

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
1.1. Nachwachsende Rohstoffe für die chemische Industrie	1
1.2. Grundlegende Entwicklung der Nutzung von Schmierstoffen	3
1.3. Schmierstoffe	4
1.4. Green Chemistry	5
1.5. Funktionalisierung von Oleochemikalien	7
1.5.1. Epoxidierung	9
1.5.1.1. Epoxidierung mit Wasserstoffperoxid	9
1.5.1.2. Epoxidierung mit molekularem Sauerstoff	12
1.5.1.3. Weitere Möglichkeiten zur Epoxidierung	14
1.6. Industrielle Synthese einiger wichtiger Grundchemikalien	14
1.6.1. Wasserstoffperoxid-Synthese	14
1.6.2. Das Doppelkontaktverfahren	15
1.6.3. Die Synthese von <i>iso</i> -Butanol	16
1.6.4. Essigsäure-Synthese	16
1.7. Reaktionskalorimetrie	16
1.8. Überkritisches Kohlendioxid als Reaktionsmedium	17
1.9. Life Cycle Assessment	18

2. Aufgabenstellung	21
I. Schmierstoffsynthese	23
3. Ergebnisse der Schmierstoffsynthese	25
3.1. Satzweise Synthese von Schmierstoffen	25
3.2. Optimierung der Schmierstoffsynthese auf ver- schiedene Substrate	28
3.2.1. Untersuchungen zur Epoxidierung von Öl- säuremethylester (OME)	29
3.2.1.1. Untersuchung der Vergleichbar- keit von Kalorimeter und Pilot- anlage	29
3.2.1.2. Variation der Persäure	31
3.2.1.3. Variation des Substrates	32
3.2.2. Untersuchungen zur Alkoholysereaktion	34
3.2.2.1. Variation der Schwefelsäurekon- zentration	34
3.2.3. Raum-Zeit-Ausbeute	37
3.2.4. Reproduzierbarkeit	39
3.3. HIGTS	41
3.4. gPROMS-Modell der Epoxidierungsreaktion . .	43
3.4.1. Ergebnisse der Simulation	47
3.5. Korrelation zwischen Homogenität und Pour Point	55
3.6. Kennzahlenbestimmung zur Qualitätssicherung	59

4. Schmierstoffsynthese mit O_2 in $scCO_2$	61
4.1. Epoxidierung von OME mit molekularem Sauerstoff	61
4.1.1. Optimierung der Betriebstemperatur	69
4.1.2. Das Nebenprodukt HHSM	73
4.1.3. Epoxidierung von technischem OME	74
4.2. Alkoholyse des mit O_2 epoxidierten e-SME	75
 5. Experimenteller Teil	 83
5.1. Synthesen im Reaktionskalorimeter	83
5.1.1. Epoxidierung	83
5.1.2. Alkoholyse	84
5.2. Synthese in der Pilotanlage	85
5.2.1. Epoxidierung	85
5.2.2. Alkoholyse	85
5.3. Reinsynthesen	86
5.3.1. Epoxidierung	86
5.3.2. Alkoholyse	87
5.4. Synthese von e-SME zur Untersuchung der Kinetik	87
5.5. Epoxidierung mit molekularem Sauerstoff	88
5.6. Alkoholyse des mit Sauerstoff epoxidierten OME	88
 II. Ökobilanz der Schmierstoffsynthese	 91
 6. Umberto-Simulation	 93
6.1. Betrachtete Szenarien	100
6.1.1. Szenario 1: Synthese mit Lösungsmittel, ohne Recycling	100

6.1.2.	Szenario 2: Synthese ohne Lösungsmittel, ohne Recycling	103
6.1.3.	Szenario 3: Synthese ohne Lösungsmittel, mit Recycling	106
6.1.4.	Szenario 4: Synthese mit H_2SO_4 , mit Recycling	108
6.1.5.	Szenario 5: Synthese mit O_2 / H_2SO_4 , mit Recycling	110
6.1.6.	Verwendung verschiedener Grundöle . .	112
6.2.	Die Kohlendioxid-Bilanz	112
6.3.	Der biologische und chemische Sauerstoffbedarf	114
6.4.	Die Kosten	116
6.5.	Die Energiebilanz	119
7.	Zusammenfassung	123
8.	Ausblick	127
9.	Analytik	129
9.1.	Gaschromatographie	129
9.2.	Kinematische Viskosität	129
9.3.	Pour Point	131
9.4.	Kennzahlen der Schmierstoffe	132
9.4.1.	Neutralisationszahl (NZ)	132
9.4.2.	Verseifungszahl (VZ)	132
9.4.3.	Jodzahl (JZ)	133
9.4.4.	Peroxidzahl (POZ)	133
9.4.5.	Epoxidindex (EI)	133
9.5.	Wassergehaltsbestimmung nach Karl Fischer . .	134
	Literaturverzeichnis	137

A. Daten zur Epoxidierung mit Sauerstoff	149
B. Lebenslauf	153