

SOUHRN

Práce se zabývala studiem katalytické mokré oxidace modelového polutantu vod, fenolu, ve vsádkovém reaktoru za katalytického působení aktivního uhlí.

Cílem práce bylo experimentální rychlosti a selektivity oxidace fenolu a jeho oxidačních meziproductů vzhledem k reakčním podmínkám, tj. koncentraci rozpuštěného reaktantu, teplotě, tlaku, množství katalyzátoru, stupně využití vnitřního povrchu katalyzátoru a pH. Na základě bilančních modelů složek byly také identifikovány parametry kinetických rovnic.

Oxidace 250 ml vodného roztoku fenolu byla prováděna v 500 ml míchaném nerezovém autoklávu se suspendovaným drceným a výtlačkovým katalyzátorem –aktivním uhlím. Oxidace byla vedena v rozmezí teplot 120 - 160 °C a celkového tlaku 1 – 7 MPa, v rozmezí koncentrací fenolu 0,5 – 7 g/l a katalyzátoru 0,15 – 0,5 g. Všechny vzorky byly analyzovány pomocí HPLC chromatografie a semimikrometody CHSK. Experimenty byly vyhodnoceny pomocí programu EXCEL a k vyhodnocení kinetických modelů bylo využito nelineární regrese pomocí programu ASPEN PLUS a MATLAB. Pro popis chování mokré oxidace fenolu byly formulovány tři matematické modely a jejich parametry byly identifikovány z experimentálních dat. Tyto modely předpokládaly zjednodušenou mocninovou kinetiku s jednotkovým řádem reakce vůči fenolu a ostatním sloučeninám a půltým řádem ke kyslíku. První a druhý popisoval oxidaci individuálních sloučenin. Třetí model byl založen na úbytku chemické spotřeby kyslíku a čtvrtý model uvažoval autokatalytický průběh reakce. Byly určeny rychlostní konstanty a aktivační energie pro všechny vznikající sloučeniny.

Vývoj selektivity byl sledován na použitém katalyzátoru. Na granulovaném katalyzátoru byla dosažena vyšší selektivita oxidačních meziproductů než na práškovém katalyzátoru. Ze sledovaných experimentů vyplynulo, že oxidace samotného fenolu je rychlým krokem, pomalým a rychlost určujícím krokem reakce je především oxidace vznikajících meziproductů, zejména dikarboxylových kyselin jako jsou štavelová a maleinová.

Název diplomové práce: Selektivita katalytické oxidace fenolu

Studijní obor: Technologie organických látek

Diplomantka: Helena Nedvěďová

Vedoucí práce: Doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.