, welcher die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweist, thermisch gecrackt wird, wobei mindestens 80 Gew.-% der Isoparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen, im Vergleich zu dem thermischen Cracken eines Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, der eine erneuerbare Paraffinzusammensetzung aufweist, welche dieses Kriterium nicht erfüllt. Die Gesamtmenge an CO, CO₂, C₂H₂, die in dem thermischen Crackschritt gebildet wird, verringert sich weiter, wenn sich das Gewichtsprozent der Isoparaffine im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung erhöht.

In bestimmten Ausführungsformen sind von den Paraffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung 60 bis 95 Gew.-%, bevorzugt 60 bis 80 Gew.-%, weiter bevorzugt 65 bis 70 Gew.-%, Isoparaffine. Erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzungen, die mindestens 60 Gew.-% Isoparaffine aufweisen, haben gute Kälteeigenschaften und eine gute Mischbarkeit mit fossilem Naphtha.

In bestimmten Ausführungsformen weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung mindestens 70 Gew.-%, bevorzugt mindestens 80 Gew.-%, weiter bevorzugt mindestens 90 Gew.-%, bevorzugter mindestens 95 Gew.-%, und noch bevorzugter mindestens 99 Gew.-%, Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf. Ausgangsstoffe für thermisches Cracken, welche die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung mit einem hohen Paraffingehalt aufweisen, fördern in dem thermischen Crackschritt eine hohe Ausbeute an C2- und C3-Kohlenwasserstoffen, wie Ethen und Propen, die beide wertvolle Crackprodukte sind.

In bestimmten Ausführungsformen weist das fossile Naphtha 20 bis 85 Gew.-% Paraffine, 0 bis 35 Gew.-% Olefine, 10 bis 30 Gew.-% Naphthene und 0 bis 30 Gew.-% Aromaten des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas auf. In bestimmten Ausführungsformen beträgt das Gewichtsprozent der Kohlenwasserstoffe in dem fossilen Naphtha

mindestens 95 Gew.-%, bevorzugter mindestens 99 Gew.-%, des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas.

In bestimmten Ausführungsformen weist der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 20 bis 300 Gew.-ppm, bevorzugt 20 bis 250 Gew.-ppm, bevorzugter 20 bis 100 Gew.-ppm und noch bevorzugter 50 bis 65 Gew.-ppm, Schwefel auf. Der Schwefel aufweisende Ausgangsstoff für thermisches Cracken verringert ferner die Bildung von CO und CO₂ in dem thermischen Crackschritt. Da die in dem Ausgangsstoff für thermisches Cracken enthaltene erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung bereits die in dem thermischen Crackschritt gebildete Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂ reduziert, ist es nicht erforderlich, dass der Ausgangsstoff für thermisches Cracken große Mengen an Schwefel enthält. Eine niedrige Schwefelmenge des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken führt zu einem Crackprodukt mit einem niedrigen Schwefelgehalt.

In bestimmten Ausführungsformen wird Schritt b) bei einer Spaltschlangen-Austrittstemperatur (COT, engl. coil outlet temperature) vollzogen, die aus dem Bereich von 780 °C bis 890 °C, bevorzugt von 800 °C bis 860 °C, bevorzugter von 800 °C bis 840 °C, und noch bevorzugter von 800 °C bis 820 °C, ausgewählt ist. Eine niedrige Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂ kann erhalten werden, indem der thermische Crackschritt bei einer Spaltschlangen-Austrittstemperatur (COT) durchgeführt wird, die aus einem breiten Temperaturbereich ausgewählt ist. Die Auswahl der COT aus dem Bereich von 800 °C bis 840 °C verringert insbesondere die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die in dem thermischen Crackschritt gebildet wird. In bestimmten Ausführungsformen handelt es sich bei dem in Schritt b) durchgeführten thermischen Cracken um Dampfcracken.

In bestimmten Ausführungsformen weist das Verfahren den Schritt c) auf, bei dem mindestens ein Teil des in Schritt b) gebildeten Crackprodukts einer Reinigungsbehandlung unterzogen wird, um mindestens eines von CO, CO₂ oder C₂H₂ zu entfernen. Ein Vorteil des Verfahrens gemäß dem ersten Aspekt ist ein verringerter Aufwand der Abtrennung von CO, CO₂, C₂H₂ oder einer Kombination davon, die eine effiziente Reinigung ermöglicht.

In bestimmten Ausführungsformen weist das Verfahren den Schritt d) auf, bei dem mindestens eines Teil des in Schritt b) gebildeten

Crackprodukts oder mindestens ein Teil des Crackprodukts, welches der Reinigungsbehandlung von Schritt c) unterzogen wurde, oder beider, einer Polymerisationsbehandlung unterzogen wird, um Polymere herzustellen. In bestimmten Ausführungsformen handelt es sich bei der Polymerisationsbehandlung um eine katalytische Polymerisationsbehandlung. In bestimmten Ausführungsformen weist die Polymerisationsbehandlung das Inkontaktbringen mindestens eines Teils des in Schritt b) gebildeten Crackprodukts oder mindestens eines Teils des Crackprodukts, welches der Reinigungsbehandlung von Schritt c) unterzogen wurde, oder beider, mit einem Polymerisationskatalysator auf, gegebenenfalls in der Gegenwart von molekularem Wasserstoff, um Polymere zu bilden. Das in Schritt b) gebildete und gegebenenfalls in Schritt c) gereinigte Crackprodukt ist aufgrund der niedrigen Gesamtmenge der in dem thermischen Crackschritt gebildeten Polymerisationskatalysatorgifte CO, CO₂ und C₂H₂ insbesondere zur Polymerisation geeignet. Ferner stammen in Schritt d) gebildete Polymere mindestens teilweise aus erneuerbaren Quellen und sind somit nachhaltiger als Polymere, die ausschließlich aus fossilen Quellen stammen.

In bestimmten Ausführungsformen weist das Verfahren das Bereitstellen mehrerer thermischer Cracköfen und das Durchführen von Schritt b) in mindestens einem der mehreren thermischen Cracköfen auf. In bestimmten Ausführungsformen weist das Verfahren das Erhalten von Crackprodukten aus den mehreren thermischen Cracköfen und das Mischen der erhaltenen Crackprodukte, um ein kombiniertes Crackprodukt zu bilden, und gegebenenfalls das Unterziehen mindestens eines Teils des kombinierten Crackprodukts einer Reinigungsbehandlung, um mindestens eines von CO, CO₂ oder C₂H₂ zu entfernen, oder einer Polymerisationsbehandlung, um Polymere zu bilden, oder sowohl der Reinigungsbehandlung als auch der Polymerisationsbehandlung, auf.

Gemäß einem zweiten Aspekt der Erfindung wird ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken bereitgestellt, der 1 bis 100 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken aufweist, wobei die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist, wobei von den Paraffinen 10 bis

95 Gew.-% Isoparaffine sind, und das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen weniger als 0,15 beträgt, und 0 bis 99 Gew.-% fossiles Naphtha des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas mindestens 90 Gew.-% des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken beträgt. Wenn ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken, der eine erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweist, wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung weniger als 0,15 beträgt, thermischem Cracken unterzogen wird, ist die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die gebildet wird, niedriger als wenn ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken, der eine erneuerbare paraffinische Zusammensetzung aufweist, die dieses Kriterium nicht erfüllt, thermisch gecrackt wird.

In bestimmten Ausführungsformen weist der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 50 bis 100 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken und 0 bis 50 Gew.-% fossiles Naphtha des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken auf. In bestimmten Ausführungsformen weist der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 50 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 50 Gew.-% fossiles Naphtha, bevorzugt 60 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 40 Gew.-% fossiles Naphtha, bevorzugter 70 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 30 Gew.-% fossiles Naphtha, des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, auf. Ausgangsstoffe für thermisches Cracken, die mindestens 50 Gew.-% der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweisen, fördern die Bildung hochwertiger Chemikalien (HVC, d. h. Ethen, Propen, 1,3-Butadien, Benzol, Toluol und Xylol), wenn sie thermischem Cracken unterzogen werden, und sind nachhaltiger im Vergleich zu Ausgangsstoffen für thermisches Cracken, die ein

niedrigeres Gewichtsprozent der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweisen.

In bestimmten Ausführungsformen beträgt die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas mindestens 95 Gew.-%, bevorzugter mindestens 99 Gew.-%, des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken.

In bestimmten Ausführungsformen beträgt das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung weniger als 0,12, bevorzugt weniger als 0,10, bevorzugter weniger als 0,05. Das Verringern des Verhältnisses der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung, welche der Ausgangsstoff für thermisches Cracken aufweist, verringert weiter die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die gebildet wird, wenn der Ausgangsstoff für thermisches Cracken thermischem Cracken unterzogen wird.

In bestimmten Ausführungsformen liegen von den Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung mindestens 80 Gew.-%, bevorzugt mindestens 85 Gew.-%, bevorzugter mindestens 90 Gew.-%, noch bevorzugter mindestens 95 Gew.-%, im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18. Ausgangsstoffe für thermisches Cracken, welche die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweisen, wobei mindestens 80 Gew.-% der Isoparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen, verringern weiter die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die gebildet wird, wenn der Ausgangsstoff für thermisches Cracken thermischem Cracken unterzogen wird, verglichen mit thermischem Cracken eines Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, der dieses Kriterium nicht erfüllt. Diese Wirkung wird ausgeprägter, je mehr das Gewichtsprozent der Isoparaffine im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung, welche den Ausgangsstoff für thermisches Cracken aufweist, zunimmt.

In bestimmten Ausführungsformen sind von den Paraffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung 60 bis 95 Gew.-%, bevorzugt 60 bis 80 Gew.-%, weiter bevorzugt 65 bis 70 Gew.-%, Isoparaffine. Erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzungen, die mindestens 60 Gew.-% Isoparaffine aufweisen, haben gute Kälteeigenschaften und eine gute Mischbarkeit mit fossilem Naphtha.

In bestimmten Ausführungsformen weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung mindestens 70 Gew.-%, bevorzugt mindestens 80 Gew.-%, weiter bevorzugt mindestens 90 Gew.-%, bevorzugter mindestens 95 Gew.-%, noch bevorzugter mindestens 99 Gew.-%, Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf. Ein hoher Paraffingehalt der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung, welche den Ausgangsstoff für thermisches Cracken aufweist, fördert eine hohe Ausbeute an C₂- und C₃-Kohlenwasserstoffen, wie Ethen und Propen, wenn der Ausgangsstoff für thermisches Cracken thermischem Cracken unterzogen wird.

In bestimmten Ausführungsformen weist das fossile Naphtha 20 bis 85 Gew.-% Paraffine, 0 bis 35 Gew.-% Olefine, 10 bis 30 Gew.-% Naphthene und 0 bis 30 Gew.-% Aromaten des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas auf. In bestimmten Ausführungsformen beträgt das Gew.-% der Kohlenwasserstoffe in dem fossilen Naphtha mindestens 95 Gew.-%, bevorzugter mindestens 99 Gew.-%, des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas.

In bestimmten Ausführungsformen weist der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 20 bis 300 Gew.-ppm, bevorzugt 20 bis 250 Gew.-ppm, bevorzugter 20 bis 100 Gew.-ppm und am meisten bevorzugt 50 bis 65 Gew.-ppm, Schwefel auf. Der Schwefel aufweisende Ausgangsstoff für thermisches Cracken verringert ferner die Bildung von CO und CO₂, wenn der Ausgangsstoff für thermisches Cracken thermischem Cracken unterzogen wird. Da die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung, welche den Ausgangsstoff für thermisches Cracken aufweist, bereits die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂ reduziert, die gebildet wird, wenn der Ausgangsstoff für thermisches Cracken thermischem Cracken unterzogen wird, ist es nicht erforderlich, dass der Ausgangsstoff für thermisches Cracken große Mengen an Schwefel enthält.

Gemäß einem dritten Aspekt der Erfindung, wird ein Crackprodukt bereitgestellt, das ein Gemisch aus Kohlenwasserstoffen aufweist, das durch ein Verfahren nach dem ersten Aspekt erhältlich ist, wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen von CO, CO₂ und C₂H₂ in dem Crackprodukt weniger als 1,5 Gew.-%, bevorzugt weniger als 1,3 Gew.-%, bevorzugter weniger als 1,1 Gew.-%, noch bevorzugter weniger als 0,8 Gew.-%, des Gesamtgewichts des Crackprodukts beträgt.

Gemäß einem vierten Aspekt der Erfindung wird die Verwendung des Crackprodukts gemäß dem dritten Aspekt zur Herstellung von Polymeren, wie Polypropen, Polyethylen oder beidem, bereitgestellt. In bestimmten Ausführungsformen wird das Crackprodukt gemäß dem dritten Aspekt zur Herstellung von Polymeren durch eine katalytische Polymerisationsbehandlung verwendet. Das Crackprodukt des dritten Aspekts ist aufgrund der niedrigen Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die Polymerisationskatalysatorgifte sind, insbesondere für die Polymerisation geeignet.

Gemäß einem fünften Aspekt der Erfindung wird ein Erzeugnis bereitgestellt, das Polymere aufweist, die durch ein Verfahren gemäß dem ersten Aspekt erhältlich sind, das Schritt d) aufweist oder das Unterziehen mindestens eines Teils eines kombinierten Crackprodukts einer Polymerisationsbehandlung, um Polymere zu bilden, aufweist. Die Polymere, welche das Erzeugnis aufweist, stammen mindestens teilweise aus erneuerbaren Quellen somit ist das Erzeugnis nachhaltiger als Erzeugnisse, die ausschließlich Polymere aufweisen, die aus fossilen Quellen stammen.

Im Vorstehenden wurden verschiedene nicht bindende Aspekte und Ausführungsformen der vorliegenden Erfindung dargestellt. Die vorstehenden Ausführungsformen dienen lediglich zur Erläuterung ausgewählter Aspekte oder Schritte, die in Umsetzungen der vorliegenden Erfindung verwendet werden können. Einige Ausführungsformen können nur mit Bezug auf bestimmte Aspekte der Erfindung dargelegt werden. Es versteht sich, dass entsprechende Ausführungsformen auch für andere Aspekte gelten können.

KURZBESCHREIBUNG DER ZEICHNUNGEN

Nachfolgend werden einige Ausführungsbeispiele der Erfindung mit Bezug auf die beigelegte Zeichnung näher beschrieben. Es zeigt:

Fig. 1 eine schematische Zeichnung einer Dampfcrack-Einrichtung im Labormaßstab, der in den Beispielen verwendet wird, zeigt.

AUSFÜHRLICHE BESCHREIBUNG

In der nachfolgenden Beschreibung bezeichnen gleiche Bezugszeichen gleiche Elemente oder Schritte.

Die vorliegende Erfindung betrifft ein Verfahren, aufweisend das Bereitstellen eines Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, das mindestens teilweise aus erneuerbaren Quellen stammt, nämlich einen Ausgangsstoff für thermisches Cracken, der eine erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweist, und das thermische Cracken des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, um ein Crackprodukt zu bilden, das ein Gemisch aus Kohlenwasserstoffen aufweist. Ferner betrifft die vorliegende Erfindung die Verwendung des Crackprodukts, das ein Gemisch aus Kohlenwasserstoffen zur Herstellung von Polymeren aufweist.

Wie hierin verwendet, bezieht sich eine erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung auf eine Zusammensetzung, die aus einer erneuerbaren Quelle oder erneuerbaren Quellen stammt und weitgehend Paraffine (nicht zyklische Alkane), sowohl lineare, normale Paraffine (n-Paraffine) als auch verzweigte Isoparaffine (i-Paraffine) aufweist. Bei den Isoparaffinen kann es sich um einfachverzweigte i-Paraffine, zweifach verzweigte i-Paraffine, dreifachverzweigte i-Paraffine, i-Paraffine mit mehr als drei Verzweigungen oder eine Kombination davon handeln. Bevorzugt handelt es sich bei den Isoparaffinen um methylsubstituierte Isoparaffine, d. h. um Isoparaffine, bei denen die Seitenkette oder Seitenketten, d. h. die Verzweigung oder Verzweigungen, Methylseitenketten sind. Theoretisch kann die Anzahl der Verzweigungen aus einer Strukturformel bestimmt werden, indem zuerst die längste Kohlenstoffkette festgestellt und dann die Verzweigungen berechnet werden, die an die längste Kohlenstoffkette angelagert sind. In der Praxis kann jedoch die Anzahl der Seitenketten (Verzweigungen) durch jedes geeignete

Analyseverfahren, wie das in den Beispielen beschriebene Analyseverfahren, bestimmt werden.

Überraschenderweise wurde festgestellt, dass das thermische Cracken eines erneuerbaren paraffinischen Ausgangsstoffs dazu neigt, die Herstellung unerwünschter Produkte, insbesondere der Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, im Vergleich zu dem thermischen Cracken herkömmlicher fossiler Ausgangsstoffe, insbesondere fossilem Naphtha, zu erhöhen. Diese unerwünschte Wirkung zeigte sich besonders ausgeprägt beim thermischen Cracken von Gemischen aus einer erneuerbaren paraffinischen Ausgangsstoffkomponente und einer fossilen Ausgangsstoffkomponente, wie fossilem Naphtha. CO und CO₂ sind Polymerisationskatalysatorgifte, weshalb Crackprodukte, die einem Polymerisationsverfahren zugeführt werden, bevorzugt nicht mehr als 15 Vol.-ppm, bevorzugter nicht mehr als 0,2 Vol.-ppm und noch bevorzugter nicht mehr als 0,03 Vol.-ppm, CO und bevorzugt nicht mehr als 10 Vol.-ppm, wie nicht mehr als 0,09 Vol.-ppm, bevorzugter nicht mehr als 0,1 Vol.-ppm, CO₂ enthalten sollten. C₂H₂ kann auch als Polymerisationskatalysatorgift wirken, insbesondere für Katalysatoren bei der Polyethylenherstellung. So sollten Crackprodukte, die einem Polymerisationsverfahren zugeführt werden, vorzugsweise weniger als 10 Vol.-ppm C₂H₂, besonders bevorzugt weniger als 2,7 Vol.-ppm, noch bevorzugter weniger als 1 Vol.-ppm enthalten. Daher besteht üblicherweise ein hoher Aufwand durch die Entfernung von CO, CO₂ und C₂H₂, bevor Crackprodukte aus Ausgangsstoffen für thermisches Cracken, die eine erneuerbare paraffinische Ausgangsstoffkomponente aufweisen, einem Polymerisationsverfahren zugeführt werden können.

Überraschenderweise wurde jedoch festgestellt, dass die oben beschriebene Wirkung einer erhöhten Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂ durch Auswählen oder Bereitstellen einer erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung, die mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist, wobei die Paraffine 10 bis 95 Gew.-% Isoparaffine sind, und wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen weniger als 0,15 beträgt, als ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken oder als eine Ausgangsstoffkomponente für thermisches Cracken, die mit fossilem

Naphtha gemischt ist, und durch thermisches Cracken des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken gemildert werden kann. Das thermische Cracken eines Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, der eine erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweist oder aus dieser besteht, wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen weniger als 0,15 beträgt, verringert die gebildete Gesamtmenge an CO , CO_2 und C_2H_2 verglichen mit dem thermischen Cracken von Ausgangsstoffen, die eine erneuerbare paraffinische Ausgangsstoffkomponente aufweisen oder aus dieser bestehen, welche dieses Kriterium nicht erfüllt. Überraschenderweise, ohne an eine Theorie gebunden zu sein, scheint das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung ein wichtiger Faktor bei der Überwachung der Bildung von CO , CO_2 und C_2H_2 während des thermischen Crackverfahrens zu sein.

In der vorliegenden Offenbarung wird das Gewichtsprozent der Paraffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung bezüglich des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung bestimmt, und die Gewichtsprozentsätze der Isoparaffine (Gesamt-Gewichtsprozent der Isoparaffine) und Normalparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung werden jeweils bezüglich des Gesamtgewichts der Paraffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung bestimmt. Ferner werden in der vorliegenden Offenbarung die Gewichtsprozentsätze der einfach verzweigten Isoparaffine, zweifach und dreifachverzweigten Isoparaffine und Isoparaffine mit mehr als drei Verzweigungen jeweils bezüglich des Gesamtgewichts der Paraffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung bestimmt. Das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen wird in der vorliegenden Offenbarung basierend auf den jeweiligen Gewichtsprozentsätzen bestimmt, die bezüglich des Gesamtgewichts der Paraffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung bestimmt werden.

Es wurde festgestellt, dass durch weiteres Verringern des Verhältnisses der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die in dem thermischen Crackschritt gebildet wird, weiter verringert wird. Dementsprechend beträgt das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung weniger als 0,12, bevorzugt weniger als 0,10, bevorzugter weniger als 0,05. Das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung kann aus etwa 0,14, 0,13, 0,12, 0,11, 0,10, 0,09, 0,08, 0,07, 0,06, 0,05, 0,04, 0,03, 0,02 und 0,01 ausgewählt sein. In bestimmten Ausführungsformen beträgt das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung mindestens 0,01. Dementsprechend kann das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung mindestens 0,01 und weniger als 0,15, bevorzugt mindestens 0,01 und weniger als 0,12, bevorzugter mindestens 0,01 und weniger als 0,10 und noch bevorzugter mindestens 0,01 und weniger als 0,05 betragen.

Es wurde ferner festgestellt, dass durch Bereitstellen eines Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, der 1 bis 100 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken aufweist, als Ausgangsstoff für thermisches Cracken, wobei die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist, wobei von den Paraffinen 10 bis 95 Gew.-% Isoparaffine sind, und wobei von den Isoparaffinen mindestens 80 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen, und wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge an

Isoparaffinen weniger als 0,15, bevorzugt weniger als 0,12, bevorzugter weniger als 0,10, noch bevorzugter weniger als 0,05, beträgt, und 0 bis 99 Gew.-% fossiles Naphtha des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas mindestens 90 Gew.-% des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken beträgt, die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die in dem thermischen Crackschritt gebildet werden, im Vergleich zu thermischem Cracken von Ausgangsstoffen für thermisches Cracken, die eine erneuerbare paraffinische Ausgangsstoffkomponente aufweisen oder daraus bestehen, welche diese Kriterien nicht erfüllt. Beim thermischen Cracken eines Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, der die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweist oder aus dieser besteht, wobei von den Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung mindestens 80 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen, wird die Gesamtmenge an gebildetem CO, CO₂ und C₂H₂ reduziert, verglichen mit thermischem Cracken von Ausgangsstoffen, die eine erneuerbare paraffinische Ausgangsstoffkomponente mit Isoparaffinen mit einer größeren Kohlenstoffzahlverteilung aufweisen oder daraus bestehen. Es scheint, ohne an eine Theorie gebunden zu sein, dass die Kohlenstoffzahlverteilung der Isoparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung ein Faktor ist, welcher die Bildung von CO, CO₂ und C₂H₂ während des thermischen Crackschritts steuert. In der vorliegenden Offenbarung wird der Gewichtsprozentsatz an Isoparaffinen im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 bezüglich des Gesamtgewichts der Isoparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung bestimmt.

Das Erhöhen der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen, die in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung im Bereich der Kohlenstoffzahlen C14 bis C18 liegen, verringert weiter die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die in dem thermischen Crackschritt gebildet wird. Dementsprechend weist die isomere Paraffinzusammensetzung in bestimmten Ausführungsformen mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf, wobei von den Paraffinen 10

bis 95 Gew.-% Isoparaffine sind, und wobei von den Isoparaffinen mindestens 85 Gew.-%, bevorzugt mindestens 90 Gew.-%, bevorzugter mindestens 95 Gew.-%, im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen, und wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine weniger als 0,15 beträgt. Die Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung im Bereich der Kohlenstoffzahlen C14 bis C18 kann aus etwa 85 Gew.-%, 86 Gew.-%, 87 Gew.-%, 88 Gew.-%, 89 Gew.-%, 90 Gew.-%, 91 Gew.-%, 92 Gew.-%, 93 Gew.-%, 94 Gew.-%, 95 Gew.-%, 96 Gew.-%, 97 Gew.-%, 98 Gew.-%, 99 Gew.-% und 100 Gew.-% ausgewählt sein.

In bestimmten bevorzugten Ausführungsformen weist die isomere Paraffinzusammensetzung mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf, wobei von den Paraffinen 10 bis 95 Gew.-% Isoparaffine sind, und wobei von den Isoparaffinen mindestens 90 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen, und wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine weniger als 0,12 beträgt. Bevorzugter weist die isomere Paraffinzusammensetzung mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf, wobei von den Paraffinen 10 bis 95 Gew.-% Isoparaffine sind, und wobei von den Isoparaffinen mindestens 95 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen, und wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine weniger als 0,10, bevorzugt weniger als 0,05 beträgt. Durch das gleichzeitige Verringern des Verhältnisses der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen und das Erhöhen der Gewichtsprozent-Menge an i-Paraffinen im Bereich der Kohlenstoffzahlen C14 bis C18 in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung ist die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die in dem thermischen Crackschritt gebildet wird, besonders niedrig.

Erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzungen, die mindestens 60 Gew.-% Isoparaffine aufweisen, haben gute Kälteeigenschaften

und können als solche in Beschickungsbehältern von thermischen Crackanlagen, die nicht mit Heizeinrichtungen ausgestattet sind, bei niedrigen Umgebungstemperaturen (0 °C oder weniger) gelagert werden, ohne das Crackverfahren zu stören. Gute Kälteeigenschaften beziehen sich hierin auf einen niedrigen Temperaturwert des Trübungspunktes. Eine Erhöhung der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung verbessert die Mischbarkeit der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung mit fossilem Naphtha, was von Vorteil ist, wenn der Ausgangsstoff für thermisches Cracken weniger als 100 Gew.-% der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und mehr als 0 Gew.-% fossiles Naphtha des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, aufweist. Dementsprechend weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung in bestimmten Ausführungsformen mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf, wobei von den Paraffinen 60 bis 95 Gew.-%, bevorzugt 65 bis 93 Gew.-%, bevorzugter 65 bis 90 Gew.-%, Isoparaffine sind, und wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen weniger als 0,15 beträgt.

Es wurde festgestellt, dass die oben beschriebene unerwünschte Wirkung einer erhöhten Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂ ausgeprägter werden kann, wenn das Gewichtsprozent der Isoparaffine in einer erneuerbaren paraffinischen Ausgangsstoffkomponente hoch ist. Daher ist die vorteilhafte Wirkung einer verringerten Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die während des thermischen Crackens gebildet wird, besonders wichtig, wenn die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung, wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine weniger als 0,15 beträgt, und wobei die Isoparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung bevorzugt mindestens 80 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen, mindestens 60 Gew.-% Isoparaffine des Gesamtgewichts der Paraffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist. Dementsprechend weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung in bestimmten Ausführungsformen mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung

auf, wobei von den Paraffinen 60 bis 95 Gew.-%, bevorzugt 65 bis 93 Gew.-%, bevorzugter 65 bis 90 Gew.-%, Isoparaffine sind, und wobei von den Isoparaffinen mindestens 85 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen, und wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen weniger als 0,12 beträgt. Ferner weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung in bestimmten Ausführungsformen mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf, wobei von den Paraffinen 60 bis 95 Gew.-%, bevorzugt 65 bis 93 Gew.-%, bevorzugter 65 bis 90 Gew.-%, Isoparaffine sind, und wobei von den Isoparaffinen mindestens 90 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen, und wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen weniger als 0,10, bevorzugt weniger als 0,05, beträgt.

In bestimmten Ausführungsformen weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf, wobei von den Paraffinen 60 bis 80 Gew.-%, bevorzugt 65 bis 70 Gew.-%, Isoparaffine sind, und wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung weniger als 0,15 beträgt, und wobei von den Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung bevorzugt mindestens 80 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen. Eine erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung mit einem moderaten Isomerisierungsgrad, beispielsweise einer Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen von 80 Gew.-% oder weniger, oder von 70 Gew.-% oder weniger, fördert in dem thermischen Crackschritt die Bildung von Ethylen, das ein wertvolles thermisches Crackprodukt ist.

Wie bereits erwähnt, kann die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die während des thermischen Crackens gebildet wird, verringert werden, indem das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-

Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung verringert wird. Folglich sind niedrige Gewichtsprozent-Mengen an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung bevorzugt. Bevorzugt weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung Isoparaffine mit mehr als drei Verzweigungen von weniger als 14 Gew.-%, weiter bevorzugt weniger als 12 Gew.-%, noch weiter bevorzugt weniger als 10 Gew.-%, bevorzugter weniger als 8 Gew.-%, noch bevorzugter weniger als 5 Gew.-% und am meisten bevorzugt weniger als 3 Gew.-%, wie 1 Gew.-% oder weniger, oder 0,5 Gew.-% oder weniger, des Gesamtgewichts an Paraffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf. Die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung kann Isoparaffine mit mehr als drei Verzweigungen von 1 bis 14 Gew.-%, bevorzugt 2 bis 12 Gew.-%, weiter bevorzugt 2 bis 10 Gew.-% und weiter bevorzugt 2 bis 5 Gew.-%, des Gesamtgewichts an Paraffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweisen.

Einfach verzweigte Isoparaffine, insbesondere monomethylsubstituierte Isoparaffine, fördern die Bildung von Propylen, einem wertvollen Crackprodukt, in dem thermischen Crackschritt. Daher ist es bevorzugt, dass die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung mindestens 30 Gew.-%, bevorzugt mindestens 35 Gew.-%, weiter bevorzugt mindestens 40 Gew.-%, bevorzugter mindestens 45 Gew.-%, und noch bevorzugter mindestens 50 Gew.-%, einfach verzweigte Isoparaffine des Gesamtgewichts der Paraffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist. Gegebenenfalls beträgt das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an einfach verzweigten Isoparaffinen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung in bestimmten Ausführungsformen mindestens 0,3, bevorzugt mindestens 0,4, weiter bevorzugt mindestens 0,5, bevorzugter mindestens 0,6, noch bevorzugter mindestens 0,7 und am meisten bevorzugt mindestens 0,8. Da die Isoparaffine der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung entweder einfach verzweigte Isoparaffine, zweifach und dreifach verzweigte Isoparaffine, Isoparaffine mit mehr als drei Verzweigungen oder eine Kombination davon sind, sind die restlichen Isoparaffine zweifach und dreifach verzweigte Isoparaffine. Mit anderen Worten, die Isoparaffine in der

erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung, die weder einfach verzweigte Isoparaffine noch Isoparaffine mit mehr als drei Verzweigungen sind, sind zweifach und dreifach verzweigte Isoparaffine.

Die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung hat bevorzugt einen hohen Paraffingehalt. Ein hoher Paraffingehalt fördert eine hohe Ausbeute an C₂- und C₃-Kohlenwasserstoffen, wie Ethen und Propen, die beide wertvolle Crackprodukte sind, in dem thermischen Crackschritt. Daher weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung in bestimmten Ausführungsformen mindestens 70 Gew.-%, bevorzugt mindestens 80 Gew.-%, bevorzugter mindestens 90 Gew.-%, noch bevorzugter mindestens 95 Gew.-%, Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf, wobei von den Paraffinen 10 bis 95 Gew.-% Isoparaffine sind, und wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine weniger als 0,15 beträgt. Die Gewichtsprozent-Menge an Paraffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung kann aus etwa 65 Gew.-%, 70 Gew.-%, 75 Gew.-%, 80 Gew.-%, 85 Gew.-%, 90 Gew.-%, 95 Gew.-% und 99 Gew.-% des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung ausgewählt sein.

In bestimmten bevorzugten Ausführungsformen weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung mindestens 70 Gew.-%, bevorzugt mindestens 80 Gew.-%, bevorzugter mindestens 90 Gew.-%, noch bevorzugter mindestens 95 Gew.-%, Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf, wobei von den Paraffinen 60 bis 95 Gew.-% Isoparaffine sind, und wobei von den Isoparaffinen mindestens 80 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahl C₁₄ bis C₁₈ liegen, und wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine weniger als 0,15 beträgt. Die Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂, die in dem thermischen Crackschritt gebildet wird, ist niedrig, wenn ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken eine solche erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweist oder aus einer solchen besteht. Ferner haben solche erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzungen gute Kälteeigenschaften und eine gute Mischbarkeit in fossilem Naphtha und fördern die Bildung

wertvoller Crackprodukte, wie Propen und Ethen, in dem thermischen Crackschritt.

Wie bereits erwähnt, hat die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung bevorzugt eine hohe Gewichtsprozent-Menge an Paraffinen. Dementsprechend weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung bevorzugt Aromaten (aromatische Kohlenwasserstoffe) von 1,0 Gew.-% oder weniger, bevorzugter 0,5 Gew.-% oder weniger, noch bevorzugter 0,2 Gew.-% oder weniger, und Olefine (Alkene) von weniger als 2,0, bevorzugt 1,0 Gew.-% oder weniger, bevorzugter 0,5 Gew.-% oder weniger, und Naphthene (Cycloalkane) von nicht mehr als 5,0 Gew.-%, bevorzugt 2,0 Gew.-% oder weniger, auf. Eine niedrige Gewichtsprozent-Menge an Aromaten, Olefinen und Naphthenen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung fördert die Bildung von hochwertigen Chemikalien (HVC) in dem thermischen Crackschritt. Im hierin verwendeten Sinne beziehen sich hochwertige Chemikalien auf Ethen, Propen, 1,3-Butadien, Benzol, Toluol und Xylole. Benzol, Toluol und Xylole können als BTX bezeichnet werden. In jedem Fall weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung bevorzugt höchstens 50 Gew.-ppm Sauerstoff auf. Ein niedriger Sauerstoffgehalt ermöglicht es, das thermische Cracken auf eine kontrolliertere Weise auszuführen, was die Bildung von HVC begünstigt. Bei den Paraffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung handelt es sich um n-Paraffine und i-Paraffine. Die linearen n-Paraffine neigen dazu, zu Ethenmolekülen zu cracken. Daher ist es bevorzugt, dass die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung mindestens 5 Gew.-%, wie 5 bis 90 Gew.-%, n-Paraffine des Gesamtgewichts der Paraffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist. In bestimmten Ausführungsformen weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung 5 bis 40 Gew.-%, bevorzugt 8 bis 35 Gew.-%, weiter bevorzugt 10 bis 35 Gew.-%, bevorzugter 20 bis 35 Gew.-%, und noch bevorzugter 30 bis 35 Gew.-%, n-Paraffine des Gesamtgewichts der Paraffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung, auf.

Im Allgemeinen kann jede erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung, wie vorstehend definiert, in jedem Aspekt oder jeder Ausführungsform der vorliegenden Erfindung verwendet werden. Dennoch werden im Folgenden bestimmte besonders bevorzugte

erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzungen erwähnt. In bestimmten, besonders bevorzugten Ausführungsformen weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung mindestens 80 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf, wobei von den Paraffinen 60 bis 93 Gew.-% Isoparaffine sind, und wobei von den Isoparaffinen mindestens 90 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahlen C14 bis C18 liegen, und wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine weniger als 0,12 beträgt. Ferner weist die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung in bestimmten, besonders bevorzugten Ausführungsformen Paraffine von 90 Gew.-% des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf, wobei die Paraffine 60 bis 90 Gew.-%, bevorzugt 65 bis 70 Gew.-%, Isoparaffine sind, und wobei von den Isoparaffinen mindestens 95 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahlen C14 bis C18 liegen, und wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen weniger als 0,10, vorzugsweise weniger als 0,5 beträgt. Es wurde festgestellt, dass diese erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzungen eine besonders niedrige Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂ erzeugen, während die Bildung von HVC in dem thermischen Crackschritt gefördert wird, wenn sie als ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken oder eine Ausgangsstoffkomponente für thermisches Cracken in einem Gemisch mit fossilem Naphtha bereitgestellt werden. Ferner haben diese erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzungen günstige Kälteeigenschaften und vermischen sich gut mit (haben eine gute Mischbarkeit in) fossilem Naphtha.

Das Bereitstellen des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken kann das Bereitstellen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und das Bereitstellen von fossilem Naphtha und das Kombinieren der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung mit dem fossilen Naphtha aufweisen, um den Ausgangsstoff für thermisches Cracken zu bilden. Die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung wird vorzugsweise bereitgestellt, indem ein von erneuerbaren Quellen stammender Ausgangsstoff (erneuerbarer Ausgangsstoff), wobei der Ausgangsstoff Fettsäuren,

Fettsäurederivate, Mono-, Di- oder Triglyceride oder eine Kombination davon aufweist, einer Hydrobehandlung unterzogen wird, um n-Paraffine zu bilden, und mindestens ein Teil der bei der Hydrobehandlung gebildeten n-Paraffine einer Isomerisierungsbehandlung unterzogen wird, um i-Paraffine zu bilden.

Bevorzugt weist der erneuerbare Ausgangsstoff, d. h. der aus erneuerbaren Quellen stammende Ausgangsstoff mindestens eines von pflanzlichem Öl, pflanzlichem Fett, tierischem Öl oder tierischem Fett auf. Diese Stoffe sind bevorzugt, da sie die Bereitstellung eines erneuerbaren Ausgangsstoffs mit einer berechenbaren Zusammensetzung ermöglichen, die bei Bedarf durch eine geeignete Auswahl und/oder Mischung des/der natürlichen Öls/Öle und/oder Fetts/Fette angepasst werden kann. Der erneuerbare Rohstoff kann Pflanzenöl, Holzöl, anderes Öl auf pflanzlicher Basis, tierisches Öl, tierisches Fett, Fischfett, Fischöl, Algenöl, mikrobielles Öl oder eine Kombination davon aufweisen. Gegebenenfalls kann der erneuerbare Ausgangsstoff recycelbaren Abfall und/oder recycelbaren Rückstand aufweisen. Recycelbare Abfälle weisen Stoffe, wie gebrauchtes Speiseöl, freie Fettsäuren, Palmöl-Nebenprodukte oder Prozessseitenströme, Schlamm, Seitenströme aus der Pflanzenölverarbeitung oder eine Kombination davon, auf. Die Gesamtnachhaltigkeit des erneuerbaren Ausgangsstoffs und folglich auch der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des gebildeten Crackprodukts kann erhöht werden, indem ein erneuerbarer Ausgangsstoff bereitgestellt wird, der recycelbare Abfälle oder recycelbare Rückstände oder beides entweder als solche oder in Kombination mit frischem Einsatz aus erneuerbaren Ölen und/oder erneuerbaren Fetten, wie Pflanzenöl, Pflanzenfett, Tieröl und/oder Tierfett aufweist. Frischer Einsatz bezieht sich hierin auf Komponenten, die noch nicht recycelt wurden. Der erneuerbare Ausgangsstoff kann einer optionalen Vorbehandlung unterzogen werden, bevor er einer Hydrobehandlung und Isomerisierung unterzogen wird, um eine erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung zu erhalten. Eine solche Vorbehandlung kann eine Reinigung und/oder chemische Modifizierung des erneuerbaren Ausgangsstoffs, wie Verseifung oder Umesterung, aufweisen. Handelt es sich bei dem erneuerbaren Ausgangsstoff um einen festen Stoff (bei Umgebungsbedingungen), ist es nützlich,

den Stoff chemisch zu modifizieren, um einen flüssigen erneuerbaren Ausgangsstoff zu erlangen, was bevorzugt ist.

Die Hydrobehandlung dient üblicherweise als Behandlung zur Sauerstoff-, Stickstoff- und Schwefelentfernung der Fettsäuren, Fettsäurederivate und/oder der Glyceride, welche der erneuerbare Ausgangsstoff aufweist. Ferner kann das Bereitstellen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung das Unterziehen des erneuerbaren Ausgangsstoffs Decarboxylierungs- und Decarbonylierungsreaktionen (d. h. Entfernen von Sauerstoff in Form von CO_x), und/oder anderen katalytischen Verfahren aufweisen, um: Sauerstoff aus organischen Sauerstoffverbindungen in Form von Wasser zu entfernen, Schwefel aus organischen Schwefelverbindungen in Form von Schwefelwasserstoff (H_2S) zu entfernen, Stickstoff aus organischen Stickstoffverbindungen in Form von Ammoniak (NH_3) zu entfernen und Halogene aus organischen Halogenverbindungen, beispielsweise Chlor in Form von Chlorwasserstoffsäure (HCl), zu entfernen. Solche Verfahren können beispielsweise die Hydrodechlorierung zur Entfernung von Chlor und die Hydrodenitrogenierung (HDN) zur Entfernung von Stickstoff sein.

Bevorzugt handelt es sich bei der Hydrobehandlung um Hydrodesoxygenierung (HDO) oder katalytische Hydrodesoxygenierung (katalytische HDO). Die Hydrobehandlung wird bevorzugt bei einem Druck, ausgewählt aus dem Bereich von 2 bis 15 MPa, bevorzugt 3 bis 10 MPa, und bei einer Temperatur, ausgewählt aus dem Bereich von 200 bis 500 °C, bevorzugt 280 bis 400 °C, durchgeführt. Die Hydrobehandlung kann in Gegenwart eines bekannten Hydrobehandlungskatalysators durchgeführt werden, der Metalle der Gruppe VIII und/oder VIB des Periodensystems enthält. Bevorzugt handelt es sich bei den Hydrobehandlungskatalysatoren um geträgerte Pd-, Pt-, Ni-, NiW-, NiMo- oder CoMo-Katalysatoren, wobei die Trägersubstanz Aluminiumoxid und/oder Siliziumdioxid ist. Üblicherweise werden NiMo-/Al₂O₃- und/oder CoMo-/Al₂O₃-Katalysatoren verwendet.

Die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung der vorliegenden Erfindung kann bereitgestellt sein, indem mindestens ein Teil der n-Paraffine, die in dem Wasserstoffbehandlungsschritt gebildet werden, einer Isomerisierungsbehandlung unterzogen wird, um i-Paraffine zu bilden und die erneuerbare isomere

Paraffinzusammensetzung herzustellen. Die Isomerisierungsbehandlung ist nicht besonders eingeschränkt. Dennoch sind katalytische Isomerisierungsbehandlungen bevorzugt. Üblicherweise bildet das Unterziehen von n-Paraffinen, die in dem Hydrobehandlungsschritt aus dem erneuerbaren Ausgangsstoff gebildet werden, einer Isomerisierungsbehandlung überwiegend methylsubstituierte Isoparaffine. Die Spaltschärfe der Isomerisierungsbedingungen und die Wahl des Katalysators steuern die Menge der gebildeten Methylverzweigungen und deren Abstand voneinander in dem Kohlenstoffgerüst. Der Isomerisierungsschritt kann weitere Zwischenschritte, wie einen Reinigungsschritt und einen Fraktionierungsschritt, aufweisen. Reinigungs- und/oder Fraktionierungsschritte ermöglichen eine bessere Steuerung der Eigenschaften der gebildeten erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung.

Die Isomerisierungsbehandlung wird bevorzugt bei einer Temperatur, ausgewählt aus dem Bereich von 200 bis 500 °C, bevorzugt 280 bis 400 °C, und bei einem Druck, ausgewählt aus dem Bereich von 2 bis 15 MPa, bevorzugt 3 bis 10 MPa, durchgeführt. Die Isomerisierungsbehandlung kann in Gegenwart von bekannten Isomerisierungskatalysatoren durchgeführt werden, beispielsweise Katalysatoren, die ein Molekularsieb und/oder ein Metall, ausgewählt aus der Gruppe VIII des Periodensystems, und einen Träger enthalten. Vorzugsweise handelt es sich bei dem Isomerisierungskatalysator um einen Katalysator, der SAPO-11 oder SAPO-41 oder ZSM-22 oder ZSM-23 oder Ferrierit und Pt, Pd oder Ni und Al₂O₃ oder SiO₂ enthält. Typische Isomerisierungskatalysatoren sind beispielsweise Pt/SAPO-11/Al₂O₃, Pt/ZSM-22/Al₂O₃, Pt/ZSM-23/Al₂O₃ und/oder Pt/SAPO-11/SiO₂. Die Katalysatordesaktivierung kann durch Anwesenheit von molekularem Wasserstoff bei der Isomerisierungsbehandlung reduziert werden. Daher ist die Anwesenheit von zugegebenem Wasserstoff bei der Isomerisierungsbehandlung bevorzugt. In bestimmten Ausführungsformen stehen der/die Wasserstoffbehandlungskatalysator(en) und der/die Isomerisierungskatalysator(en) nicht gleichzeitig mit dem Reaktionseinsatzstoff (dem erneuerbaren Ausgangsstoff und/oder davon stammenden n-Paraffine und/oder i-Paraffine) in Kontakt. In bestimmten Ausführungsformen werden die Hydrobehandlung und die

Isomerisierungsbehandlung in getrennten Reaktoren vollzogen oder getrennt ausgeführt.

In bestimmten Ausführungsformen wird nur ein Teil der in dem Hydrobehandlungsschritt gebildeten n-Paraffine einer Isomerisierungsbehandlung unterzogen. Ein Teil der n-Paraffine, die bei dem Hydrobehandlungsschritt gebildet werden, kann abgetrennt werden, wobei die abgetrennten n-Paraffine dann der Isomerisierungsbehandlung unterzogen werden, um i-Paraffine zu bilden. Nach der Isomerisierungsbehandlung werden die abgetrennten Paraffine gegebenenfalls mit den restlichen Paraffinen wieder vereint. Alternativ können alle in dem Hydrobehandlungsschritt gebildeten n-Paraffine der Isomerisierungsbehandlung unterzogen werden, um i-Paraffine zu bilden.

Übrigens ist die Isomerisierungsbehandlung ein Schritt, der überwiegend der Isomerisierung der Paraffine der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung dient. Während die meisten thermischen oder katalytischen Umwandlungen (wie Hydrobehandlung und HDO) zu einem niedrigen Isomerisierungsgrad (für gewöhnlich weniger als 5 Gew.-%) führen, ist der Isomerisierungsschritt, der in der vorliegenden Erfindung angewendet werden kann, der Schritt, der zu einer deutlichen Erhöhung des Isoparaffingehalts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung führt. Üblicherweise ändert sich die Kohlenstoffzahlverteilung während der Isomerisierungsbehandlung nicht wesentlich. Dementsprechend erhöht sich die Gewichtsprozent-Menge an Paraffinen im Bereich der Kohlenstoffzahlen C3 bis C14 im Verlauf der Isomerisierungsbehandlung nicht wesentlich. Dies ist günstig, da festgestellt wurde, dass Isoparaffine mit einer Kohlenstoffzahl kleiner als C14 die Bildung von CO, CO₂ und C₂H₂ in dem thermischen Crackschritt erhöhen.

Das Bereitstellen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung weist bevorzugt keine Vergasung erneuerbaren Ausgangsstoffs auf. Paraffinzusammensetzungen, die durch Gas-to-liquid(GtL)-Verfahren hergestellt werden, wie Verfahren, die einen Fischer-Tropsch-Verfahrensschritt aufweisen, sind durch eine breite Verteilung paraffinischer Kohlenwasserstoffe im Bereich der Kohlenstoffzahlen C9 bis C50, insbesondere C9 bis C24, gekennzeichnet.

Wasser und leichte Gase, wie Kohlenmonoxid, Kohlendioxid, Wasserstoff, Methan, Ethan und Propan, können aus dem hydrobehandelten und/oder isomerisierten erneuerbaren Ausgangsstoff mit beliebigen herkömmlichen Mitteln, wie Destillation, abgetrennt werden, bevor die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung als Ausgangsstoff für thermisches Cracken oder Ausgangsstoffkomponente für thermisches Cracken bereitgestellt wird. Nach oder zusammen mit dem Entfernen von Wasser und leichten Gasen kann der hydrobehandelte und/oder isomerisierte erneuerbare Ausgangsstoff in eine oder mehrere Fraktionen fraktioniert werden. Die Fraktionierung kann mit allen herkömmlichen Mitteln, wie Destillation, vollzogen werden. Ferner kann der hydrobehandelte und/oder isomerisierte erneuerbare Ausgangsstoff gegebenenfalls gereinigt werden. Die Reinigung und/oder Fraktionierung ermöglicht eine bessere Steuerung der Eigenschaften der gebildeten isomeren Paraffinzusammensetzung und somit der Eigenschaften des Crackprodukts des thermischen Crackschrittes. Jedoch kann eine erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung, die durch Hydrobehandlung und Isomerisierung von erneuerbarem Ausgangsstoff, wie oben beschrieben, erhalten wird, direkt einer thermischen Crackanlage oder einem thermischen Crackverfahren zugeführt werden.

Der Isoparaffingehalt und die Arten von Isoparaffinen (Verzweigung der Isoparaffine) in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung werden hauptsächlich durch die Isomerisierungsbehandlung gesteuert; z. B. den Katalysator (oder Fehlen davon), die Temperatur, den Druck, die Verweilzeit und die Menge an zugegebenem Wasserstoff in dem Isomerisierungsverfahren. In bestimmten Ausführungsformen weist das Bereitstellen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung das Analysieren der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung, die aus der Isomerisierungsbehandlung erhalten wurde, und auf Grundlage der Analyseergebnisse das Auswählen einer erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung, welche die zuvor beschriebenen Anforderungen erfüllt, und das Bereitstellen der ausgewählten erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung als einen Ausgangsstoff für thermisches Cracken oder als eine Ausgangsstoffkomponente für thermisches Cracken auf. Durch das Auswählen einer erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung,

welche die zuvor beschriebenen Kriterien erfüllt, kann die Gesamtmenge an unerwünschten Nebenprodukten, nämlich CO, CO₂ und C₂H₂, die während des thermischen Crackens gebildet werden, reduziert werden. Vorzugsweise weist das Analysieren der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung das Bestimmen des Gewichtsprozents der Paraffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung, das Bestimmen des Gewichtsprozents der Isoparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung, das Bestimmen des Verhältnisses der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und bevorzugt das Bestimmen der Kohlenstoffzahlverteilung der Isoparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf. Das Analysieren der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung kann ferner das Bestimmen des Gewichtsprozents der n-Paraffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und/oder das Bestimmen der Gewichtsprozentsätze von einfach verzweigten Isoparaffinen, zweifach und dreifach verzweigten Isoparaffinen bzw. Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen aufweisen. Die Gewichtsprozente von Paraffinen, Isoparaffinen, n-Paraffinen sowie von einfach verzweigten Isoparaffinen, zweifach und dreifach verzweigten Isoparaffinen und Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen können mit jedem geeigneten Verfahren, beispielsweise mittels GC-FID-Analyse, wie dem in den Beispielen beschriebenen Analyseverfahren, bestimmt werden.

Der Ausgangsstoff für thermisches Cracken der vorliegenden Erfindung weist auf Grundlage des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken 1 bis 100 Gew.-% der vorstehend beschriebenen erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und 0 bis 99 Gew.-% fossiles Naphtha auf, wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas mindestens 90 Gew.-% des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken beträgt. Mit anderen Worten, die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung kann als der Ausgangsstoff für thermisches Cracken oder als eine Ausgangsstoffkomponente für thermisches Cracken in Kombination mit fossilem Naphtha bereitgestellt werden, um den Ausgangsstoff für thermisches

Cracken zu bilden. Bevorzugt beträgt die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und die Gewichtsprozent-Menge an fossilem Naphtha mindestens 95 Gew.-%, und bevorzugter mindestens 99 Gew.-%, des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken.

Im hier verwendeten Sinne bezieht sich fossiles Naphtha auf eine Zusammensetzung, die natürlich vorkommt und aus nicht erneuerbaren Quellen stammt. Solche nicht erneuerbaren Quellen können auch als „fossile Quellen“ oder „mineralische Quellen“ bezeichnet werden. Beispiele für nicht erneuerbare Quellen, von denen das fossile Naphtha stammen kann, schließen Rohöl, Mineralöl/Gas, Schieferöl/-gas, Erdgas oder Kohlevorkommen und dergleichen und Kombinationen davon ein, einschließlich jeglicher kohlenwasserstoffreicher Vorkommen, die aus oberflächigen/unterirdischen Quellen genutzt werden können. Solche Quellen können auch als „fossiles Öl“ bezeichnet werden. Fossiles Naphtha weist hauptsächlich Kohlenwasserstoffe auf. In bestimmten Ausführungsformen weist das fossile Naphtha Kohlenwasserstoffe von mindestens 95 Gew.-%, bevorzugt mindestens 99 Gew.-%, des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas auf. In bestimmten Ausführungsformen weist das fossile Naphtha 20 bis 85 Gew.-% Paraffine, 0 bis 30 Gew.-%, bevorzugt 0 bis 5 Gew.-%, Olefine (Alkene), 5 bis 30 Gew.-% Naphthene (Cycloalkane), und 0 bis 30 Gew.-% Aromaten (aromatische Kohlenwasserstoffe) des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas auf.

Das fossile Naphtha kann aus verschiedenen Klassen von fossilem Naphtha ausgewählt sein, wie schwerem Naphtha, leichtem Naphtha oder Kombinationen davon. Bevorzugt liegt der Siedepunktbereich (Anfangssiedepunkt bis Endpunkt) des fossilen Naphthas im Temperaturbereich von 25 °C bis 360 °C. In bestimmten Ausführungsformen liegt der Siedepunktbereich des fossilen Naphthas im Bereich von 25 °C bis 220 °C. Ferner liegt der Siedepunktbereich des fossilen Naphthas in bestimmten Ausführungsformen im Bereich von 30 °C bis 90 °C, bevorzugt von 35 °C bis 85 °C. Noch Ferner liegt der Siedepunktbereich des fossilen Naphthas in bestimmten Ausführungsformen im Bereich von 50 °C bis 200 °C, bevorzugt von 50 °C bis 187 °C. In noch bestimmteren Ausführungsformen liegt der Siedepunktbereich des fossilen Naphthas im Bereich von 180 °C bis 360 °C. Die Siedebereiche sind gemessen nach EN-ISO-3405 (2011) angegeben.

In bestimmten Ausführungsformen weist der Ausgangsstoff für thermisches Cracken auf Grundlage des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung 50 bis 100 Gew.-% der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und 0 bis 50 Gew.-% fossiles Naphtha auf. In bestimmten bevorzugten Ausführungsformen weist der Ausgangsstoff für thermisches Cracken auf Grundlage des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken 50 bis 85 Gew.-% der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und 15 bis 50 Gew.-% fossiles Naphtha, bevorzugt 60 bis 85 Gew.-% der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und 15 bis 40 Gew.-% fossiles Naphtha, bevorzugter 70 bis 85 Gew.-% der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und 15 bis 30 Gew.-% fossiles Naphtha auf. Bevorzugt ist ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken, der mindestens 50 Gew.-% der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung oder hauptsächlich die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweist. Die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung fördert die Bildung von HVC in dem thermischen Crackschritt, verglichen mit fossilem Naphtha, und erhöht die Nachhaltigkeit des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken und folglich die Nachhaltigkeit des gebildeten Crackprodukts. In bestimmten Ausführungsformen weist der Ausgangsstoff für thermisches Cracken die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und fossiles Naphtha in einem Gewichtsverhältnis von 5:1 (erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung zu fossilem Naphtha) auf.

Bei dem thermischen Cracken der vorliegenden Erfindung handelt es sich bevorzugt um Dampfcracken. Dampfcrackanlagen werden in der petrochemischen Industrie und insbesondere als Rohstoffquelle für die Polymerindustrie häufig genutzt. Die Verarbeitungsbedingungen des Dampfcrackens sind hinlänglich bekannt, sodass die Umsetzung der vorliegenden Erfindung nur wenige Modifikationen gängiger Verfahren erfordert. Das thermische Cracken des oben beschriebenen Ausgangsstoffs für thermisches Cracken wird bevorzugt in einer herkömmlichen Naphtha-(Dampf)crackanlage, d. h. einer üblicherweise für das thermische Cracken von fossilem Naphtha verwendeten Crackanlage, durchgeführt. Bevorzugt wird das thermische Cracken ohne Katalysator ausgeführt. Es können aber auch Zusatzstoffe, insbesondere Schwefel-Zusatzstoffe, in dem

thermischen Crackschritt genutzt werden. Das Verfahren der vorliegenden Erfindung kann das Bereitstellen eines Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, aufweisend Schwefel, um die Koksbildung zu reduzieren und die Bildung von CO und CO₂ in dem thermischen Crackschritt weiter zu reduzieren, aufweisen. Die Bildung von C₂H₂ in dem thermischen Crackschritt wird durch den Schwefelgehalt des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken nicht wesentlich beeinflusst. Ohne an eine Theorie gebunden zu sein, wird angenommen, dass Schwefel aktive Stellen auf der Oberfläche der Spaltschlange, insbesondere Ni-Stellen des Spaltchlangenstoffs, durch Bildung von Nickelsulfiden passiviert. Nickelsulfide katalysieren im Gegensatz zu metallischen Ni und Ni-Oxiden keine Koksvergasung.

Um die Bildung von CO und CO₂ in dem thermischen Crackschritt weiter zu reduzieren, kann der Ausgangsstoff für thermisches Cracken Schwefel aufweisen. Erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzungen, die durch Hydrobehandlung und Isomerisierung von erneuerbarem Ausgangsstoff bereitgestellt werden, insbesondere von pflanzlichen Ölen/Fetten und/oder tierischen Ölen/Fetten, sind chemisch Gemische von hauptsächlich paraffinischen Kohlenwasserstoffen, die eine sehr niedrige Menge an Schwefel aufweisen. Ohne den Zusatz von Schwefel kann die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung weniger als 5 Gew.-ppm Schwefel aufweisen. Schwefel kann dem Ausgangsstoff für thermisches Cracken zugesetzt werden, indem dem Ausgangsstoff für thermisches Cracken eine schwefelhaltige Verbindung (Schwefel-Zusatz) zugesetzt wird oder indem ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken bereitgestellt wird, welcher die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und eine ausreichende Menge an fossilem Naphtha, das üblicherweise Schwefel aufweist oder beides aufweist. Dementsprechend weist der Ausgangsstoff für thermisches Cracken in bestimmten Ausführungsformen 20 bis 300 Gew.-ppm, bevorzugt 20 bis 250 Gew.-ppm, bevorzugter 20 bis 100 Gew.-ppm, und noch bevorzugter 20 bis 65 Gew.-ppm, Schwefel auf. Da die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung der vorliegenden Erfindung bereits die während des thermischen Crackens gebildete Gesamtmenge an unerwünschten Nebenprodukten (CO, CO₂, und C₂H₂) reduziert, ist es nicht erforderlich, dass der Ausgangsstoff für thermisches Cracken große Mengen an Schwefel enthält. Eine

niedrige Schwefelkonzentration des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken hat den Vorteil, dass das Crackprodukt, insbesondere seine schwereren Kohlenwasserstofffraktionen, auch einen niedrigen Schwefelgehalt hat. Üblicherweise werden die schwereren Kohlenwasserstofffraktionen des Crackprodukts (C4 und höher) nach ihrer Abtrennung von dem Crackprodukt keiner umfangreichen Reinigung unterzogen, und deshalb verbleibt Schwefel aus dem thermischen Crackschritt im Wesentlichen in diesen Fraktionen. Die Pyrolysebenzin(PyGas)fraktion, die üblicherweise hauptsächlich C4 bis C11-Kohlenwasserstoffe, insbesondere C5 bis C9-Kohlenwasserstoffe, von denen Benzol entfernt wurde, aufweist, wird üblicherweise in ein sogenanntes Lagerbecken umgeleitet, d. h. als Kraftstoffkomponente verwendet. Kraftstoffe und Kraftstoffkomponenten mit niedrigem oder extrem niedrigem Schwefelgehalt sind bevorzugt, da Kraftstoffe mit einem niedrigen Schwefelgehalt oder schwefelfreie Kraftstoffe bei der Verbrennung weniger schädliche Emissionen produzieren als Kraftstoffe oder Kraftstoffkomponenten mit einem höherem Schwefelgehalt. Ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken, der mindestens 50 bis 65 Gew.-ppm Schwefel aufweist, ist besonders bevorzugt, da ein Schwefelgehalt von 50 bis 65 Gew.-ppm die Bildung von CO und CO₂ in dem thermischen Crackschritt weiter reduziert und eine Pyrolysebenzinfraktion mit einem niedrigen Schwefelgehalt (ohne Reinigungsschritte nach der Fraktionierung) bildet.

Beispiele für geeignete Schwefel-Zusatzstoffe sind Dimethyldisulfid (DMDS), Schwefelwasserstoff (H₂S) und Schwefelkohlenstoff (CS₂). DMDS ist ein besonders bevorzugter Schwefel-Zusatzstoff, da DMDS die Verkokung reduziert. In bestimmten Ausführungsformen weist das Bereitstellen des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken das Mischen von Schwefel-Zusatzstoffen, bevorzugt DMDS, mit dem Ausgangsstoff für thermisches Cracken auf, um einen Ausgangsstoff für thermisches Cracken zu bilden, der 20 bis 300 Gew.-ppm, bevorzugt 20 bis 250 Gew.-ppm, bevorzugt 20 bis 100 Gew.-ppm, noch bevorzugt 20 bis 65 Gew.-ppm, Schwefel aufweist. In bestimmten bevorzugten Ausführungsformen weist das Bereitstellen des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken das Mischen von Schwefel-Zusatzstoffen, bevorzugt DMDS, mit dem Ausgangsstoff für thermisches Cracken auf, um einen Ausgangsstoff für thermisches Cracken zu bilden, der 50

bis 65 Gew.-ppm Schwefel aufweist. Schwefel-Zusatzstoffe können mit dem Ausgangsstoff für thermisches Cracken vermischt werden, bevor der Ausgangsstoff für thermisches Cracken dem thermischen Crackschritt zugeführt wird. Gegebenenfalls können Schwefel-Zusatzstoffe in dem thermischen Crackschritt zugesetzt werden, indem Dampf, der Schwefel-Zusätze aufweist, in einen thermischen Crackofen eingeblasen wird. Dementsprechend weist das Verfahren in bestimmten Ausführungsformen das Einblasen von Dampf, der Schwefel-Zusatzstoffe, bevorzugt DMDS, aufweist, in einen thermischen Crackofen auf, sodass der Ausgangsstoff für thermisches Cracken in dem thermischen Crackofen 20 bis 300 Gew.-ppm, bevorzugt 20 bis 250 Gew.-ppm, bevorzugter 20 bis 100 Gew.-ppm, noch bevorzugter 20 bis 65 Gew.-ppm, Schwefel aufweist. In bestimmten bevorzugten Ausführungsformen weist das Verfahren das Einblasen von Dampf, der Schwefel-Zusatzstoffe, bevorzugt DMDS, aufweist, in einen thermischen Crackofen auf, sodass der Ausgangsstoff für thermisches Cracken in dem Ofen 50 bis 65 Gew.-ppm Schwefel aufweist.

In bestimmten Ausführungsformen, weist das Bereitstellen des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken das Kombinieren von fossilem Naphtha mit der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf, um einen Ausgangsstoff für thermisches Cracken zu bilden, der 20 bis 300 Gew.-ppm, bevorzugt 20 bis 250 Gew.-ppm, bevorzugter 20 bis 100 Gew.-ppm, noch bevorzugter 20 bis 65 Gew.-ppm, Schwefel aufweist. In bestimmten bevorzugten Ausführungsformen weist das Bereitstellen des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken das Kombinieren von fossilem Naphtha mit der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auf, um einen Ausgangsstoff für thermisches Cracken zu bilden, der 50 bis 65 Gew.-ppm Schwefel aufweist. Die Schwefelkonzentration von fossilem Naphtha kann je nach Quelle des fossilen Naphthas und Raffinationsschritten, denen es unterzogen wurde, variieren. Das Bereitstellen eines Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, der eine vorbestimmte Menge an Schwefel aufweist, kann das Auswählen von fossilem Naphtha mit einem geeigneten Schwefelgehalt, Anpassen des Gewichtsprozents des fossilen Naphthas in dem Ausgangsstoff für thermisches Cracken oder beides aufweisen. Somit kann ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken, der eine vorbestimmte Menge an Schwefel

aufweist, ohne Zusatz von Schwefel-Zusatzstoff bereitgestellt werden. Dennoch kann Schwefel-Zusatzstoff gegebenenfalls einem Ausgangsstoff für thermisches Cracken, der fossiles Naphtha und die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweist, zugesetzt werden.

Durch das Bereitstellen des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken der vorliegenden Erfindung als Ausgangsstoff für thermisches Cracken kann eine günstige, niedrige Menge an Verunreinigungen (CO , CO_2 und C_2H_2) erhalten werden, wenn der thermische Crackschritt bei einer Spaltschlangen-Austrittstemperatur (COT), die aus einem breiten Temperaturbereich ausgewählt ist, durchgeführt wird. Die COT ist für gewöhnlich die höchste Temperatur für den Ausgangsstoff für thermisches Cracken in der thermischen Crackanlage. Der thermische Crackschritt wird vorzugsweise bei einer COT, ausgewählt aus dem Bereich von 780 bis 890 °C, bevorzugt aus dem Bereich von 800 bis 860 °C, durchgeführt. Die Gesamtmenge an unerwünschten Nebenprodukten (CO , CO_2 und C_2H_2), die in dem thermischen Crackschritt gebildet werden, ist besonders niedrig, wenn die COT aus dem Bereich von 800 °C bis 840 °C ausgewählt ist. Die COT kann zum Beispiel aus etwa 805 °C, 810 °C, 815 °C, 820 °C, 825 °C, 830 °C und 835 °C ausgewählt sein. Eine besonders niedrige Gesamtmenge an unerwünschten Nebenprodukten (CO , CO_2 und C_2H_2) wird gebildet, wenn das thermische Cracken bei einer COT von etwa 800 °C vollzogen wird. Ausgangsstoffe für thermisches Cracken, die sowohl die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung als auch fossiles Naphtha aufweisen, bilden besonders niedrige Mengen an CO , CO_2 und C_2H_2 , wenn die COT aus dem Bereich von 800 °C bis 820 °C ausgewählt ist.

In bestimmten Ausführungsformen, in denen es sich bei dem thermischen Cracken um Dampfcracken handelt, wird das Dampfcracken bei einem Strömungsgeschwindigkeitsverhältnis zwischen Wasser und dem Ausgangsstoff für thermisches Cracken (H_2O -Strömungsgeschwindigkeit [kg/h]/Strömungsgeschwindigkeit des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken [kg/h]) von 0,05 bis 1,20, bevorzugt 0,10 bis 1,00, weiter bevorzugt 0,20 bis 0,80, bevorzugter 0,25 bis 0,70, noch bevorzugter 0,25 bis 0,60, und am meisten bevorzugt 0,30 bis 0,50, durchgeführt. In bestimmten bevorzugten Ausführungsformen, in denen es sich bei dem thermischen Cracken um Dampfcracken handelt, wird das Dampfcracken

bei einem Strömungsgeschwindigkeitsverhältnis zwischen Wasser und dem Ausgangsstoff für thermisches Cracken (H_2O -Strömungsgeschwindigkeit [kg/h]/Strömungsgeschwindigkeit des Ausgangsstoff für thermisches Cracken [kg/h]) von 0,30 bis 0,50 und bei einer COT, die aus dem Bereich von 800 °C bis 840 °C ausgewählt ist, durchgeführt. Das Durchführen des Dampfcrackens unter diesen Bedingungen führt zu einer niedrigen Gesamtmenge an CO , CO_2 und C_2H_2 .

Der Spaltschlangen-Austrittsdruck in dem thermischen Crackschritt kann aus dem Bereich von 0,09 bis 0,3 MPa, bevorzugt mindestens 0,1 MPa, bevorzugter mindestens 0,11 MPa oder 0,12 MPa, und bevorzugt höchstens 0,25 MPa, bevorzugter höchstens 0,22 MPa oder 0,20 MPa, ausgewählt sein.

Das thermische Crackverfahren kann das Zurückführen nicht umgewandelter Reaktionspartner in den thermischen Crackofen aufweisen. Gegebenenfalls können bestimmte, weniger wertvolle Anteile des Crackprodukts, wie Propan und Ethan, zurück in den thermischen Crackofen zurückgeführt werden, um zu wertvolleren Produkten, wie Ethen und Propen, umgewandelt zu werden. Das Zurückführen nicht umgewandelter Reaktionspartner, weniger wertvoller Anteile des Crackprodukts oder beider erhöht die Gesamterntabilität und die Gesamtausbeute des thermischen Crackverfahrens und/oder die Gesamtausbeute an HVC.

Das thermische Cracken kann in mehreren thermischen Cracköfen durchgeführt werden. Der Ausgangsstoff für thermisches Cracken der vorliegenden Erfindung, welcher die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweist oder aus dieser besteht, kann einem oder mehr der mehreren thermischen Cracköfen zugeführt werden. Zum Beispiel kann die Verfügbarkeit der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung bestimmen, wie viele der mehreren thermischen Cracköfen mit dem Ausgangsstoff für thermisches Cracken der vorliegenden Erfindung beschickt werden können. Die Austrittsströme oder Crackprodukte der mehreren Dampfcrackanlagen können kombiniert werden, um einen oder mehrere Austrittsströme zu bilden, die gegebenenfalls zu weiteren Verarbeitungsschritten, wie Reinigung und/oder Polymerisierung, transportiert oder befördert werden. Gegebenenfalls kann das thermische Cracken in einem einzelnen thermischen Crackofen durchgeführt werden, der mit dem

Ausgangsstoff für thermisches Cracken gemäß der vorliegenden Erfindung beschickt wird, und der Austrittsstrom, oder das Crackprodukt, aus dem einzelnen thermischen Crackofen kann gegebenenfalls zu weiteren Verarbeitungsschritten, wie Reinigung und/oder Polymerisierung, transportiert oder befördert werden.

Das Dampfkrackverfahren kann das Quenchen und Kühlen des Crackprodukts aufweisen. Üblicherweise wird mindestens ein Teil von CO, CO₂, C₂H₂ oder einer Kombination davon während des Quenchens und Kühlens aus dem Crackprodukt entfernt. In bestimmten Ausführungsformen weist das Verfahren das Fraktionieren des Crackprodukts, das ein Gemisch aus Kohlenwasserstoffen aufweist, auf. Die Fraktionierung kann das Trennen einer Heizölfraction, einer Pyrolysebenzinfraction, einer Wasserstofffraction, einer Methanfraction, einer Heizgasfraction, einer C₂-Fraction (Ethylenfraction), C₃-Fraction (Propylenfraction) und/oder einer C₄-Fraction von dem Crackprodukt aufweisen. Die C₂-Fraction (Ethylenfraction) und die C₃-Fraction (Propylenfraction) eignen sich besonders zur Herstellung von Polymeren. Somit weist das Verfahren in bestimmten Ausführungsformen das Abtrennen einer Ethylenfraction, einer Propylenfraction oder beider von dem Crackprodukt und das Unterziehen der Ethylenfraction, der Propylenfraction oder beider einer Polymerisationsbehandlung auf.

Die vorliegende Erfindung ermöglicht es, ein Crackprodukt mit einer niedrigen Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂ durch thermisches Cracken des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken gemäß der vorliegenden Erfindung zu erhalten. In bestimmten Ausführungsformen schließt das Crackprodukt eines oder mehrere von Wasserstoff, Methan, Ethan, Ethen, Propan, Propen, Propadien, Butan, Butylene, wie Buten, Isobuten und Butadien, C₅+ - Kohlenwasserstoffen, wie Aromaten, Benzol, Toluol, Xylolen, C₅- bis C₁₈-Paraffinen oder C₅- bis C₁₈-Olefinen ein. Gegebenenfalls kann mindestens ein Teil der Kohlenwasserstoffe, welche das Crackprodukt einschließt, zu einem Derivat oder Derivaten wie einem Methanderivat oder Methanderivaten, einem Ethenderivat oder Ethenderivaten, einem Propenderivat oder Propenderivaten, einem Benzolderivat oder Benzolderivaten, einem Toluolderivat oder Toluolderivaten und/oder einem Xylolderivat oder Xylolderivaten weiterverarbeitet werden.

Methanderivate schließen beispielsweise Ammoniak, Methanol, Phosgen, Wasserstoff, Oxo-Chemikalien und deren Derivate, wie Methanolderivate, ein. Beispiele für Methanolderivate sind Methylmethacrylat, Polymethylmethacrylat, Formaldehyd, Phenolharze, Polyurethane, Methyl-tert-butylether und deren Derivate.

Ethenderivate schließen beispielsweise Ethylenoxid, Ethylendichlorid, Acetaldehyd, Ethylbenzol, alpha-Olefine und Polyethylen sowie deren Derivate, wie Ethylenoxidderivate, Ethylbenzolderivate und Acetaldehydderivate ein. Ethylenoxidderivate schließen beispielsweise Ethylenglykole, Ethylenglykoether, Ethylenglykoetheracetate, Polyester, Ethanolamine, Ethylcarbonate und deren Derivate ein. Ethylbenzolderivate schließen beispielsweise Styrol, Acrylnitril-Butadien-Styrol, Styrol-Acrylnitril-Harz, Polystyrol, ungesättigte Polyester, Styrol-Butadien-Kautschuk und deren Derivate ein. Acetaldehydderivate schließen beispielsweise Essigsäure, Vinylacetatmonomer, Polyvinylacetatpolymere und deren Derivate ein. Ethylalkoholderivate schließen beispielsweise Ethylamine, Ethylacetat, Ethylacrylat, Acrylat-Elastomere, Synthesekautschuk und deren Derivate ein. Ferner schließen Ethenderivate Polymere wie Polyvinylchlorid, Polyvinylalkohol, Polyester wie Polyethylenterephthalat, Polyvinylchlorid, Polystyrol und deren Derivate ein.

Propenderivate schließen beispielsweise Isopropanol, Acrylnitril, Polypropylen, Propylenoxid, Acrylsäure, Allylchlorid, Oxo-Alkohole, Cumol, Aceton, Acrolein, Hydrochinon, Isopropylphenole, 4-Hethylpenten-1, Alkylate, Butyraldehyd, Ethylen-Propylen-Elastomere und deren Derivate ein. Propylenoxidderivate schließen beispielsweise Propylencarbonate, Allylalkohole, Isopropanolamine, Propylenglykole, Glykoether, Polyetherpolyole, Polyoxypropylenamine, 1,4-Butandiol und deren Derivate ein. Allylchloridderivate schließen beispielsweise Epichlorhydrin und Epoxidharze ein. Isopropanolderivate schließen beispielsweise Aceton, Isopropylacetat, Isophoron, Methylmethacrylat, Polymethylmethacrylat und deren Derivate ein. Butyraldehydderivate schließen beispielsweise Acrylsäure, Acrylsäureester, Isobutanol, Isobutylacetat, n-Butanol, n-Butylacetat, Ethylhexanol und deren Derivate ein. Acrylsäurederivate schließen beispielsweise

Acrylatester, Polyacrylate und wasserabsorbierende Polymere, wie Superabsorber und deren Derivate ein.

Butylenderivate schließen beispielsweise Alkylate, Methyl-tert-butylether, Ethyl-tert-butylether, Polyethylencopolymer, Polybutene, Valeraldehyd, 1,2-Butylenoxid, Propylen, Octene, sec-Butylalkohol, Butylenkautschuk, Methylmethacrylat, Isobutylene, Polyisobutylene, substituierte Phenole, wie p-tert-Butylphenol, Di-tert-butyl-p-kresol und 2,6-Di-tert-butylphenol, Polyole und deren Derivate ein. Weitere Butadienderivate können Styrol-Butylen-Kautschuk, Polybutadien, Nitril, Polychloropren, Adiponitril, Acrylnitril-Butadien-Styrol, Styrol-Butadien-Copolymer-Latizes, Styrol-Blockcopolymere, Styrol-Butadien-Kautschuk sein.

Benzolderivate schließen beispielsweise Ethylbenzol, Styrol, Cumol, Phenol, Cyclohexan, Nitrobenzol, Alkylbenzol, Maleinsäureanhydrid, Chlorbenzol, Benzolsulfonsäure, Biphenyl, Hydrochinon, Resorcin, Polystyrol, Styrol-Acrylnitril-Harz, Styrol-Butadien-Kautschuk, Acrylnitril-Butadien-Styrol-Harz, Styrol-Blockcopolymere, Bisphenol A, Polycarbonat, Methyldiphenyldiisocyanat und deren Derivate ein. Cyclohexanderivate schließen beispielsweise Adipinsäure, Caprolactam und deren Derivate ein. Nitrobenzolderivate schließen beispielsweise Anilin, Methyldiphenyldiisocyanat, Polyisocyanate und Polyurethane ein. Alkylbenzolderivate schließen beispielsweise lineares Alkylbenzol ein. Chlorbenzolderivate schließen beispielsweise Polysulfon, Polyphenylensulfid und Nitrobenzol ein. Phenolderivate schließen beispielsweise Bisphenol A, Phenol-Formaldehydharze, Cyclohexanon-Cyclohexenol-Gemisch (KA-Öl), Caprolactam, Polyamide, Alkylphenole wie p-Nonoylphenol und p-Dodecylphenol, ortho-Xylenol, Arylphosphate, o-Kresol und Cyclohexanol ein.

Toluolderivate schließen beispielsweise Benzol, Xylol, Toluoldiisocyanat, Benzoesäure und deren Derivate ein.

Xylolderivate schließen beispielsweise aromatische zweibasige Säuren und Anhydrate wie Terephthalsäure, Isophthalsäure und Phthalsäureanhydrat sowie Phthalsäure und deren Derivate ein. Derivate der Terephthalsäure schließen beispielsweise Terephthalsäureester, wie Dimethylterephthalat, und Polyester, wie

Polyethylenterephthalat, Polytrimethylenterephthalat, Polybutylenterephthalat und Polyesterpolyole ein. Phthalsäurederivate schließen beispielsweise ungesättigte Polyester und PVC-Weichmacher ein. Isophthalsäurederivate schließen beispielsweise ungesättigte Polyester, Polyethylenterephthalat-Copolymere und Polyesterpolyole ein.

Die Kohlenwasserstoffe des Crackprodukts, das mit dem Verfahren der vorliegenden Erfindung erhalten wird, eignen sich insbesondere als Rohstoffe für die herkömmliche Petrochemie, und insbesondere für die Polymerindustrie. Das Gemisch aus Kohlenwasserstoffen, welche das Crackprodukt aufweist, das mit dem Verfahren gemäß der vorliegenden Erfindung erhalten wird, zeigt speziell eine Produktverteilung, welche der Produktverteilung der Kohlenwasserstoffe, die aus dem thermischen Cracken (Dampfcracken) herkömmlicher fossiler Rohstoffe, wie fossilem Naphtha, erhalten werden, ähnlich und sogar günstiger (aufweisend ein höheres Gewichtsprozent an HVC) als diese ist. Es ist somit beispielsweise möglich, Polymere, die teilweise aus erneuerbarem Ausgangsstoff stammen, herzustellen, indem der Ausgangsstoff für thermisches Cracken gemäß der vorliegenden Erfindung als Ausgangsstoff für thermisches Cracken bereitgestellt wird. Gegebenenfalls können Polymere, die ausschließlich von erneuerbaren Stoffen stammen, hergestellt werden, indem als Ausgangsstoff für thermisches Cracken ein Ausgangsstoff für thermisches Cracken der vorliegenden Erfindung bereitgestellt wird, der aus der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung besteht.

In bestimmten Ausführungsformen weist das Verfahren das Unterziehen mindestens eines Teils des Crackprodukts einer Reinigungsbehandlung auf, um mindestens eines von CO, CO₂ oder C₂H₂ zu entfernen. Ein Vorteil des Verfahrens gemäß der vorliegenden Erfindung ist eine niedrige Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂ in dem Crackprodukt, das in dem thermischen Crackschritt gebildet wurde, und folglich ein verringerter Aufwand der Abtrennung von CO, CO₂, C₂H₂ oder einer Kombination davon aus dem Crackprodukt. Dies ist besonders vorteilhaft bei Ausführungsformen, bei denen mindestens ein Teil des Crackprodukts einer Polymerisationsbehandlung unterzogen wird. Wie bereits erwähnt, sind CO, CO₂ und C₂H₂ Polymerisationskatalysatorgifte und somit in einem Polymerisationsverfahren unerwünscht. Der Aufwand der Entfernung

von CO, CO₂, C₂H₂, oder einer Kombination davon aus einem Teil des Crackprodukts, das einer Polymerisationsbehandlung unterzogen werden soll, kann stark reduziert, möglicherweise sogar überflüssig werden. In der Praxis wird jedoch für gewöhnlich ein Teil des Crackprodukts, das einer Polymerisationsbehandlung unterzogen werden soll, zunächst einer Reinigungsbehandlung unterzogen, beispielsweise als Vorsichtsmaßnahme oder zur Vermeidung von Abweichungen von Standardverfahren. In jedem Fall erhöht eine niedrigere Menge an CO-, CO₂- und/oder C₂H₂-Verunreinigungen in dem Crackprodukt die Lebensdauer von aktivem Stoff, wie einem Absorbens, einem Adsorbens, einem Reaktionspartner, einem Molekularsieb und/oder einem Reinigungskatalysator, der bei der Reinigungsbehandlung verwendet werden kann, um mindestens eines von CO, CO₂ oder C₂H₂ zu entfernen, und welcher die Regenerationsfrequenz des aktiven Stoffs verringert.

Bei der Reinigungsbehandlung, der mindestens ein Teil des Crackprodukts unterzogen werden kann, um mindestens eines von CO, CO₂ oder C₂H₂ zu entfernen, kann es sich um eine beliebige Reinigungsbehandlung handeln. Beispiele für solche Reinigungsbehandlungen sind in der EP2679656A1, WO2016023973, WO2003048087 und US2010331502A1 beschrieben, von denen alle hierin in ihrer Gesamtheit durch Bezugnahme aufgenommen sind.

In bestimmten Ausführungsformen weist die Reinigungsbehandlung das Inkontaktbringen mindestens eines Teils des Crackprodukts mit einem aktiven Stoff, wie einem Absorbens, einem Adsorbens, einem Reinigungskatalysator, einem Reaktionspartner, einem Molekularsieb oder einer Kombination davon auf, um mindestens eines von CO, CO₂ oder C₂H₂ zu entfernen. Gegebenenfalls kann die Reinigungsbehandlung das Inkontaktbringen mindestens eines Teils des Crackprodukts mit dem aktiven Stoff in Gegenwart von molekularem Sauerstoff, molekularem Wasserstoff oder beiden aufweisen. In bestimmten Ausführungsformen weist die Reinigungsbehandlung das Leiten mindestens eines Teils des Crackprodukts durch mindestens einen Reinigungszug, der aktiven Stoff oder mindestens ein Bett aus aktivem Stoff aufweist, auf. Das Inkontaktbringen kann in einem einzelnen Gefäß durchgeführt werden. Gegebenenfalls kann das Inkontaktbringen in mehreren, bevorzugt hintereinander geschalteten Gefäßen durchgeführt werden,

d. h. der zu reinigende Teil des Crackprodukts kann von einem Gefäß zu dem nächsten Gefäß zur weiteren Reinigung geleitet werden.

Der aktive Stoff kann beispielsweise Kupferoxid oder einen Kupferoxiddkatalysator, Oxide von Pt, Pd, Ag, V, Cr, Mn, Fe, Co oder Ni, gegebenenfalls auf Aluminiumoxid geträgert, Au/CeO₂, gegebenenfalls auf Aluminiumoxid geträgert, Zeolithe, insbesondere Zeolithe vom Typ A und/oder Typ X, Absorbenzien oder Katalysatoren auf Aluminiumoxidbasis, wie Selexsorb™ COS oder Selexord™ CD, ein Molekularsieb, aufweisend Aluminiumoxid, Aluminosilikate, Aluminophosphate oder Gemische davon oder eine beliebige Kombination davon aufweisen.

Der aktive Stoff kann ein Adsorbens oder Absorbenzien, wie in der WO03/048087A1 auf S. 11, Z. 12 bis S. 12, Z. 3; S. 12, Z. 18 bis S. 15, Z. 29 und/oder S. 17, Z. 21 bis S. 21, Z. 2 und/oder ein Molekularsieb oder Molekularsiebe, wie in der WO03/048087A1 auf S. 21, Z. 3 bis S. 22 Z. 26 beschrieben, aufweisen. Der aktive Stoff kann einen Reinigungskatalysator oder Katalysatoren, wie in der US2010/0331502A1, Absatz [0105] bis [0116], beschrieben, oder ein Molekularsieb oder Molekularsiebe, wie in der US2010/0331502A1, Absatz [0117] bis [0119], beschrieben, aufweisen. Der aktive Stoff kann einen oder mehrere Reinigungskatalysatoren aufweisen, wie sie in der WO2016/023973A1, Absatz [0061], [0062], [0063] und/oder [0064], beschrieben sind.

Bei der Reinigungsbehandlung kann es sich um eine Reinigungsbehandlung handeln, wie sie in der EP2679656A1, Absatz [0043] bis [0082], beschrieben ist. Bei der Reinigungsbehandlung kann es sich um eine Reinigungsbehandlung handeln, wie sie in der US2010/0331502A1, Absatz [0092] bis [0119] und/oder Absatz [0126] und/oder Beispiel 2, beschrieben ist. Bei der Reinigungsbehandlung kann es sich um eine Reinigungsbehandlung handeln, wie sie in der WO2016/023973A1, Absatz [0056] bis [0067], beschrieben ist. Bei der Reinigungsbehandlung kann es sich um eine Reinigungsbehandlung handeln, wie sie in der WO03/048087A1, S. 11, Z. 12 bis S. 15, Z. 29 und/oder S. 16, Z. 1 bis S. 21, Z. 2 und/oder S. 23, Z. 14 bis S. 24, Z. 13 und/oder Beispiel 1 und/oder Beispiel 2, beschrieben ist.

Üblicherweise deaktivieren oder verderben Verunreinigungen den aktiven Stoff während der Reinigungsbehandlung. Somit kann der

aktive Stoff regeneriert werden, um mindestens teilweise seine Reinigungsaktivität wiederzugewinnen. Es kann jedes Regenerationsverfahren verwendet werden, das zur Reaktivierung des aktiven Stoffs geeignet ist. Beispielsweise kann der aktive Stoff regeneriert werden, wie in der WO2016/023973A1, Absatz S. 12, Z. 3 bis 10, oder wie in der EP2679656A1, Absatz [0108] bis [0118], oder wie in der WO03/048087A1, S. 24, Z. 14 bis S. 25 Z. 32, beschrieben. Beispielsweise kann ein CuO-Katalysator regeneriert werden, indem der CuO-Katalysator mit H₂ in Kontakt gebracht wird. Ein CuO₂-Katalysator kann regeneriert werden, indem der CuO₂-Katalysator mit molekularem Sauerstoff in Kontakt gebracht wird. Ein zeolithisches Molekularsieb kann regeneriert werden, indem Wärme angewendet wird und das zeolithische Molekularsieb mit einem Inertgasstrom, wie einem Stickstoffstrom, in Kontakt gebracht wird.

In bestimmten Ausführungsformen weist die Reinigungsbehandlung mindestens einen der folgenden Schritte auf: i) Inkontaktbringen mindestens eines Teils des Crackprodukts mit einem CuO-Katalysator, um Sauerstoff zu entfernen, ii) Inkontaktbringen mindestens eines Teils des Crackprodukts mit H₂, um C₂H₂ durch Hydrierung zu entfernen, iii) Inkontaktbringen mindestens eines Teils des Crackprodukts mit einem CuO₂-Katalysator, um CO durch Oxidation zu entfernen, oder iv) Inkontaktbringen mindestens eines Teils des Crackprodukts mit einem zeolithischen Molekularsieb, um CO₂ zu entfernen. Gegebenenfalls kann die Reinigungsbehandlung das Entfernen sekundärer Verunreinigungen, wie mindestens eines von COS, H₂S oder CS₂ durch Inkontaktbringen mindestens eines Teils des Crackprodukts mit einem aktivierten Aluminiumoxidkatalysator, wie Selexorb™, aufweisen.

In bestimmten Ausführungsformen weist das Verfahren das Unterziehen mindestens eines Teils des Crackprodukts einer Polymerisationsbehandlung auf, um Polymere zu bilden. Der Teil des Crackprodukts, welcher der Polymerisationsbehandlung unterworfen wird, kann direkt aus dem thermischen Crackverfahren oder aus der Reinigungsbehandlung erhalten werden, die in den vorhergehenden Abschnitten beschrieben wurde. Gegebenenfalls kann der Teil des Crackprodukts, welcher der Polymerisationsbehandlung unterzogen wurde, teilweise der Reinigungsbehandlung unterzogen worden sein, die in den vorhergehenden Abschnitten beschrieben wurde, und

teilweise direkt aus dem thermischen Crackverfahren erhalten werden. Wie bereits erwähnt, kann es aufgrund der niedrigen Menge an CO, CO₂ und C₂H₂ in dem Crackprodukt, das in dem thermischen Crackschritt gebildet wurde, redundant sein, das Crackprodukt oder einen Teil davon vor der Polymerisation einer Reinigungsbehandlung zu unterziehen. In bestimmten bevorzugten Ausführungsformen ist der Teil des Crackprodukts, welcher der Polymerisationsbehandlung unterzogen wird, eine Ethylenfraktion, eine Propylenfraktion oder eine Kombination davon. Folglich weist das Verfahren in bestimmten Ausführungsformen das Unterziehen einer Ethylenfraktion des Crackprodukts einer Polymerisationsbehandlung auf, um Polyethylen zu bilden, und gegebenenfalls das Unterziehen einer Propylenfraktion des Crackprodukts einer Polymerisationsbehandlung, um Polypropylen zu bilden.

Die Polymerisationsbehandlung kann Lösungspolymerisation, Gasphasenwirbelschichtpolymerisation, Aufschlammungsphasenpolymerisation, wie Massepolymerisation, Hochdruckpolymerisation oder eine Kombination davon einschließen. Die Polymerisationsbehandlung kann in einem oder mehreren Polymerisationsreaktoren durchgeführt werden. Jeder des einen oder der mehreren Polymerisationsreaktoren kann mehrere Polymerisationszonen aufweisen. Die Zusammensetzung des Einsatzes, der den Polymerisationszonen zugeführt wird kann zwischen den Zonen variieren. Beispielsweise können unterschiedliche Anteile des Crackprodukts unterschiedlichen Zonen zugeführt und gegebenenfalls kann ein Comonomer einer oder mehreren der Polymerisationszonen zugeführt werden. Das den Polymerisationszonen zugeführte Comonomer kann ein anderes Comonomer für verschiedene Polymerisationszonen sein. Bei dem Polymerisationsreaktor kann es sich beispielsweise um einen kontinuierlichen Rührkessel, einen Wirbelschichtreaktor, wie einen Gasphasenwirbelschichtreaktor, oder einen gerührten Gasphasenreaktor in horizontaler oder vertikaler Ausgestaltung handeln.

Bevorzugt handelt es sich bei der Polymerisationsbehandlung um eine katalytische Polymerisation. In bestimmten Ausführungsformen weist die Polymerisationsbehandlung das Inkontaktbringen mindestens eines Teils des Crackprodukts mit einem Polymerisationskatalysator auf, um Polymere zu bilden. Bevorzugt

wird das Inkontaktbringen in einem oder mehreren Polymerisationsreaktoren durchgeführt.

In Ausführungsformen, in denen es sich bei der Polymerisationsbehandlung um eine katalytische Polymerisationsbehandlung handelt, kann das Molekulargewicht der gebildeten Polymere beispielsweise durch die Anwesenheit von Wasserstoff bei der Polymerisationsbehandlung oder durch Steuerung der Reaktionstemperatur in Abhängigkeit von dem/den eingesetzten Polymerisationskatalysator(en) geregelt werden. In Ausführungsformen, in denen es sich bei der Polymerisationsbehandlung um eine katalytische Polymerisationsbehandlung handelt, wird die Polydispersität hauptsächlich durch den eingesetzten Katalysator gesteuert.

Bei der Polymerisationsbehandlung kann es sich um eine Polymerisationsbehandlung handeln, die Polymere mit monomodalen, bimodalen oder multimodalen Molekulargewichtsverteilungen bildet. Bimodalität oder Multimodalität kann erreicht werden, indem ein bifunktionelles Katalysatorsystem in einem Reaktionsmedium (d. h. einem Reaktor oder einer Polymerisationszone) oder mit einem üblichen Katalysator (d. h. nicht bifunktionell), aber mit variablen Reaktionsmedien (d. h. Kombination mehrerer Polymerisationszonen oder mehrerer Polymerisationsreaktoren mit unterschiedlichen Zuläufen) eingesetzt wird. Andere Eigenschaften der Polymere, die in der Polymerisationsbehandlung gebildet werden, wie Polarität, Ungesättigtheitsgehalt und/oder Polydispersität, können durch Steuerung der Reaktionstemperatur, des Drucks und der Verweilzeit oder durch Injektion einer vorbestimmten Art und Menge an Co- und/oder Termonomeren in das Polymerisationsverfahren an einer vorbestimmten Stelle, z. B. in einer oder mehreren der Polymerisationszonen, welche der/die Polymerisationsreaktor(en) gegebenenfalls aufweist/en, gesteuert werden.

Gegebenenfalls können die Dichte, der Elastizitätsmodul und andere Eigenschaften der bei der Polymerisationsbehandlung gebildeten Polymere gesteuert werden, indem ein Comonomer oder Kombinationen mehrerer Monomere, beispielsweise mindestens eines von Ethylen (bei der Polypropylenherstellung), Propylen (bei der Polyethylenherstellung), 1-Buten, 1-Hexen (auch (1,5-Hexadien), 1-

Oktan (auch 1,7-Octadien) und 1-Decen (auch 1,9-Octadien) oder höheren alpha-Olefinen oder alpha-Omega-Diene in die Polymerisationsbehandlung eingeführt werden.

In bestimmten Ausführungsformen handelt es sich bei der Polymerisationsbehandlung um eine Aufschlammungspolymerisationsbehandlung, aufweisend das Lösen in einem Verdünnungsmittel, wie Propan, Propen oder Hexan, mindestens eines Teils des Crackprodukts zusammen mit molekularem Wasserstoff und gegebenenfalls einem Comonomer, um eine Lösung zu bilden, und die Lösung mit einem Katalysator in Kontakt zu bringen, um Polymere zu bilden.

In bestimmten Ausführungsformen handelt es sich bei der Polymerisationsbehandlung um eine Hochdruckpolymerisation, die bevorzugt in einem Autoklavenreaktor oder einem Rohrreaktor ausgeführt wird. Üblicherweise werden bei der Hochdruckpolymerisation keine Katalysatoren verwendet. Sowohl der Autoklavenreaktor als auch der Rohrreaktor können mehrere Polymerisationszonen aufweisen, denen mindestens ein Teil des Crackprodukts, gegebenenfalls zusammen mit einem Comonomer, zugeführt werden kann. Die Zusammensetzung des Einsatzes, der den Polymerisationszonen zugeführt wird, kann zwischen den Zonen, wie bereits erwähnt, variieren. Die Hochdruckpolymerisation kann mit verschiedenen Initiatoren, wie molekularem Sauerstoff, organischem t-Amylperoxid oder t-Butyl-Peroxyestern oder Gemische davon initiiert werden. Gegebenenfalls kann das Molekulargewicht der bei der Hochdruckpolymerisation gebildeten Polymere durch Verwendung von Kettenübertragungsmitteln, wie Methylethylketon (MEK), Propionaldehyd, alpha-Olefinen, Diolefinen oder einer Kombination davon, gesteuert werden. In bestimmten bevorzugten Ausführungsformen handelt es sich bei dem Anteil des Crackprodukts, welcher der Hochdruckpolymerisation unterzogen wird, um die Ethylenfraktion. Beispiele für Polymere, die bei der Hochdruckpolymerisation der Ethylenfraktion gebildet werden können, sind Polyethylen niedriger Dichte (LDPE) oder LDPE-Copolymere oder LDPE-Terpolymere mit Vinylacetat und/oder anderen Estern, wie Methyl-, Ethyl- oder Butylacrylaten, Glycidylmethacrylat und/oder Säuregruppen, wie Acrylsäure oder Methacrylsäure, und/oder Silanen, wie Vinyltrimethoxysilan, und/oder Säureanhydriden, wie Maleinsäureanhydrid.

Bei der Polymerisationsbehandlung kann es sich um eine Polymerisationsbehandlung handeln, wie sie in der EP2679656A1, Absatz [0090] bis [0097], beschrieben ist. Bei der Polymerisationsbehandlung kann es sich um eine Polymerisationsbehandlung handeln, wie sie in der US2010/0331502A1, Absatz [0050] bis [0066] und/oder Absatz [0123] bis [0125], und/oder Beispiel 3, beschrieben ist. Bei der Polymerisationsbehandlung kann es sich um eine Polymerisationsbehandlung handeln, wie sie in der WO2016/ 023973, Absatz [0006] bis [0020] und/oder Absatz [0024] bis [0043], beschrieben ist. Das Verfahren kann eine Kombination aus einer Reinigungsbehandlung und einer Polymerisationsbehandlung aufweisen, wie sie in der US2010/0331502A1, Absatz [0092] bis [0119], beschrieben ist.

Bevorzugt handelt es sich bei dem Teil des Crackprodukts, welcher der Polymerisationsbehandlung unterzogen wird, um eine Ethylenfraktion des Crackprodukts, und somit wird Polyethylen (PE), oder Co- oder Terpolymere davon, bei der Polymerisationsbehandlung gebildet. Ethylenmonomere des Crackprodukts können mit einem oder mehreren Comonomeren, wie 1-Propylen, 1-Buten, 1-Penten, 1-Hexen, 1-Octen und/oder konjugierten und nicht-konjugierten Diolefinen, wie Butadien, 1,3-Pentadien, 2,3-Dimethylbutadien, 1,4-Pentadien, 1,5-Hexadien und/oder Vinylcyclohexen homopolymerisiert oder copolymerisiert werden. Bevorzugt wird Ethylen mit 1-Buten, 1-Octen oder 1-Hexen copolymerisiert. Beispiele für Polymerisationsbehandlungen, um PE oder Co- oder Terpolymere davon zu bilden, weisen monomodale Verfahren und/oder multimodale Verfahren, einschließlich Hybridverfahren, auf. Lineares Polyethylen verschiedener Dichte reicht von Polyethylen ultraniedriger Dichte (ULDPE), Polyethylen sehr niedriger Dichte (VLDPE), linearem Polyethylen niedriger Dichte (LLDPE), Polyethylen mittlerer Dichte (MDPE) bis hin zu Homo-/Copolymeren, wobei statistische und Block-Co-/Terpolymere von Polyethylen hoher Dichte (HDPE) durch Multimodalität bei der Polymerisationsbehandlung der Ethylenfraktion gebildet werden können, durch beispielsweise Aufschlammungspolymerisation, Massepolymerisation (d. h. ein Verdünnungsmittel für Aufschlammungsverfahren und Monomer sind gleich), Lösungsphasenpolymerisation, Gasphasenpolymerisation und/oder

Multireaktorkombinationen derselben oder Hybridtechnologien, die parallel oder in Reihe betrieben werden (sogenannte Kaskade), wobei entweder ähnliche (d. h. monomodale) oder ungleichartige (d. h. bimodale, trimodale oder multimodale) Polymere in verschiedenen Verhältnissen oder Aufteilungen zwischen jedem Reaktor erzeugt werden.

Bevorzugt handelt es sich bei dem Teil des Crackprodukts, welcher der Polymerisationsbehandlung unterzogen wird, um eine Propylenfraktion des Crackprodukts, und somit wird Polypropylen (PP) oder Co- oder Terpolymere davon bei der Polymerisationsbehandlung gebildet. Polypropylene unterschiedlicher Dichtebereiche und Produktklassen, wie Homopolymere, Homopolymere hoher Kristallinität, statistische Copolymere, schlagfeste Copolymere, Block-Co/Terpolymere, heterophasische Copolymere oder Kombinationen davon können bei der Polymerisationsbehandlung der Propylenfraktion gebildet werden.

Ein Beispiel für einen Polymerisationskatalysator für die katalytische Polymerisation, insbesondere der Ethylenfraktion und/oder der Propylenfraktion, sind Katalysatoren vom Ziegler-Typ, die Aluminiumalkylverbindungen, wie Trimethylaluminium, Triethylaluminium, Triisobutylaluminium, Methylaluminoxan (MAO) oder Tri-n-hexylaluminium als Cokatalysatoraktivatoren zur Aktivierung von Titan- oder Vanadiumstellen an dem Katalysator, wie Titan-tetrachlorid, verwenden. Die Aluminiumalkylverbindungen können zusätzlich als Fänger von Polymerisationsgiften in den Reaktionsmedien verwendet werden.

Der Polymerisationskatalysator für die katalytische Polymerisation kann, falls gewünscht oder nach dem Verfahren erforderlich, geträgert sein. Die Trägersubstanz kann Magnesiumdichlorid- oder Siliziumdioxidträger sein, auf den aktive Stellen und gegebenenfalls interne Donatoren wie Benzoat, Phthalat, Diether oder Succinat imprägniert sein können. Zusätzlich können der Polymerisationsbehandlung externe Donatoren, wie Ethyl-p-ethoxybenzoat (PEEB), Dicyclopentyl dimethoxysilan (DCPMS), Diisopropyl dimethoxysilan (DIPS), Diisobutyl dimethoxysilan, Cyclohexyl dimethoxymethylsilan (CHMMS), Dicyclopentyl dimethoxysilan (DPDMS) oder Alkoxysilane, wie

$\text{Me}(\text{EtO})_3\text{Si}$, $\text{Ph}(\text{EtO})_3\text{Si}$, $\text{Ph}_2(\text{MeO})_2\text{Si}$, $\text{Ph}_2(\text{EtO})_2\text{Si}$, $\text{Ph}_2(\text{EtO})_2\text{Si}$, $\text{Ph}(\text{EtO})_3\text{Si}$, zugesetzt werden.

In bestimmten Ausführungsformen handelt es sich bei dem Polymerisationskatalysator um einen Stereo-Modifizierer, wie Cyclohexylmethyldimethoxysilan, Dicyclopentyldimethoxysilan, Diisobutyldimethoxysilan, Diisopropyldimethoxysilan, Isobutylisopropyldimethoxysilan, n-Propyltrimethoxysilan, Isobutylmethyldimethoxysilan, Tetraethoxysilan, Tetramethoxysilan, Isobutyltriethoxysilan, n-Propyltriethoxysilan, Isobutyltrimethoxysilan und/oder Cyclohexylethyldimethoxysilan.

Ein weiteres Beispiel für einen Polymerisationskatalysator für die katalytische Polymerisation, insbesondere der Ethylenfraktion und/oder der Propylenfraktion, sind sogenannte Single-Site-Katalysatorsysteme, von denen es verschiedene Typen gibt, wie den Kaminsky-Typ, Kombinationstyp, Typ mit Zwangsgeometrie und Spätübergangsmetallkatalysator-Typ.

Der Polymerisationskatalysator kann einen Metallocenkomplex aus Zirkonium, Titan oder Hafnium enthalten, der üblicherweise zwei Cyclopentadienylringe oder äquivalente Strukturen zu Cyclopentadienyl in Form eines einzigen Lappens und entweder eine perfluorierte boraromatische Verbindung, eine aluminiumorganische Verbindung oder Methylaluminoxan enthält, wobei die Ringe verschiedene, sowohl lineare als auch cyclische, Alkylsubstituenten enthalten. Die Ringe können durch Brückengruppen miteinander verbunden sein. Alternativ kann der Polymerisationskatalysator Monocyclopentadienylderivate von Titan oder Zirkonium enthalten, wobei eines der Kohlenstoffatome in dem Cyclopentadienylring zusätzlich über eine Brücke mit dem Metallatom verbunden ist. Diese Komplexe, die in dem Polymerisationskatalysator enthalten sein können, werden üblicherweise durch das Reagieren der Komplexe mit Methylaluminoxan oder durch das Bilden ionischer Komplexe mit nicht-koordinativen Anionen zu Polymerisationskatalysatoren umgewandelt. Gegebenenfalls können zur Bildung von Polymerisationskatalysatoren auch andere Komplexe, wie Cyclopentadienylgruppe-4-Ketimid-Komplexe,

Cyclopentadienylgruppe-4-Siloxy-Komplexe und/oder Nicht-Cyclopentadienylgruppe-4-Phosphinimid-Komplexe eingesetzt werden.

Eine weitere Art von Polymerisationskatalysatoren für die katalytische Polymerisation sind Katalysatoren vom Phillips-Typ, die sechswertiges Chrom auf einem hochoberflächigen, weitporigen Oxidträger, wie Siliziumdioxid, Aluminiumoxid, Titandioxid, Aluminophosphate oder Kombinationen enthalten können, wobei ein Gemisch aus Chromoxid und Siliziumoxid ($\text{CrO}_3/\text{SiO}_2$) zur Erzeugung aktiver Stellen verwendet werden kann.

Bei dem Polymerisationskatalysator kann es sich um einen Polymerisationskatalysator handeln, wie er in der EP2679656A1, Absatz [0098] bis [0107] beschrieben ist. Bei dem Polymerisationskatalysator kann es sich um einen Polymerisationskatalysator handeln, wie er in der US2010/0331502A1, Absatz [0067] bis [0091], und/oder Beispiel 1, beschrieben ist. Bei dem Polymerisationskatalysator kann es sich um einen Polymerisationskatalysator handeln, wie er in der WO2016/023973A1, Absatz [0045] bis [0055], beschrieben ist.

Die Eigenschaften der Polymere, die bei einer katalytischen Polymerisationsbehandlung gebildet werden, wie Molekulargewicht, Molekulargewichtsverteilung, Langkettenverzweigungsgehalt, Dichte, Viskosität, Kristallinität, amorpher Gehalt, Scherverdünnungsverhalten, andere rheologische Parameter, Indikatoren der Zusammensetzungsverteilung wie Breitenindex der Zusammensetzungsverteilung des Comonomers (CDBI, engl. Comonomer distribution breadth index), Comonomerverteilungskoeffizient (CDC, engl. Comonomer distribution constant), thermische Stabilität, Schmelztemperatur, Kristallisationstemperatur, Schmelzflussrate (MFR, engl. melt flow rate) und andere, können durch die Auswahl des Katalysatortyps oder der Katalysatortypen (da Hybridversionen verfügbar sind und zwei oder mehr verschiedene Katalysatoren einem oder mehreren Reaktoren zugeführt werden können), des Comonomertyps, Comonomergehalts, zusätzliche(s) Monomer(e) und deren Art und Menge(n) beeinflusst werden.

Nach dem Polymerisationsverfahren können die gebildeten Polymere weiter zu Polymerwerkstoff modifiziert werden. Die gebildeten Polymere können durch einen oder mehrere Extrusions- oder Compoundierungsschritte modifiziert werden, wobei gegebenenfalls

zusätzliche Inhaltsstoffe zugesetzt werden. Solche zusätzlichen Inhaltsstoffe sind beispielsweise Stabilisierungszusatzstoffe, Schlagzähmodifikatoren, wie Plastomere oder Elastomere, andere Mischkomponenten, im Allgemeinen Füllstoffe wie Talkum, Glasfasern, Kohlenstofffasern, Nanoton oder andere Nanowerkstoffe, Industrieruß, Keimbildner (die auch während der Polymerisationsbehandlung oder Herstellung eines Polymerisationskatalysators in situ zugesetzt werden können), UV-Stabilisatoren, Pigmente, Vernetzungs- oder Visbreakingmittel, wie organische Peroxide, Säurefänger, wie Calciumstearat, Polymerverarbeitungshilfsstoffe, wie beispielsweise Fluorpolymere. Gegebenenfalls können den gebildeten Polymeren nach der Polymerisationsbehandlung zusätzliche Comonomere oder funktionelle Gruppen, wie Silane und/oder Maleinsäureanhydrid, durch reaktive Extrusion zugesetzt werden. Die gebildeten Polymere können nach der Polymerisationsbehandlung weiteren Verarbeitungsschritten bei der Umsetzung, wie thermisch initiiertem Vernetzung organischer Peroxide (beispielsweise einem PE-Xa-Verfahren), Einbringen von Katalysatoren, um zur Förderung von Kondensationsreaktionen, wie Silanvernetzungsreaktionen (beispielsweise ein PE-Xb-Verfahren) oder strahlungsinduzierten Vernetzungsreaktionen (z. B. ein PE-Xc-Verfahren), unterworfen werden. Diese optionalen Modifikationen ermöglichen die Herstellung von mindestens teilweise biobasierten (erneuerbaren) Versionen des gesamten Spektrums von Polymerwerkstoffen auf fossiler Basis, insbesondere PE- und/oder PP-Werkstoffen, und anderen Werkstoffen und Gegenständen, die von diesen Polymerwerkstoffen stammen.

Die bei der Polymerisationsbehandlung gebildeten Polymere oder der von den gebildeten Polymeren stammende Polymerwerkstoff können, wie oben beschrieben, durch mehrere Verfahren, wie Extrusionsverfahren für Folien, Platten, Fasern, Rohre, Profile, Drähte und Kabel, Spritzgussverfahren, Schmelzspinnen, Blasform- oder Extrusionsblasformverfahren, Rotationsformverfahren, Schmelztauchbeschichten, Kalandrieren, Verdichten, chemische und/oder physikalische Schäumverfahren oder andere, zu Endteilen oder -produkten umgewandelt oder gebildet werden. Der Polymerwerkstoff, der von den bei der Polymerisationsbehandlung gebildeten Polymeren stammt, kann bei diesen Umwandlungsverfahren

als direktes Substitut für Polymerwerkstoffe auf fossiler Basis verwendet werden. Der Polymerwerkstoff, der von den bei der Polymerisationsbehandlung gebildeten Polymeren stammt, kann gegebenenfalls mit anderen Arten von Polymeren, Füllstoffen, Zusatzstoffen oder Kombinationen davon vermischt werden und kann gegebenenfalls in Verbundwerkstoffen oder Mehrschichtstrukturen mit anderen Werkstoffen, wie anderen Polymerwerkstoffen, beispielsweise Polypropylen auf fossiler Basis, Polyvinylidenchlorid, Polyestern, Ethylenvinylalkohol, Aluminium usw., eingeschlossen sein.

Die oben beschriebenen Endteile oder -produkte können in einer Vielzahl von Anwendungen verwendet werden. Beispielsweise können die Endteile oder -produkte in Verpackungsanwendungen verwendet werden, einschließlich Lebensmittel- und Nichtlebensmittelverpackungen, flexibler Verpackungen, Heißsiegeln, dünnwandiger Verpackungen, transparenter Verpackungen, Verpackungen von gefährlichen Gütern, Verpackungen für Reinigungsmittel und Körperpflege, Verpackungen von Tensiden usw. Die Endteile oder -produkte können in Gebrauchsgüteranwendungen, wie Deckel und Verschlüsse, Spielzeug, Flaschen, Gießkannen, Haushaltsgeräte und -vorrichtungen, Maschinenbauteile, Kisten, Kartuschen, Freizeitprodukte, Haushaltswaren, Paneele und Profile, Kappe, Schuheinlagen, Rohrschellen, Kofferraumverkleidung, Bürsten, Korken, Tintenkartuschen, Flossen, Bürsten, Auffangwannen für Perforatoren, Dichtungen, Handgriffe, Gartenmöbel, Haushaltsgegenstände, dünnwandige Spritzgussteile, Co-Spritzgussteile, Lebensmittelbehälter, wiederverwendbare Behälter, Gepäck, Eiscreme-Behälter, Milchproduktbehälter, Trinkbecher, hochschlagfeste Behälter, Behälter hoher Steifigkeit, DVD-Hüllen usw. verwendet werden. Die Endteile oder -produkte können bei Automobilanwendungen verwendet werden, wie Teilen und Baugruppen für außen, innen, unter der Motorhaube, Stoßfängern, Karosserieblechen, Verkleidungen, Armaturen Brettern, Schaltbrettern, Türverkleidungen, Klima- oder Kühlsystemen, Luftansaugrohren oder Batteriegehäusen, Instrumententafeln oder Soft-Touch-Steuerungen, Airbagabdeckungen, Dachsäulen-Formteilen, Riemen oder Schläuchen unter der Motorhaube, Regenleisten, Antischwingungssysteme, Schwellern oder Seitenleisten,

Instrumententafeln, Strukturteilen usw. Die Endteile oder -produkte können in Leitungs- und Kabelanwendungen eingesetzt werden, wie Isolierungen, Ummantelungen oder halbleitenden Werkstoffen für die Übertragung und Verteilung von Höchst-, Hoch- und Mittelspannungsenergie in AC oder DC, Daten- oder Übertragungskabeln oder Ummantelung, Gebäudeleitungen oder -kabeln, Automobilleitungen oder -kabeln, photovoltaischen Einbettungen usw. Die Endteile oder -produkte können in Rohranwendungen, wie Mehrschichtrohren, Druckrohren, Gasrohren, Trinkwasserrohren, Industrierohren, Abwasser- oder Schmutzwasserrohren, Hausinstallationen oder Heizungen, ein- oder mehrschichtigen Onshore- oder Offshore-Öl- oder Gasleitungsbeschichtungen, Druckrohren für sandlose Bettungen, grabenlosen Installationsrohren, Auskleidungen und Unterfütterungen, Industriewellrohren, Fittings, Pressfittings, Solarwärmeabsorbern usw. Die Endteile oder -produkte können in Folienanwendungen eingesetzt werden, wie strapazierfähigen Taschen, Beuteln, Müllsäcken, Tragetaschen, Agrarfolien, Gebäude- oder Baufolien, strapazierfähigen Schrumpffolien, Bündelschrumpffolien, Feinschrumpffolien, Lebensmittelverpackungs-Fill-Form-Seal (FFS)-Folien oder Beuteln, Verpackungsfolien für Hygieneartikel, Gefrierfolien, Sanitärfolien, geprägte Trennfolien, Laminierfolien, Etikettenfolien, Frischhaltefolien, Oberflächenschutzfolien, Abdichtungsschichten, Zerealienverpackungen, silikonbeschichteten Folien, Stretchhauben usw. Die Endteile oder -produkte können in Faseranwendungen, wie Vliesstoffen oder technischen Fasern, Endlosfilamenten, Filamentgarnen, Raffia, Bändern, Ladungssicherungsnetzen, losen Fasern usw. verwendet werden. Weitere Anwendungen, wobei die Endteile oder -produkte eingesetzt werden können, sind beispielsweise Extrusionsbeschichtung, Schmelzklebstoffe, Haftkleber, medizinische Anwendungen, Dach- und Abdichtungsbahnen, Teppichböden, gummierte Oberflächen, Kunstrasen, Basisharz für Masterbatches und Compoundierung.

Kohlenstoffatome erneuerbaren Ursprungs weisen eine höhere Anzahl von ^{14}C -Isotopen verglichen mit Kohlenstoffatomen fossilen Ursprungs auf. Daher ist es durch Analyse des Verhältnisses von ^{12}C - und ^{14}C -Isotopen möglich, zwischen einer Kohlenstoffverbindung, die von erneuerbarem (biobasiertem)

Rohstoff stammt, und Kohlenstoffverbindungen, die von fossilem (fossilem) Rohstoff stammen, zu unterscheiden. Somit kann ein bestimmtes Verhältnis der Isotope als „Markierung“ verwendet werden, um eine erneuerbare Kohlenstoffverbindung zu identifizieren und sie von nicht-erneuerbaren Kohlenstoffverbindungen zu unterscheiden. Das Isotopenverhältnis ändert sich im Verlauf chemischer Reaktionen nicht. Daher kann das Isotopenverhältnis verwendet werden, um erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzungen, erneuerbare Kohlenwasserstoffe, erneuerbare Monomere, erneuerbare Polymere und Werkstoffe und Produkte, die von den Polymeren stammen, zu identifizieren und sie von nicht-erneuerbaren Einsätzen und Produkten zu unterscheiden.

BEISPIELE

Die folgenden Beispiele sind bereitgestellt, um die beanspruchte Erfindung besser darzustellen, und sollten nicht als den Schutzbereich der Erfindung einschränkend ausgelegt werden. Soweit bestimmte Werkstoffe genannt werden, dient es lediglich Zwecken der Darstellung und soll die Erfindung nicht einschränken.

Dampfcrackversuche, die bestimmte Ausführungsformen der vorliegenden Erfindung darstellen, wurden an Vorrichtungen im Labormaßstab ausgeführt. Die Hauptteile der Dampfcrackeinheit, die Analysevorrichtungen und das in diesen Beispielen verwendete Kalibrierungsverfahren wurden detailliert in den folgenden Veröffentlichungen K. M. Van Geem, S. P. Pyl, M. F. Reyniers, J. Vercammen, J. Beens, G. B. Marin, On-line analysis of complex hydrocarbon mixtures using comprehensive two-dimensional gas chromatography, Journal of Chromatography A. 1217 (2010) 6623 bis 6633 und J. B. Beens, U. A. T. Comprehensive two-dimensional gas chromatography - a powerful and versatile technique. Analyst. 130 (2005) 123 bis 127 beschrieben. Als Ausgangsstoffe für Dampfcracken wurden zwei verschiedene erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzungen P1 und P2 sowie Gemische aus den erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzungen und fossilem Naphtha N1 untersucht. Ferner wurden als Vergleichsbeispiele fossiles Naphtha N1, eine dritte erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung P3 und ein Gemisch aus der dritten

erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und fossilem Naphtha N1 als Ausgangsstoffe für Dampfcracken untersucht.

Die Vorrichtungen im Labormaßstab werden mit Bezug auf Fig. 1 beschrieben. Der Einsatzabschnitt steuert die Zufuhr des Ausgangsstoffs für Dampfcracken und des Wassers aus den Vorratsbehältern 1 bzw. 2 zur Reaktorschlange 3. Die Strömung von Flüssigkeiten wurde von durch Coriolis-Strömungsmesser gesteuerte Pumpen 4 (Bronkhorst, Niederlande) reguliert, die mit Massenströmungsmessvorrichtungen der Serie Bronkhorst™ CORI-FLOW™ ausgestattet waren, um eine hohe Genauigkeit: $\pm 0,2 \%$ des Ablesewertes zu gewährleisten. CORI-FLOW™ - Massenströmungsmessvorrichtungen verwenden einen fortschrittlichen Coriolis-Massenströmungssensor, um auch bei wechselnden Betriebsbedingungen, z. B. Druck, Temperatur, Dichte, Leitfähigkeit und Viskosität, eine zuverlässige Leistung zu erzielen. Die Pumpfrequenz wurde automatisch durch die Steuerung der Strömungsmessvorrichtung CORI-FLOW™ angepasst. Der Massenstrom, der im Gegensatz zu dem Volumenstrom nicht durch Temperatur- oder Druckänderungen beeinflusst wird, aller Zuläufe wurde jede Sekunde, d. h. im Wesentlichen kontinuierlich, gemessen. Als Verdünnungsmittel wurde Wasserdampf verwendet, der auf die gleiche Temperatur wie der verdampfte Ausgangsstoff erhitzt wurde. Sowohl der Ausgangsstoff als auch der Wasserdampf wurden in elektrisch beheizten Öfen 5 bzw. 6 erhitzt. Den Öfen 5 und 6 nachgeschaltet, wurden der Ausgangsstoff und der Wasserdampf in einem elektrisch beheizten, mit Quarzkugeln gefüllten Ofen 7 vermischt, wodurch eine effiziente und gleichmäßige Vermischung von Ausgangsstoff und Verdünnungsmittel vor Eintreten in die Reaktorschlange 3 ermöglicht wurde. Das Gemisch aus Ausgangsstoff und Verdünnungsmitteldampf trat in die Reaktorschlange 3 ein, die vertikal in einem rechteckigen, elektrisch beheizten Ofen 8 angeordnet ist. Acht Thermoelemente T, die entlang der axialen Reaktorkoordinate angeordnet sind, maßen die Verfahrensgastemperatur an verschiedenen Positionen. Der rechteckige Ofen 8 wurde in acht getrennte Abschnitte unterteilt, die zur Einstellung eines bestimmten Temperaturprofils unabhängig voneinander gesteuert werden konnten. Der Druck in der Reaktorschlange 3 wurde durch einen dem Austritt der Reaktorschlange 3 nachgeschalteten Gegendruckregler (nicht

gezeigt) geregelt. Zwei Druckaufnehmer (nicht gezeigt), die an dem Eintritt und Austritt des Reaktors angeordnet sind, zeigten den Spaltschlangen-Einlassdruck (CIP) bzw. den Spaltschlangen-Austrittsdruck (COP) an. Am Reaktoraustritt wurde Stickstoff als interner Standard für analytische Messungen in den Reaktorabfluss eingeblasen und trägt in gewissem Maße zu dem Quenchen des Reaktorabflusses bei. Der Reaktorabfluss wurde eingeschaltet, d. h. während des Betriebs der Dampfcrack-Einrichtung, bei einer hohen Temperatur (350 °C) beprobt. Über ein ventilbasiertes Probenahmesystem und gleichmäßig beheizte Transferleitungen wurde nämlich eine gasförmige Probe des Reaktorabflusses in einen umfassenden zweidimensionalen Gaschromatographen (GC x GC) 9 eingeblasen, der mit einem Flammenionisationsdetektor (FID) und einem Massenspektrometer (MS) gekoppelt war. Ein Hochtemperatur-2-Wege-Probenahmeventil mit 6 Anschlüssen des ventilbasierten Probenahmesystems wurde in einem Ofen angeordnet, in dem die Temperatur über dem Taupunkt der Probe des Abflusses gehalten wurde. Weiter nachgeschaltet wurde der Reaktorabfluss auf etwa 80 °C abgekühlt. Wasser und kondensierte schwerere Produkte (Pyrolysebenzin (PyGas) und Pyrolyseöl (PFO)) wurden mittels eines Abscheidebehälters und eines Zyklons 10 entfernt, während der Rest des Abflusses direkt einer Öffnung zugeführt wurde. Vor Erreichen der Öffnung wurde eine Fraktion des Abflusses zur Analyse auf einem sogenannten Raffineriegas-Analysator (RGA) 11 entnommen. Nach Entfernung allen restlichen Wassers unter Verwendung eines wassergekühlten Wärmetauschers und Dehydratisierungsmittels wurde diese Ablassfraktion unter Verwendung eines eingebauten Gasprobenventilsystems (80 °C) automatisch auf den sogenannten Raffineriegas-Analysator (RGA) 11 eingeblasen.

Die Zusammensetzungen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzungen, nämlich P1, P2 und P3, wurden durch Gaschromatographie (GC) analysiert. Proben der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung wurden als solche, ohne jede Vorbehandlung, analysiert. Das Verfahren ist für Kohlenwasserstoffe C2 bis C36 geeignet. N-Paraffine und Gruppen von Isoparaffinen (C1-, C2-, C3-substituiert und $\geq$ C3-substituiert) wurden unter Verwendung von Massenspektrometrie und einem Gemisch bekannter n-Paraffine im Bereich von C2 bis C36 identifiziert. Die Chromatogramme wurden in drei Gruppen von

Paraffinen (C1-, C2-/C3- und $\geq$ C3-substituierte Isoparaffine / n-Paraffin) aufgeteilt, indem die Gruppen direkt nach dem n-Paraffin-Peak in die Chromatogramm-Grundlinie integriert wurden. N-Paraffine wurden von $\geq$ C3-substituierten Isoparaffinen durch tangentielle Integration des n-Alkan-Peaks von Tal zu Tal abgetrennt und Verbindungen oder Verbindungsgruppen wurden durch Normierung mit einem relativen Ansprechfaktor von 1,0 auf alle Kohlenwasserstoffe quantifiziert. Die Quantifizierungsgrenze für einzelne Verbindungen betrug 0,01 Gew.-%. Die Einstellungen des GC werden in Tabelle 1 gezeigt.

Tabelle 1. Einstellungen der GC-Bestimmung von n- und i-Paraffinen.

	GC
Injektion	split/splitloser Injektor
	Split 80:1 (Injektionsvolumen 0,2 μ l)
Säule	DB TM -5 (Länge 30 m, i. D. 0,25 mm, Phasendicke 0,25 μ m)
Trägergas	He
Detektor	FID (Flammenionisationsdetektor)
GC-Programm	30 °C (2 min) - 5 °C/min - 300 °C (30 min), konstanter Durchfluss 1,1 ml/min)

Die Analysenergebnisse sind in Tabelle 2 zusammengefasst und detaillierte Ergebnisse werden in Tabelle 3, 4 bzw. 5 gezeigt. Für Paraffine im Bereich der Kohlenstoffzahlen C2 bis C10 wurde die Gewichtsprozent-Menge an n-Paraffinen und die gesamte Gewichtsprozent-Menge an i-Paraffinen (gesamte i-Paraffine) auf Grundlage des Gesamtgewichts der Paraffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung bestimmt. Für Paraffine mit der Kohlenstoffzahl C11 oder darüber wurden die Gewichtsprozent-Mengen auf Grundlage des Gesamtgewichts der Paraffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung an n-Paraffinen, einfach

verzweigten i-Paraffinen, zweifach und dreifach verzweigten i-Paraffinen und i-Paraffinen mit mehr als drei Verzweigungen bestimmt.

Der Trübungspunkt jeder erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung P1, P2 und P3 wurde nach ASTM D7689-17 gemessen. Die Ergebnisse werden in Tabelle 2 gezeigt.

Tabelle 2. Zusammenfassung der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzungen P1, P2 und P3.

	Trübungs- punkt (°C)	Gesamt- iP Gew.-%	iP(>tri) Gew.-%	iP (>tri)/ Gesamt-iP	Gew.-% der iP im Kohlenstoff- zahlen- bereich C14-C18
P3 (vergleichend)	-48	94,81	15,77	0,17	79,37
P2	-36	92,52	10,48	0,11	92,28
P1	-2	69,04	2,88	0,04	95,46

P1 wies auf Grundlage des Gesamtgewichts der Paraffine in P1, etwa 31 Gew.-% n-Paraffine und etwa 69 Gew.-% i-Paraffine auf. Die Gesamtmenge an Paraffinen in P1 betrug etwa 99 Gew.-% des Gesamtgewichts von P1. Die Paraffine lagen im Bereich der Kohlenstoffzahlen C6 bis C24 und von den Paraffinen lagen etwa 95 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahlen C14 bis C18. Von den i-Paraffinen lagen ebenfalls etwa 95 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahlen C14 bis C18. P1 wies auf Grundlage des Gesamtgewichts der Paraffine etwa 53 Gew.-% monomethylsubstituierte Isoparaffine, etwa 12 Gew.-% di- und triethylsubstituierte Isoparaffine und etwa 3 Gew.-% Isoparaffine mit mehr als drei Methylverzweigungen auf.

Tabelle 3. Zusammensetzung der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung P1.

	P1				
Kohlenstoff- zahl	nP	iP(gesamt)	iP(mono)	iP(di und tri)	iP(>tri)

2	0,00	0,00			
3	0,00	0,00			
4	0,00	0,00			
5	0,00	0,00			
6	0,06	0,03			
7	0,14	0,21			
8	0,14	0,23			
9	0,16	0,27			
10	0,15	0,30			
11	0,15	0,29	0,19	0,10	0,00
12	0,19	0,31	0,20	0,09	0,01
13	0,25	0,39	0,28	0,10	0,02
14	0,43	0,65	0,49	0,14	0,02
15	5,57	8,20	6,59	1,41	0,21
16	9,58	18,85	15,06	3,18	0,61
17	5,26	13,27	10,30	2,43	0,54
18	8,73	24,94	19,03	4,52	1,39
19	0,06	0,30	0,20	0,07	0,03
20	0,06	0,31	0,22	0,06	0,03
21	0,01	0,04	0,03	0,01	0,01
22	0,01	0,05	0,04	0,01	0,01
23	0,01	0,04	0,03	0,01	0,00
24	0,01	0,06	0,04	0,01	0,01
25	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
C25-C29	0,00	0,16			
C30-C36	0,00	0,12			
>C36	0,00	0,00			
Gesamt	30,96	69,04	52,69	12,14	2,88

P2 wies auf Grundlage des Gesamtgewichts der Paraffine in P2 etwa 7 Gew.-% n-Paraffine und etwa 93 Gew.-% i-Paraffine auf. Die Gesamtmenge an Paraffinen in P2 betrug etwa 100 Gew.-% des Gesamtgewichts von P2. Die Paraffine lagen im Bereich der Kohlenstoffzahlen C4 bis C36, und von den Paraffinen lagen etwa 92 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahlen C14 bis C18. Von den i-Paraffinen lagen ebenfalls etwa 92 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahlen C14 bis C18. P2 wies, auf Grundlage des Gesamtgewichts der Paraffine, etwa 38 Gew.-% monomethylsubstituierte Isoparaffine, etwa 42 Gew.-% di- und triethylsubstituierte Isoparaffine und etwa 10 Gew.-% Isoparaffine mit mehr als drei Methylverzweigungen auf.

Tabelle 4. Zusammensetzung der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung P2.

	P2				
Kohlenstoff- zahl	nP	iP(gesamt)	iP(mono)	iP(di- und tri)	iP(>tri)
2	0,00	0,00			
3	0,00	0,00			
4	0,01	0,00			
5	0,02	0,01			
6	0,05	0,04			
7	0,09	0,12			
8	0,26	0,51			
9	0,23	0,76			
10	0,19	0,91			
11	0,15	0,93	0,66	0,27	0,00
12	0,13	1,08	0,67	0,38	0,03
13	0,11	1,12	0,64	0,43	0,05
14	0,35	1,73	0,92	0,72	0,09
15	1,53	9,88	5,13	4,07	0,67
16	1,60	26,60	11,64	12,24	2,73
17	1,88	15,40	7,54	6,31	1,56

18	0,79	31,77	10,14	16,65	4,98
19	0,04	0,47	0,15	0,20	0,12
20	0,02	0,39	0,12	0,14	0,14
21	0,01	0,11	0,05	0,03	0,03
22	0,01	0,12	0,05	0,04	0,04
23	0,01	0,09	0,04	0,03	0,02
24	0,01	0,09	0,03	0,03	0,03
25	0,00	0,01	0,00	0,00	0,01
C25-C29	0,00	0,32			
C30-C36	0,00	0,07			
>C36	0,00	0,00			
Gesamt	7,48	92,52	37,78	41,52	10,48

Vergleichs-P3 wies auf Grundlage des Gesamtgewichts der Paraffine in P3 etwa 5 Gew.-% n-Paraffine und etwa 95 Gew.-% i-Paraffine auf. Die Gesamtmenge an Paraffinen in P3 betrug etwa 97 Gew.-% des Gesamtgewichts von P3. Die Paraffine lagen im Bereich der Kohlenstoffzahlen C4 bis C36 und von den Paraffinen lagen etwa 78 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahlen C14 bis C18. Von den i-Paraffinen lagen etwa 79 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahlen C14 bis C18. P3 wies auf Grundlage des Gesamtgewichts der Paraffine etwa 29 Gew.-% monomethylsubstituierte Isoparaffine, etwa 41 Gew.-% di- und triethylsubstituierte Isoparaffine und etwa 16 Gew.-% Isoparaffine mit mehr als drei Methylverzweigungen auf.

Tabelle 5. Zusammensetzung der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung P3(Vergleichsbeispiele).

	P3				
Kohlenstoff- zahl	nP	iP(gesamt)	iP(mono)	iP(di und tri)	iP(>tri)
2	0,00	0,00			
3	0,00	0,00			
4	0,01	0,01			
5	0,03	0,03			

6	0,06	0,10			
7	0,18	0,39			
8	0,49	1,81			
9	0,44	2,82			
10	0,36	3,29			
11	0,28	2,02	0,35	1,66	0,00
12	0,22	4,43	1,36	1,72	1,36
13	0,17	3,24	1,21	1,75	0,28
14	0,42	4,00	1,53	2,04	0,43
15	1,07	12,18	5,92	4,80	1,46
16	0,27	16,82	5,96	8,86	2,00
17	0,83	20,86	8,44	8,86	3,56
18	0,31	21,39	4,21	10,91	6,27
19	0,01	0,62	0,20	0,26	0,16
20	0,01	0,44	0,09	0,17	0,18
21	0,00	0,09	0,04	0,03	0,02
22	0,00	0,07	0,02	0,02	0,03
23	0,00	0,03	0,01	0,01	0,01
24	0,00	0,02	0,01	0,01	0,01
25	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
C25-C29	0,00	0,12			
C30-C36	0,00	0,03			
>C36	0,00	0,00			
Gesamt	5,19	94,81	29,34	41,10	15,77

Die PiONA (Paraffine, Isoparaffine, Olefine, Naphthene, Aromaten)-Zusammensetzung des in den Beispielen und in den Vergleichsbeispielen verwendeten fossilen Naphthas N1 wurde durch Gaschromatographie, gekoppelt an einen Flammenionisationsdetektor (GC-FID), bestimmt. Die Analyseergebnisse werden in Tabelle 6 gezeigt.

N1 wies Kohlenwasserstoffe im Bereich der Kohlenstoffzahlen C4 bis C7 von etwa 99 Gew.-% des Gesamtgewichts von N1 auf. N1 wies etwa 34 Gew.-% n-Paraffine, etwa 40 Gew.-% i-Paraffine und etwa 25 Gew.-% Mononaphthene des Gesamtgewichts von N1 auf.

Tabelle 6. Zusammensetzung von fossilem Naphtha N1.

N1			
Kohlenstoff- zahl	nP	iP	Mononaphthene
2	0,00	0,00	0,00
3	0,00	0,00	0,00
4	0,07	0,00	0,00
5	9,17	7,95	1,70
6	24,72	29,75	23,30
7	0,05	2,22	0,39
8	0,00	0,00	0,00
9	0,00	0,00	0,00
>C10	0,00	0,00	0,00
Gesamt	34,01	39,92	25,39

Es wurden zwei Gemische B1 und B2 aus N1 bzw. P1 und P2 gebildet. Für die Vergleichsbeispiele wurde ein Gemisch B3 aus N1 und P3 gebildet. Die Zusammensetzungen der Gemische B1 bis B3 werden in Tabelle 7 gezeigt.

N1 wies 250 Gew.-ppm Schwefel auf. Alle erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzungen P1 bis P3 waren zunächst im Wesentlichen schwefelfrei und wiesen weniger als 1 Gew.-ppm Schwefel auf. Bei Verwendung als unvermischem Ausgangsstoff für Dampfcracken wurde P1 und P2 Dimethylsulfid (DMDS) zugesetzt, um 250 Gew.-ppm Schwefel zu enthalten, d. h. dem Schwefelgehalt von N1 zu entsprechen. Dem Gemisch B2 wurde ebenfalls DMDS zugesetzt, um 250 Gew.-ppm Schwefel zu enthalten. Dem Unvermischten P3 und den Gemischen B1 und B3 wurde nichts zugesetzt. Folglich war unvermisches P3 im Wesentlichen schwefelfrei, während der

Schwefelgehalt der Gemische B1 und B3, die aus N1 stammten, 65,2 Gew.-ppm betrug. Folglich wurden P1 bzw. P2 250 Gew.-ppm Schwefel und B2, das bereits 65,2 Gew.-ppm aus N1 stammendem Schwefel aufwies, 187,5 Gew.-ppm Schwefel zugesetzt.

Das DMDS wurde dem Ausgangsstoff im Wasserdampf zugesetzt. Mit anderen Worten wurde der Zusatz von Schwefel durch Zusatz von DMDS zu Wasserdampf und durch anschließendes Einblasen des Wasserdampfes in den Dampfcrackofen (Reaktorschlange 3) durchgeführt, sodass ein Schwefelgehalt von 250 mg Schwefel/kg Ausgangsstoff erhalten wurde. Die Ausgangsstoffe und deren Schwefelgehalte werden in Tabelle 7 zusammengefasst.

Tabelle 7. Zusammensetzung und Schwefelgehalt der Gemische B1, B2 und B3.

Ausgangsstoff	Zusammensetzung		Schwefel (Gew.-ppm)
N1 (vergleichend)	100 Gew.-% N1		250
P1	100 Gew.-% P1		250
P2	100 Gew.-% P2		250
P3 (vergleichend)	100 Gew.-% P3		< 1
B1	75 Gew.-% P1	25 Gew.-% N1	62,5
B2	75 Gew.-% P2	25 Gew.-% N1	250
B3 (vergleichend)	75 Gew.-% P3	25 Gew.-% N1	62,5

Das Dampfcracken der oben beschriebenen Ausgangsstoffe wurde bei drei verschiedenen Spaltschlangen-Austrittstemperaturen (COTs), 800 °C, 820 °C und 840 °C, ausgeführt. Das Strömungsgeschwindigkeitsverhältnis zwischen Wasser und dem Ausgangsstoff (Verdünnung) wurde konstant bei 0,5 g H₂O/g Ausgangsstoff gehalten.

Tabelle 8 zeigt die durchschnittlichen Gewichtsprozent-Mengen der Verunreinigungen CO, CO₂ und C₂H₂, gemessen an dem Dampfcrackabfluss bei den verschiedenen Spaltschlangen-

Austrittstemperaturen. Die Gewichtsprozentage liegen dem Gesamtgewicht des Dampfcrackabflusses zugrunde. Die Gesamtverunreinigungen ist die Summe der Gewichtsprozent-Mengen an CO, CO₂ und C₂H₂ (Gesamtmenge an CO, CO₂ und C₂H₂).

Tabelle 8. Durchschnittliche Gewichtsprozentage der Verunreinigungen CO, CO₂ und C₂H₂ in Dampfcrackabwässern, die bei den verschiedenen COTs erhalten wurden.

Ausgangsstoff	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	Gesamt- verunreinigungen
N1 (vergleichend)	0,015	0,008	0,239	0,262
P1	0,044	0,010	0,485	0,540
P2	0,047	0,011	0,490	0,549
P3 (vergleichend)	0,061	0,010	0,593	0,664
B1	0,057	0,011	0,507	0,575
B2	0,049	0,011	0,594	0,655
B3 (vergleichend)	0,074	0,027	0,848	0,949

Wie aus Tabelle 8 ersichtlich, hatten die erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzungen und die Gemische, welche die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweisen, überraschenderweise ein höheres Gewichtsprozent der Gesamtverunreinigungen verglichen mit fossilem Naphtha. Wie aus Tabelle 8 weiter ersichtlich, bildeten jedoch P1 und P2 sowie deren Gemische B1 und B2 deutlich weniger Gesamtverunreinigungen verglichen mit P3 und dessen Gemisch B3.

Die Kombination von fossilem Naphtha mit erneuerbarer isomerer Paraffinzusammensetzung erhöhte die Herstellung von CO und CO₂. Dies ist beispielsweise durch Vergleichen von P1 und B1 sowie P3 und B3 in Tabelle 8 ersichtlich. Es sei darauf hingewiesen, dass sich die Herstellung sowohl von CO als auch von CO₂ deutlich erhöhte, wenn P3 mit N1 vermischt wurde (d. h. P3 verglichen mit B3), trotz einer Erhöhung des Schwefelgehalts des Ausgangsstoffs von weniger als 1 Gew.-ppm auf 62,5 Gew.-ppm. Beim Vergleich von P1 und B1 (Tabelle 8) wurde dagegen eine sehr viel subtilere Zunahme der CO- und CO₂-Herstellung verzeichnet, trotz einer Verringerung des Schwefelgehalts des Ausgangsstoffs von 250 Gew.-

ppm auf 62,5 Gew.-ppm. Das Zusetzen von DMDS zu dem Gemisch trug dazu bei, die Erzeugung von CO und CO₂ zu verringern, wie durch den Vergleich von P2 und B2 mit P1 und B1 (Tabelle 8) erkannt werden kann. Dennoch kann insgesamt die Schlussfolgerung gezogen werden, dass ein Verringern des Verhältnisses der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung die Bildung von CO und speziell CO₂ drastisch verringert. Diese Wirkung kann insbesondere durch Vergleichen von B1 und B3 (Tabelle 8), welche die gleiche Menge an Schwefel enthalten, nachgewiesen werden. Es kann ferner die Schlussfolgerung gezogen werden, dass eine Erhöhung der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung auch zur Verringerung der Bildung von CO und CO₂ beiträgt.

Wie aus Tabelle 8 ersichtlich, erzeugte fossiles Naphtha überraschenderweise weniger C₂H₂ als die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung oder die Gemische, welche die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweisen. Überraschenderweise erhöhte sich die Bildung von C₂H₂, wenn die erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzungen jeweils mit fossilem Naphtha kombiniert wurden, wie durch einen Vergleich von P1 mit B1, P2 mit B2 und P3 mit B3 (Tabelle 8) zu erkennen ist. Der Schwefelgehalt beeinflusst die Bildung von C₂H₂ beim Dampfcracken nicht nennenswert. Wie aus Tabelle 8 ersichtlich, erzeugte P2 etwas mehr C₂H₂ als P1. Ein Vergleichen von P3 mit P1 und P2 zeigt jedoch, dass P3 deutlich mehr C₂H₂ erzeugte als P1 oder P2 (Tabelle 8). Dies ist angesichts des Unterschieds in dem Maß der Isomerisierung zwischen P2 und P3 (2,29 Prozentpunkte) und des Unterschieds in dem Maß der Isomerisierung zwischen P1 und P2 (23,48 Prozentpunkte) überraschend. Somit kann die Schlussfolgerung gezogen werden, dass das Maß der Isomerisierung kein Hauptfaktor für die Steuerung der Bildung von C₂H₂ ist. Wie aus Tabelle 8 ersichtlich, war die Erhöhung der C₂H₂-Erzeugung zwischen B1 und B2 sehr viel subtiler als die Erhöhung der C₂H₂-Erzeugung zwischen B3 und entweder B1 oder B2, wobei B1 weniger C₂H₂ als B2 oder B3, und B2 weniger C₂H₂ als B3 erzeugte. Es kann somit die Schlussfolgerung gezogen werden, dass ein Verringern des Verhältnisses der Gewichtsprozent-Menge an

Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung die Bildung von C_2H_2 verringert. Ferner trägt eine Erhöhung der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen, die im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufgewiesen sind, zur Verringerung der Bildung von C_2H_2 bei. Folglich wird das Gewichtsprozent der Gesamtverunreinigungen durch das Verringern des Verhältnisses der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung ebenfalls verringert. Diese Wirkung kann weiter verbessert werden, indem die Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen, die im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufgewiesen sind, erhöht wird.

Tabelle 9 bis 12 zeigen detailliertere Analysenergebnisse der Dampfcrackabflüsse. Wie aus Tabelle 11 und 12 ersichtlich, wurde bei dem Durchführen des Dampfcrackens bei COTs von 800 °C und 820 °C weniger CO und CO₂ hergestellt, verglichen mit dem Durchführen des Dampfcrackens bei einer COT von 840 °C. Dies war bei allen Ausgangsstoffen der Beispiele, nämlich P1, P2, B1 und B2, zu beobachten. Für alle Ausgangsstoffe der Beispiele (P1, P2, B1 und B2) wurde bei einer COT von 800 °C eine besonders niedrige Herstellung von CO und CO₂ erhalten.

Überraschenderweise erhöhte eine COT von 820 °C die Bildung von C_2H_2 , wenn es sich bei dem Ausgangsstoff um P1 oder P2 handelte, verglichen mit dem Dampfcracken desselben Ausgangsstoffs bei einer COT von 800 °C und 840 °C. Diese Wirkung war beim Dampfcracken der Gemische B1 und B2 nicht zu beobachten. Die Herstellung von C_2H_2 verringerte sich mit der COT, wenn es sich bei dem Ausgangsstoff um B1 oder B2 handelte. Die niedrigste C_2H_2 -Herstellung wurde bei einer COT von 800 °C für alle Ausgangsstoffe der Beispiele (P1, P2, B1 und B2) erhalten. Dementsprechend wurde die Herstellung der Verunreinigungen CO, CO₂ und C_2H_2 bei einer COT von 800 °C weiter verringert. Bei dem Dampfcracken von Gemischen von fossilem Naphtha und P1 oder P2 hat sich gezeigt, dass eine COT aus dem Bereich von 800 bis 820 °C die Herstellung der Verunreinigungen CO, CO₂ und C_2H_2 verringert, verglichen mit einer COT von 840 °C.

Tabelle 9. Analyse des Dampfcrackabflusses, Ausgangsstoffe N1 und P3 (Vergleichsbeispiele). Die Ergebnisse sind in Gew.-% auf Grundlage des Gesamtgewichts des Abflusses angegeben.

Ausgangsstoff	N1	N1	N1	P3	P3	P3
Schwefel (ppm)	250	250	250	250	250	250
COT (°C)	800	820	840	800	820	840
Verdünnung (gH ₂ O/g Ausgangsstoff)	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
CO	0,013	0,015	0,032	0,035	0,054	0,092
CO ₂	0,010	0,012	0,009	0,008	0,010	0,013
C ₂ H ₂	0,235	0,169	0,492	0,517	0,607	0,655
H ₂	0,599	0,799	0,901	0,476	0,558	0,644
Methan	8,602	10,117	12,530	9,928	11,451	12,743
Ethen	19,353	23,063	27,942	26,624	28,912	30,518
Propen	16,254	17,955	17,174	19,730	19,401	18,430
1,3-Butadien	3,573	4,423	4,964	6,410	6,833	6,808
nicht-Aromaten C ₅ - C ₉	36,733	24,735	17,024	14,622	8,228	4,678
Benzol	2,338	5,217	5,816	3,258	6,883	9,195
Toluol	0,261	0,803	1,190	1,949	2,684	3,538
Xylole	0,101	0,000	0,118	0,093	0,133	0,082
andere	11,928	12,691	11,810	16,348	14,247	12,605
BTX (Benzol, Toluol, Xylole)	2,699	6,020	7,124	5,301	9,699	12,815
Ethen und Propen	35,607	41,018	45,116	46,354	48,313	48,948
HVC (Ethen, Propen, 1,3-Butadien und BTX)	41,879	51,461	57,203	58,065	64,846	68,571
Gesamtverun- reinigungen (CO, CO ₂ und C ₂ H ₂)	0,259	0,196	0,533	0,560	0,671	0,760
Gesamtsumme aller Spezies	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00

Tabelle 10. Dampfcrackabflussanalyse, Ausgangsstoff B3 (Vergleichsbeispiele). Die Ergebnisse sind in Gew.-% auf Grundlage des Gesamtgewichts des Abflusses angegeben.

Ausgangsstoff	B3	B3	B3
Schwefel (ppm)	62,5	62,5	62,5
COT (°C)	800	820	840
Verdünnung (g H ₂ O/ g Ausgangsstoff)	0,5	0,5	0,5
CO	0,042	0,073	0,107
CO ₂	0,025	0,025	0,031
C ₂ H ₂	1,149	0,654	0,741
H ₂	0,490	0,651	0,709
Methan	8,964	11,185	11,858
Ethen	23,573	29,121	30,289
Propen	18,260	19,511	18,468
1,3-Butadien	5,463	6,389	6,595
nicht-Aromaten C ₅ -C ₉	19,625	10,231	7,692
Benzol	3,930	6,492	8,084
Toluol	1,141	1,910	2,696
Xylole	0,181	0,097	0,153
andere	17,156	13,660	12,576
BTX (Benzol, Toluol, Xylole)	5,252	8,499	10,933
Ethen und Propen	41,833	48,633	48,757
HVC (Ethen, Propen, 1,3-Butadien und BTX)	52,549	63,521	66,286
Gesamtverunreinigungen (CO, CO ₂ und C ₂ H ₂)	1,216	0,752	0,879

Gesamtsumme	aller	100,00	100,00	100,00
Spezies				

Tabelle 11. Analyse des Dampfcrackabflusses, Ausgangsstoffe P1 und P2. Die Ergebnisse sind in Gew.-% auf Grundlage des Gesamtgewichts des Abflusses angegeben.

Ausgangsstoff	P1	P1	P1	P2	P2	P2
Schwefel (ppm)	250	250	250	250	250	250
COT (°C)	800	820	840	800	820	840
Verdünnung (gH ₂ O/gHC)	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
CO	0,022	0,046	0,065	0,031	0,047	0,064
CO ₂	0,006	0,011	0,014	0,009	0,010	0,015
C ₂ H ₂	0,190	0,696	0,570	0,387	0,611	0,474
H ₂	0,396	0,504	0,596	0,449	0,538	0,604
Methan	7,989	9,751	11,004	9,375	10,797	11,739
Ethen	28,219	32,745	34,348	27,653	29,559	30,226
Propen	17,009	18,098	17,188	19,216	18,668	17,304
1,3-Butadien	5,725	6,786	6,768	6,472	6,683	6,513
nicht-Aromaten C ₅ -C ₉	8,890	10,256	9,937	12,528	9,786	9,782
Benzol	2,757	3,840	6,452	4,783	6,688	7,172
Toluol	0,940	1,404	2,034	1,948	2,730	2,582
Xylole	0,475	0,082	0,228	0,169	0,246	0,122
andere	27,383	15,781	10,795	16,980	13,637	13,403
BTX (Benzol, Toluol, Xylole)	4,172	5,326	8,714	6,900	9,664	9,876
Ethen und Propen	45,228	50,844	51,536	46,869	48,227	47,531
HVC (Ethen, Propen, 1,3-Butadien und BTX)	55,125	62,956	67,019	60,241	64,574	63,919

Gesamtverun- reinigungen (CO, CO ₂ und C ₂ H ₂)	0,218	0,752	0,649	0,427	0,668	0,553
Gesamtsumme aller Spezies	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00

Tabelle 12. Dampfcrackabflussanalyse, Ausgangsstoffe B1 und B2. Die Ergebnisse sind in Gew.-% auf Grundlage des Gesamtgewichts des Abflusses angegeben.

Ausgangsstoff	B1	B1	B1	B2	B2	B2
Schwefel (ppm)	62,5	62,5	62,5	250	250	250
COT (°C)	800	820	840	800	820	840
Verdünnung (g H ₂ O / g Ausgangsstoff)	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
CO	0,027	0,047	0,097	0,036	0,038	0,073
CO ₂	0,007	0,010	0,017	0,014	0,008	0,011
C ₂ H ₂	0,314	0,298	0,909	0,402	0,630	0,751
H ₂	0,454	0,562	0,653	0,522	0,589	0,679
Methan	7,712	9,241	10,189	9,175	10,463	11,201
Ethen	27,035	31,519	33,728	27,058	27,777	30,563
Propen	17,537	18,349	17,729	18,855	17,796	17,694
1,3-Butadien	5,589	6,388	6,638	5,977	6,111	6,313
nicht-Aromaten C ₅ - C ₉	15,081	15,582	12,825	20,136	14,722	10,847
Benzol	4,332	5,953	6,094	4,426	5,958	7,849
Toluol	1,217	1,321	1,172	1,294	1,891	2,088
Xylole	0,135	0,081	0,076	0,141	0,184	0,161
andere	19,355	10,650	10,882	15,613	13,832	11,771
BTX (Benzol, Toluol, Xylole)	5,684	7,355	7,342	5,860	8,033	10,097

Ethen und Propen	44,572	49,868	51,457	45,913	45,573	48,257
HVC (Ethen, Propen, 1,3-Butadien und BTX)	55,845	63,611	65,436	57,751	59,717	64,667
Gesamtverunreinigungen (CO, CO ₂ und C ₂ H ₂)	0,348	0,354	1,023	0,453	0,677	0,834
Gesamtsumme aller Spezies	98,79	100,00	101,01	103,65	100,00	100,00

Umsetzung und Ausführungsformen der vorliegenden Erfindung werden in den folgenden nummerierten Formulierungen weiter erläutert:

1. Verfahren, welches folgende Schritte aufweist

a) Bereitstellen eines Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, aufweisend

1 bis 100 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, wobei die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung

mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist, wobei von den Paraffinen 10 bis 95 Gew.-% Isoparaffine sind und das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zur Gesamtgewichtsmenge der Isoparaffine weniger als 0,15 beträgt, und

0 bis 99 Gew.-% fossiles Naphtha des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken,

wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas mindestens 90 Gew.-% des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken beträgt; und

b) thermisches Cracken des in Schritt a) bereitgestellten Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, um ein Crackprodukt zu bilden, das ein Gemisch aus Kohlenwasserstoffen aufweist.

2. Verfahren nach Formulierung 1, wobei der Ausgangsstoff für thermisches Cracken Folgendes aufweist

50 bis 100 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, und
0 bis 50 Gew.-% fossiles Naphtha des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken,

3. Verfahren nach einer der vorhergehenden Formulierungen, wobei der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 50 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 50 Gew.-% fossiles Naphtha, bevorzugt 60 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 40 Gew.-% fossiles Naphtha, bevorzugter 70 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 30 Gew.-% fossiles Naphtha, des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, aufweist,

wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas bevorzugt bei mindestens 95 Gew.-%, bevorzugter bei mindestens 99 Gew.-% des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, beträgt.

4. Verfahren nach einer der vorhergehenden Formulierungen, wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung weniger als 0,12, bevorzugt weniger als 0,10, bevorzugter weniger als 0,05 beträgt.

5. Verfahren nach einer der vorhergehenden Formulierungen, wobei von den Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung mindestens 80 Gew.-%, bevorzugt mindestens 85 Gew.-%, bevorzugter mindestens 90 Gew.-%, noch bevorzugter mindestens 95 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen.

6. Verfahren nach einer der vorhergehenden Formulierungen, wobei von den Paraffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung 60 bis 95 Gew.-%, bevorzugt 60 bis 80 Gew.-%, weiter bevorzugt 65 bis 70 Gew.-% Isoparaffine sind, wobei die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung bevorzugt mindestens 70 Gew.-%, weiter bevorzugt mindestens 80 Gew.-%, bevorzugter mindestens 90 Gew.-%, noch bevorzugter mindestens

95 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist.

7. Verfahren nach einer der vorhergehenden Formulierungen, wobei das fossile Naphtha 20 bis 85 Gew.-% Paraffine, 0 bis 35 Gew.-% Olefine, 10 bis 30 Gew.-% Naphthene und 0 bis 30 Gew.-% Aromaten des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas aufweist, wobei das Gewichtsprozent der Kohlenwasserstoffe in dem fossilen Naphtha bevorzugt mindestens 95 Gew.-%, bevorzugter mindestens 99 Gew.-% des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas beträgt.

8. Verfahren nach einer der vorhergehenden Formulierungen, wobei der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 20 bis 300 Gew.-ppm, bevorzugt 20 bis 250 Gew.-ppm, bevorzugter 20 bis 100 Gew.-ppm und noch bevorzugter 50 bis 65 Gew.-ppm Schwefel aufweist.

9. Verfahren nach einer der vorhergehenden Formulierungen, wobei Schritt b) bei einer Spaltschlangen-Austrittstemperatur (COT) vollzogen wird, die aus dem Bereich von 780 °C bis 890 °C, bevorzugt von 800 °C bis 860 °C, bevorzugter von 800 °C bis 840 °C und noch bevorzugter von 800 °C bis 820 °C ausgewählt ist.

10. Verfahren nach einer der vorhergehenden Formulierungen, welches den folgenden Schritt aufweist

c) Unterziehen mindestens eines Teils des in Schritt b) gebildeten Crackprodukts einer Reinigungsbehandlung, um mindestens eines von CO, CO₂ oder C₂H₂ zu entfernen.

11. Verfahren nach einer der vorhergehenden Formulierungen, welches den folgenden Schritt aufweist

d) Unterziehen mindestens eines Teils des in Schritt b) gebildeten Crackprodukts, oder mindestens eines Teils des Crackprodukts, welches der Reinigungsbehandlung von Schritt c) unterzogen wurde, oder beider einer Polymerisationsbehandlung, um Polymere herzustellen.

12. Verfahren nach einem der vorhergehenden Formulierungen, aufweisend

Bereitstellen mehrerer thermischer Cracköfen, und

Durchführen von Schritt b) in mindestens einem der mehreren thermischen Cracköfen.

13. Verfahren nach Formulierung 12, aufweisend Erhalten von Crackprodukten aus den mehreren thermischen Cracköfen, und

Mischen der erhaltenen Crackprodukte, um ein kombiniertes Crackprodukt zu bilden, und

gegebenenfalls Unterziehen mindestens eines Teils des kombinierten Crackprodukts einer Reinigungsbehandlung, um mindestens eines von CO, CO₂ oder C₂H₂ zu entfernen, oder einer Polymerisationsbehandlung, um Polymere auszubilden, oder sowohl der Reinigungsbehandlung als auch der Polymerisationsbehandlung.

14. Ausgangsstoff für thermisches Cracken, aufweisend

1 bis 100 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, wobei die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist, wobei von den Paraffinen 10 bis 95 Gew.-% Isoparaffine sind und das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine weniger als 0,15 beträgt, und

0 bis 99 Gew.-% fossiles Naphtha des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken,

wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas mindestens 90 Gew.-% des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken beträgt.

15. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach Formulierung 14, wobei der Ausgangsstoff für thermisches Cracken Folgendes aufweist

50 bis 100 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, und

0 bis 50 Gew.-% fossiles Naphtha, des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken.

16. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach Formulierung 14 oder 15, wobei der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 50 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis

50 Gew.-% fossiles Naphtha, bevorzugt 60 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 40 Gew.-% fossiles Naphtha, bevorzugter 70 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 30 Gew.-% fossiles Naphtha, des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, aufweist,

wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas bevorzugt mindestens 95 Gew.-%, bevorzugter mindestens 99 Gew.-%, des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, beträgt.

17. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach einer der vorhergehenden Formulierungen 14 bis 16, wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung weniger als 0,12, bevorzugt weniger als 0,10, bevorzugter weniger als 0,05, beträgt.

18. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach einer der vorhergehenden Formulierungen 14 bis 17, wobei von den Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung mindestens 80 Gew.-%, bevorzugt mindestens 85 Gew.-%, bevorzugter mindestens 90 Gew.-%, noch bevorzugter mindestens 95 Gew.-%, im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen.

19. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach einer der vorhergehenden Formulierungen 14 bis 18, wobei von den Paraffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung 60 bis 95 Gew.-%, bevorzugt 60 bis 80 Gew.-%, weiter bevorzugt 65 bis 70 Gew.-%, Isoparaffine sind,

wobei die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung bevorzugt mindestens 70 Gew.-%, weiter bevorzugt mindestens 80 Gew.-%, bevorzugter mindestens 90 Gew.-%, noch bevorzugter mindestens 99 Gew.-%, des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist.

20. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach einer der vorhergehenden Formulierungen 14 bis 19, wobei das fossile Naphtha 20 bis 85 Gew.-% Paraffine, 0 bis 35 Gew.-% Olefine, 10 bis

30 Gew.-% Naphthene und 0 bis 30 Gew.-% Aromaten des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas aufweist, wobei die Gewichtsprozent der Kohlenwasserstoffe in dem fossilen Naphtha bevorzugt mindestens 95 Gew.-%, bevorzugter mindestens 99 Gew.-%, des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas betragen.

21. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach einer der vorhergehenden Formulierungen 14 bis 20, wobei der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 20 bis 300 Gew.-ppm, bevorzugt 20 bis 250 Gew.-ppm, bevorzugter 20 bis 100 Gew.-ppm, und am bevorzugtesten 50 bis 65 Gew.-ppm, Schwefel aufweist.

22. Crackprodukt, aufweisend ein Gemisch aus Kohlenwasserstoffen, erhältlich durch ein Verfahren nach einer der vorhergehenden Formulierungen 1 bis 13, wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen von CO, CO₂ und C₂H₂ in dem Crackprodukt weniger als 1,5 Gew.-%, bevorzugt weniger als 1,3 Gew.-%, bevorzugter weniger als 1,1 Gew.-%, noch bevorzugter weniger als 0,8 Gew.-%, des Gesamtgewichts des Crackprodukts beträgt.

23. Verwendung des Crackprodukts nach Formulierung 22 zur Herstellung von Polymeren, wie Polypropen, Polyethylen oder beiden.

24. Erzeugnis, aufweisend Polymere, das durch ein Verfahren nach Formulierung 11 oder Formulierung 13 erhältlich ist.

Die vorhergehende Beschreibung hat als nicht einschränkende Beispiele für bestimmte Umsetzungen und Ausführungsformen der Erfindung eine vollständige und informative Beschreibung der besten Art und Weise bereitgestellt, die derzeit von den Erfindern zum Ausführen der Erfindung in Betracht gezogen wird. Dem Fachmann ist jedoch klar, dass die Erfindung nicht auf Details der vorhergehend dargelegten Ausführungsformen beschränkt ist, sondern dass sie in anderen Ausführungsformen mit gleichwertigen Mitteln oder in unterschiedlichen Kombinationen von Ausführungsformen realisiert werden kann, ohne von den Merkmalen der Erfindung abzuweichen.

Außerdem können einige der Merkmale der zuvor offenbarten Ausführungsformen dieser Erfindung vorteilhaft ohne die entsprechende Verwendung anderer Merkmale verwendet werden. Als solche soll die vorhergehende Beschreibung lediglich als

Darstellung der Prinzipien der vorliegenden Erfindung und nicht als Einschränkung derselben betrachtet werden. Demzufolge ist der Rahmen der Erfindung nur durch die beiliegenden Patentansprüche beschränkt.

Patentansprüche:

1. Verfahren, welches folgende Schritte aufweist:

a) Bereitstellen eines Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, aufweisend

1 bis 100 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, wobei die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung aufweisend

mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung, wobei von den Paraffinen 10 bis 95 Gew.-% Isoparaffine sind und das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine weniger als 0,15 beträgt, und

0 bis 99 Gew.-% fossiles Naphtha, des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken,

wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen an erneuerbarer isomerer Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas mindestens 90 Gew.-% des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken beträgt; und

b) thermisches Cracken des in Schritt a) bereitgestellten Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, um ein Crackprodukt zu bilden, das ein Gemisch aus Kohlenwasserstoffen aufweist.

2. Verfahren nach Anspruch 1, wobei der Ausgangsstoff für thermisches Cracken

50 bis 100 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken und

0 bis 50 Gew.-% fossiles Naphtha des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken aufweist.

3. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, wobei der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 50 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 50 Gew.-% fossiles Naphtha, bevorzugt 60 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 40 Gew.-% fossiles Naphtha,

bevorzugter 70 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 30 Gew.-% fossiles Naphtha, des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, aufweist,

wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas bevorzugt mindestens 95 Gew.-%, bevorzugter mindestens 99 Gew.-%, des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, beträgt.

4. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung weniger als 0,12, bevorzugt weniger als 0,10, bevorzugter weniger als 0,05 beträgt.

5. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, wobei von den Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung mindestens 80 Gew.-%, bevorzugt mindestens 85 Gew.-%, bevorzugter mindestens 90 Gew.-%, noch bevorzugter mindestens 95 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen.

6. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, wobei von den Paraffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung 60 bis 95 Gew.-%, bevorzugt 60 bis 80 Gew.-%, weiter bevorzugt 65 bis 70 Gew.-% Isoparaffine sind,

wobei die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung bevorzugt mindestens 70 Gew.-%, weiter bevorzugt mindestens 80 Gew.-%, bevorzugter mindestens 90 Gew.-%, noch bevorzugter mindestens 95 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist.

7. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, wobei das fossile Naphtha 20 bis 85 Gew.-% Paraffine, 0 bis 35 Gew.-%

Olefine, 10 bis 30 Gew.-% Naphthene und 0 bis 30 Gew.-% Aromaten des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas aufweist, wobei die Gewichtsprozent der Kohlenwasserstoffe in dem fossilen Naphtha bevorzugt mindestens 95 Gew.-%, bevorzugter mindestens 99 Gew.-% des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas betragen.

8. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, wobei der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 20 bis 300 Gew.-ppm, bevorzugt 20 bis 250 Gew.-ppm, bevorzugter 20 bis 100 Gew.-ppm und noch bevorzugter 50 bis 65 Gew.-ppm Schwefel aufweist.

9. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, wobei Schritt b) bei einer Spaltschlangen-Austrittstemperatur (COT) durchgeführt wird, die aus dem Bereich von 780 °C bis 890 °C, bevorzugt von 800 °C bis 860 °C, bevorzugter von 800 °C bis 840 °C und noch bevorzugter von 800 °C bis 820 °C ausgewählt ist.

10. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, welches den folgenden Schritt aufweist:

c) Unterziehen mindestens eines Teils des in Schritt b) ausgebildeten Crackprodukts einer Reinigungsbehandlung, um mindestens eines von CO, CO₂ oder C₂H₂ zu entfernen.

11. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, welches den folgenden Schritt aufweist:

d) Unterziehen mindestens eines Teils des in Schritt b) gebildeten Crackprodukts oder mindestens eines Teils des Crackprodukts, welches der Reinigungsbehandlung von Schritt c) unterzogen wurde, oder beider einer Polymerisationsbehandlung, um Polymere herzustellen.

12. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, aufweisend Bereitstellen mehrerer thermischer Cracköfen und

Durchführen von Schritt b) in mindestens einem der mehreren thermischen Cracköfen.

13. Verfahren nach Anspruch 12, aufweisend

Erhalten von Crackprodukten aus den mehreren thermischen Cracköfen, und

Mischen der erhaltenen Crackprodukte, um ein kombiniertes Crackprodukt zu bilden, und

gegebenenfalls Unterziehen mindestens eines Teils des kombinierten Crackprodukts einer Reinigungsbehandlung, um mindestens eines von CO, CO₂ oder C₂H₂ zu entfernen, oder einer Polymerisationsbehandlung, um Polymere auszubilden, oder sowohl der Reinigungsbehandlung als auch der Polymerisationsbehandlung.

14. Ausgangsstoff für thermisches Cracken, aufweisend

1 bis 100 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, wobei die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung

mindestens 60 Gew.-% Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist, wobei von den Paraffinen 10 bis 95 Gew.-% Isoparaffine sind und von den Isoparaffinen mindestens 80 Gew.-% im Bereich der Kohlenstoffzahl C₁₄ bis C₁₈ liegen und das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der gesamten Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine weniger als 0,12 beträgt, und

0 bis 99 Gew.-% fossiles Naphtha des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken,

wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas mindestens 90 Gew.-% des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken beträgt.

15. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach Anspruch 14, wobei der Ausgangsstoff für thermisches Cracken

50 bis 100 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken und

0 bis 50 Gew.-% fossiles Naphtha des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken aufweist.

16. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach Anspruch 14 oder 15, wobei der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 50 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 50 Gew.-% fossiles Naphtha, bevorzugt 60 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 40 Gew.-% fossiles Naphtha, bevorzugter 70 bis 85 Gew.-% erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung und 15 bis 30 Gew.-% fossiles Naphtha, des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken aufweist,

wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung und des fossilen Naphthas bevorzugt mindestens 95 Gew.-%, bevorzugter mindestens 99 Gew.-%, des Gesamtgewichts des Ausgangsstoffs für thermisches Cracken, beträgt.

17. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach einem der vorhergehenden Ansprüche 14 bis 16, wobei das Verhältnis der Gewichtsprozent-Menge an Isoparaffinen mit mehr als drei Verzweigungen zu der Gesamt-Gewichtsprozent-Menge der Isoparaffine in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung weniger als weniger als 0,10, bevorzugt weniger als 0,05, beträgt.

18. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach einem der vorhergehenden Ansprüche 14 bis 17, wobei von den Isoparaffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung mindestens 85 Gew.-%, bevorzugt mindestens 90 Gew.-%, bevorzugter mindestens 95 Gew.-%, im Bereich der Kohlenstoffzahl C14 bis C18 liegen.

19. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach einem der vorhergehenden Ansprüche 14 bis 18, wobei von den Paraffinen in der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung 60 bis 95 Gew.-%

%, bevorzugt 60 bis 80 Gew.-%, weiter bevorzugt 65 bis 70 Gew.-%, Isoparaffine sind,

wobei die erneuerbare isomere Paraffinzusammensetzung bevorzugt mindestens 70 Gew.-%, weiter bevorzugt mindestens 80 Gew.-%, bevorzugter mindestens 90 Gew.-%, noch bevorzugter mindestens 99 Gew.-%, Paraffine des Gesamtgewichts der erneuerbaren isomeren Paraffinzusammensetzung aufweist.

20. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach einem der vorhergehenden Ansprüche 14 bis 19, wobei das fossile Naphtha 20 bis 85 Gew.-% Paraffine, 0 bis 35 Gew.-% Olefine, 10 bis 30 Gew.-% Naphthene und 0 bis 30 Gew.-% Aromaten des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas aufweist, wobei die Gewichtsprozent der Kohlenwasserstoffe in dem fossilen Naphtha bevorzugt mindestens 95 Gew.-%, bevorzugter mindestens 99 Gew.-%, des Gesamtgewichts des fossilen Naphthas betragen.

21. Ausgangsstoff für thermisches Cracken nach einem der vorhergehenden Ansprüche 14 bis 20, wobei der Ausgangsstoff für thermisches Cracken 20 bis 300 Gew.-ppm, bevorzugt 20 bis 250 Gew.-ppm, bevorzugter 20 bis 100 Gew.-ppm und am bevorzugtesten 50 bis 65 Gew.-ppm, Schwefel aufweist.

22. Crackprodukt, aufweisend ein Gemisch aus Kohlenwasserstoffen, erhaltbar durch ein Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche 1 bis 13, wobei die Summe der Gewichtsprozent-Mengen von CO, CO₂ und C₂H₂ in dem Crackprodukt weniger als 1,5 Gew.-%, bevorzugt weniger als 1,3 Gew.-%, bevorzugter weniger als 1,1 Gew.-%, noch bevorzugter weniger als 0,8 Gew.-%, des Gesamtgewichts des Crackprodukts beträgt.

23. Verfahren zur Herstellung von Polymeren, wie Polypropylen, Polyethylen oder beiden unter Verwendung eines Crackprodukts nach Anspruch 22.

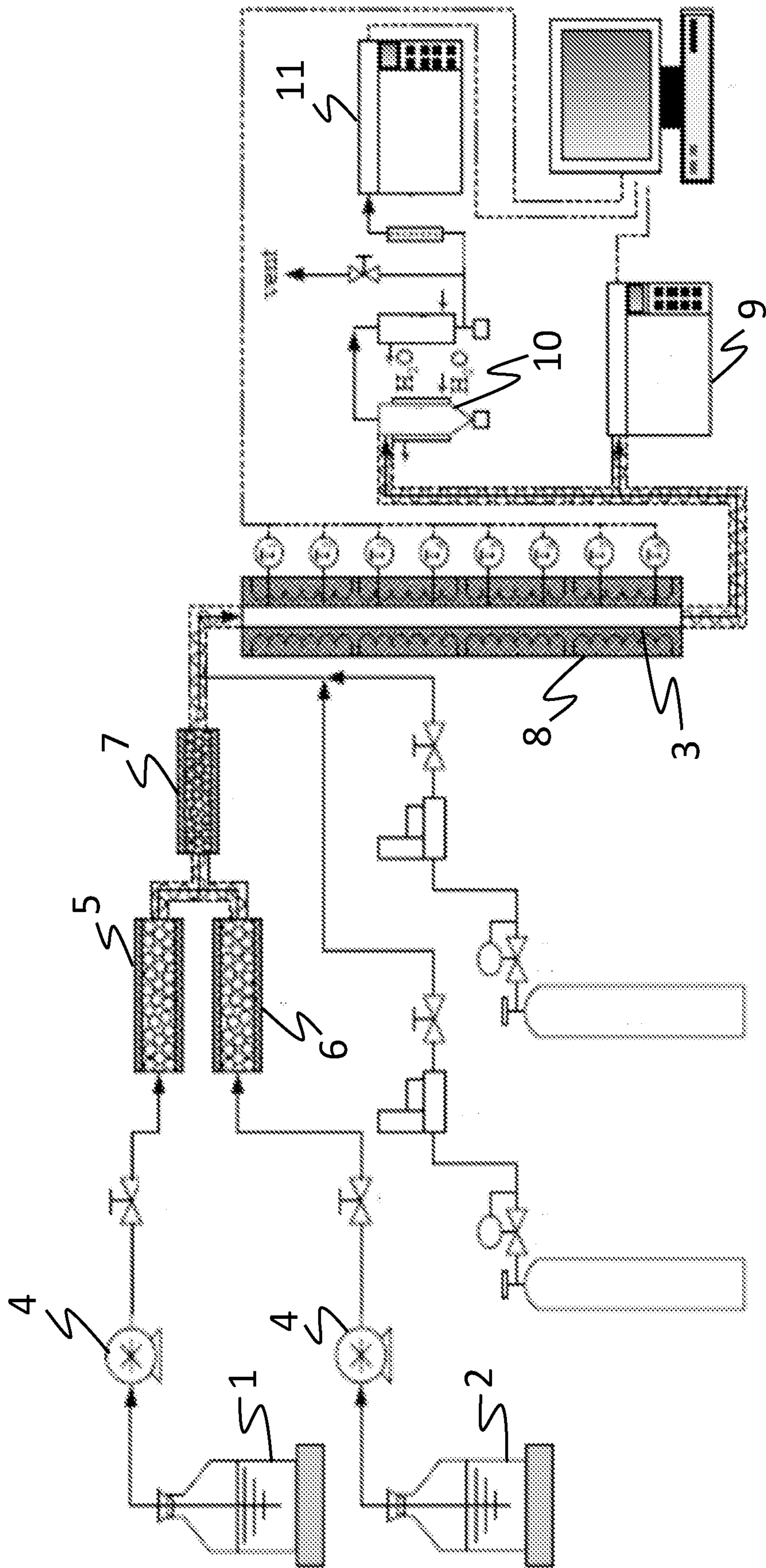


Fig. 1

Klassifikation des Anmeldungsgegenstands gemäß IPC:

C10G 9/00 (2006.01); C10G 9/36 (2006.01); C10G 57/02 (2006.01); C10L 1/04 (2006.01)

Klassifikation des Anmeldungsgegenstands gemäß CPC:

C10G 9/00 (2013.01); C10G 9/36 (2013.01); C10G 57/02 (2013.01); C10L 1/04 (2013.01)

Recherchierter Prüfstoff (Klassifikation):

C10G, C10L

Konsultierte Online-Datenbank:

EPODOC, WPI, Volltext-Patentdatenbanken EN und DE

Dieser Recherchenbericht wurde zu den am 07.02.2020 eingereichten Ansprüchen 1-23 erstellt.

Kategorie ^{*)}	Bezeichnung der Veröffentlichung: Ländercode, Veröffentlichungsnummer, Dokumentart (Anmelder), Veröffentlichungsdatum, Textstelle oder Figur soweit erforderlich	Betreffend Anspruch
X	WO 2016058953 A1 (TOTAL RESEARCH & TECHNOLOGY FELUY [BE]) 21. April 2016 (21.04.2016) Seite 1, Zeilen 10-13; Tabellen 4 und 6	22, 23
A	Das ganze Dokument	1-21
X	WO 2014111598 A2 (TOTAL RESEARCH & TECHNOLOGY FELUY [BE]) 24. Juli 2014 (24.07.2014) Tabelle 8	22
A	Das ganze Dokument	1-21, 23
A	EP 3095844 A1 (NESTE OYJ [FI]) 23. November 2016 (23.11.2016) Das ganze Dokument	1-23

Datum der Beendigung der Recherche:

23.07.2020

Seite 1 von 1

Prüfer(in):

ENGLISCH Julia

*) Kategorien der angeführten Dokumente:

- X** Veröffentlichung **von besonderer Bedeutung**: der Anmeldungsgegenstand kann allein aufgrund dieser Druckschrift nicht als neu bzw. auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden.
- Y** Veröffentlichung **von Bedeutung**: der Anmeldungsgegenstand kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren weiteren Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese **Verbindung für einen Fachmann naheliegend** ist.

- A** Veröffentlichung, die den allgemeinen **Stand der Technik** definiert.
- P** Dokument, das von **Bedeutung** ist (Kategorien **X** oder **Y**), jedoch **nach dem Prioritätstag** der Anmeldung veröffentlicht wurde.
- E** Dokument, das **von besonderer Bedeutung** ist (Kategorie **X**), aus dem ein „**älteres Recht**“ hervorgehen könnte (früheres Anmeldedatum, jedoch nachveröffentlicht, Schutz ist in Österreich möglich, würde Neuheit in Frage stellen).
- &** Veröffentlichung, die Mitglied der selben **Patentfamilie** ist.