

## Studentská vědecká konference 2003

### Sekce: ORGANICKÁ TECHNOLOGIE I ORGANICKÁ TECHNOLOGIE II

Ústav organické technologie, 21.11.2003  
Zahájení v 9:00 hodin, budova A, posluchárna A01

#### **Komise (ústav 111):**

předseda: Prof. Ing. J. Hanika, DrSc.  
členové: Doc. Ing. B. Dvořák, CSc.  
Doc. Ing. Z. Bělohav, CSc.  
Doc. Ing. V. Tukač, CSc.  
Doc. Dr. Ing. P. Klusoň  
Ing. L. Kurc, CSc.  
Ing. J. Krupka  
tajemník: Ing. P. Zámotný, PhD

#### **Přihlášeno: 17 účastníků**

<b>5. ročník:</b>	<b>vedoucí:</b>
BŘENKOVÁ Lucie	Prof. Hanika
ČIHAŘOVÁ Renata	Prof. Hanika
DROBEK Martin	Doc. Klusoň
DUDKOVÁ Iva	Doc. Dvořák
HAERINGOVÁ Petra	Prof. Červený
KOPŘIVOVÁ Klára	Ing. Kačer
MATĚJOVÁ Lenka	Prof. Horák
PATERA Jan	Ing. Krupka
PAVLAČKOVÁ Zuzana	Ing. Petrisko
ROHLÍK Václav	Doc. Tukač
ŠIMÍČKOVÁ Martina	Doc. Tukač
VOJTOVÁ Daniela	Doc. Bělohav

<b>4. ročník:</b>	
KARHÁNEK David	Ing. Kačer
MELEŽÍNKOVÁ Lenka	Ing. Petrisko
STARKBAUMOVÁ Lucie	

<b>3. ročník:</b>	
HRÁDEL Jiří	
KALČÍKOVÁ Jana	

## **Citlivostní analýza procesu mokré granulace léčiv**

Autor: Lucie Břenková  
Ročník: 5.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc., Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Cílem práce bylo zhodnotit vliv distribuce velikosti a tvaru částic účinných látek, množství vody a počáteční teploty vsádky na dobu granulace, nárůst teploty během granulace, na sytnou hustotu granulátu a na konečný příkon hlavního míchadla. Vlastnosti účinných látek byly hodnoceny síťovou analýzou, sytnou a setřesnou hustotou. Experimenty probíhaly v provozním a poloprovozním granulátoru v a. s. Zentiva – Léčiva. Analýzou experimentálních dat bylo zjištěno, že na průběh granulace má rozhodující vliv velikost krystalů účinné látky, množství přidávané vody a počáteční teplota vsádky. V souvislosti s tímto závěrem byly analyzovány vlastnosti účinných látek ještě před naplněním granulátoru, přímo ve skladovacích sudech. Bylo zjištěno, že v některých sudech jsou výrazné rozdíly v distribuci velikosti částic účinné látky nejen v různých, ale i ve stejných výrobních šaržích. V souladu s výsledky citlivostní analýzy lze proto různou distribucí velikosti částic účinných látek označit za pravděpodobně hlavní příčinu nežádoucího kolísání doby granulace a tím i různého nárůstu teploty vsádky v provozních podmínkách.

## **Studium chování zkrápěných reaktorů s pevným katalytickým ložem a vliv periodického nástřiku na jejich výkon**

Autor: Renata Čihařová  
Ročník: 5.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc.

Třífázový zkrápěný reaktor bývá většinou provozován v režimu filmového toku, přičemž kapalina stéká po vrstvě katalyzátoru ve formě laminárního filmu. Kontakt plynné a kapalné fáze je při tomto režimu nedostatečný a z tohoto důvodu je rychlost chemické reakce určena odporem přenosu tepla a hmoty. Periodickým dávkováním kapalné směsi do reaktoru můžeme ovlivnit režim, ve kterém reakce probíhá a současně může dojít k ovlivnění výkonu reaktoru. Výhodou změny režimu filmového toku na pulsní režim je intenzivnější přenos tepla a hmoty mezi fázemi a tím i dosažení zvýšení výkonu reaktoru.

Úkolem studie je sestavení matematického modelu popisujícího chování zkrápěného reaktoru řízeného periodickým zvyšováním průtoku kapalné fáze. Model je založen na výzkumu a datech, která byla získána na Politecnico di Torino v Itálii.

## **Stereoselektivní hydrogenace methyl 3 - oxobutyrátu za použití enantioselektivních katalyzátorů na bázi Ru – BINAP chirálních komplexů**

Autor: Martin Drobek  
Ročník: 5.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: doc. Dr. Ing. Petr Klusoň

Práce se zabývá problematikou hydrogenace ketonických látek (methyl 3 – oxobutyrátu) na alkohol (methyl 3 – hydroxybutyrát) s definovanou absolutní *R* nebo *S* konfigurací na asymetrickém uhlíku. K tomuto účelu byl použit homogenní katalyzátor [2,2'- bis(difenylfosfino) – 1,1'- binaftyl] chloro (p-cymen) ruthenium chlorid. Důraz byl kladen především na studium stability a aktivity komplexu při jeho syntéze i následné hydrogenaci v závislosti na reakčních podmínkách (teplota, tlak). Dále bylo provedeno testování citlivosti komplexu k deaktivacím vlivům vody a kyslíku. Hydrogenace byly provedeny za tlaku 5 MPa a teploty 50°C v homogenní fázi a bylo dosaženo optické čistoty produktu kolem 95%. Rovněž byla studována stabilita imobilizovaného komplexu v systému nosič – heteropolykyselina ( $H_3PW_{12}O_{40}$ ) - komplex. Bylo zjištěno, že zachycení na aktivním uhlí je účinnější než zachycování komplexu na oxidických nosičích jako jsou  $TiO_2$  nebo  $\gamma-Al_2O_3$ .

## **Katalyzátor pro hydrogenaci methylesterů mastných kyselin.**

Autor: Iva Dudková  
Ročník: 5.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Hydrogenace methylesterů mastných kyselin je důležitým, v průmyslové praxi realizovaným procesem na výrobu mastných alkoholů. Tento proces je urychlován Cu-, Ni-, nebo Cu-Zn katalyzátory, nejčastěji však tzv. Adkinsovým, měďnatochromitým katalyzátorem. Lineární mastné alkoholy  $C_{12} - C_{18}$  jsou surovinovou základnou pro syntézu povrchově aktivních látek, tenzidů. Jedním z problémů heterogenně katalyzované hydrogenace, technologicky realizované v suspenzních i zkrápěných reaktorech, je rozpouštění kovové mědi kyselými reakčními meziprodukty. Úkolem této úvodní studie bylo:

- vyzkoušet funkčnost a reprodukovatelnost převzaté experimentální metodiky na měření rozpustnosti měďnaté složky v katalyzátorech,
- porovnat rozpustnost  $Cu^{2+}$  složky  $CuCr_2O_4$  katalyzátoru N201 japonské fy NIKKY CHEM.CO., Ltd. s uvedenou vlastností původních, cíleně modifikovaných a v tuzemsku vyráběných Cu-katalyzátorů.

Bylo zjištěno, že reprodukovatelnost užití metodiky je lepší než 4 rel.%. Naměřené výsledky ukázaly, že metodika umožňuje spolehlivé rozlišení rezistence  $Cu^{2+}$ , dispergované v jednotlivých katalyzátorech, vůči rozpouštění v 10% kyselině octové. Rozpustnost  $Cu^{2+}$  vzorku tuzemského katalyzátoru ESR 491 P fy Eurosupport Manufacturing Czechia, s.r.o. je poloviční v porovnání se vzorkem katalyzátoru Adkinsova typu.

## **Příprava Cetonalu - vonné látky na bázi iononů**

Autor: Petra Haeringová  
Ročník: 5.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Práce se zabývá studiem hydrogenace 2-methyl-4-(2,6,6-trimethylcyklohex-1-enyl)-but-2-enalu na 2-methyl-4-(2,4,4-trimethylcyklohex-1-enyl)-butyraldehyd, komerčně nazývaný Cetonal. Cílem práce bylo nalezení optimálních podmínek uvedené regioselektivní hydrogenace pro přípravu Cetonalu s vhodnými sensorickými vlastnostmi. Hlavní pozornost byla věnována posouzení vlivu typu katalyzátoru (Pd/C, Pt/C, Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Raney-Ni), vlivu teploty (20 - 180 °C) a tlaku vodíku (0,1 - 8 MPa). Značná pozornost byla rovněž věnována vlivu typu rozpouštědla a poměru rozpouštědlo : substrát, jelikož tyto parametry měly zásadní vliv na reaktivitu a selektivitu výše uvedené reakce. Následující parametry byly shledány optimálními podmínkami technologie: katalyzátor Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, teplota 120 °C, tlak 6 MPa, poměr rozpouštědlo : substrát = 20 : 80. Analytický výtěžek reakce činí cca 85 %, čistota produktu je 97 %. Na základě uvedených optimalizačních experimentů byl navržen pracovní postup pro poloprovozní testy v současné době realizované v podniku Aroma Praha.

## **Laboratorní pyrolýza cykloalkanů**

Autor: Martin Hrádel  
Ročník: 3.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Pyrolýzní duální plynová chromatografie byla využita ke studiu chování nejdůležitějších cykloalkanů v primárních benzinech – cyklopentanu a cyklohexanu. Testována byla pyrolýza samotných cykloalkanů i jejich směsí s typickým primárním benzinem (25, 50 a 75 hm. %). Z výsledků laboratorních pokusů vyplynulo, že pyrolýza cykloalkanů ve směsi s benzinem vede k výrazně odlišným výtěžkům hlavních pyrolýzních produktů v porovnání s pyrolýzou individuálních uhlovodíků. Příčinou změny chování je odlišný mechanismus pyrolýzy především ve fázi propagace radikálových řetězců. Odvozené přibližné mechanismy pyrolýzních reakcí testovaných cykloalkanů byly zároveň konfrontovány s publikovanými, často zcela protichůdnými hypotézami o chování cykloalkanů během jejich pyrolýzy.

## **Matematické modelování mokré granulace léčiv**

Autor: Jana Kalčíková  
Ročník: 3.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Mokrá granulace léčiv je jedním ze základních procesů výroby pevných lékových forem. Kromě výsledků experimentů a údajů z provozních listů lze k optimalizaci provozu míchaných granulátorů využít výsledky simulací s matematickými modely. Pro simulační výpočty byly navrženy dva modely – ryze empirický model a semimechanistický model provozního resp. poloprovozního granulátoru. Empirický model je určen k predikci provozních parametrů (doba granulace, teplotní nárůst vsádky, sypná hustota granulátu) v závislosti na kvalitě granulované směsi (sypná a setřesná hustota suroviny, množství vody) a počáteční teplotě granulace. Semimechanistický model je využíván k přenosu dat z poloprovozního granulátoru do provozních podmínek. Empirický model představuje umělá neuronová síť, semimechanistický model obsahuje podrobný popis tvorby a rozpadu granulí v ideálně míchané nádobě s výměnou tepla do okolí. Identifikace parametrů obou modelů vychází z výsledků poloprovozních a provozních experimentů v a .s. Zentiva – Léčiva.

## **Pt(0) komplexy jako modelové látky pro studium elektronických vlivů při katalytických hydrogenacích**

Autor: David Karhánek  
Ročník: 4.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Ing. Petr Kačer PhD.; Ing. Marek Kuzma;

Práce se zabývá studiem komplexů typu  $(\text{Ph}_3\text{P})_2\text{Pt}(0)$ -olefin, resp. studiem elektronických vlivů substituentů R vázaných v olefinu  $\text{CH}_2=\text{CH-R}$  na pevnost vazeb  $(\eta^2\text{-olefin})\text{-Pt}(0)$ . Ta je kvantitativně posuzována pomocí výpočtů chemického posunu  $^{13}\text{C}$  a  $^1\text{H}$  v prostředí Gaussian® 98W a porovnána s experimentálním měřením NMR chemických posunů. Výsledky jsou následně využity k vyjádření korelace mezi strukturou olefinu a stabilitou adsorbovaného komplexu s „homogenním katalyzátorem“  $(\text{Ph}_3\text{P})_2\text{Pt}(0)$ , případně heterogenním Pt-katalyzátorem, jehož povrch nelze jednoznačně modelovat a jsou pro něj k dispozici hodnoty relativních adsorptivit získané z hydrogenačních kinetických experimentů.

Pro teoretické výpočty geometrií jednotlivých molekul i predikci NMR parametrů byly použity metody DFT (*Density Functional Theory*) s vhodně zvolenými parametrizacemi od 6-31G(d) až 6-311G\*\*(d) pro lehčí prvky (P, O, C, H) a dále LANL2DZ, která s dostatečnou přesností popisuje koordinační sféru pro atom platiny. Výsledky jsou prezentovány ve formě změn hybridizace a řádu vazby C=C po interakci s homogenním resp. heterogenním katalyzátorem.

## **Enantioselektivní hydrogenace biacetylu na heterogenním cinchonidinem modifikovaném platinovém katalyzátoru**

Autor: Klára Kopřivová  
Ročník: 5.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Ing. Jana Šplíchalová

Práce se zabývá problematikou enantioselektivní hydrogenace vicinálního diketonu – biacetylu (butan-2,3-dion) na nosičovém platinovém katalyzátoru modifikovaném cinchonidinem. Pozornost byla věnována porovnání způsobů modifikace katalyzátoru cinchonidinem za přítomnosti kyslíku - aerobní *in situ* a aerobní *ex situ* modifikace. Vlastní enantioselektivní hydrogenace byla studována s cílem posouzení vlivu vybraných reakčních parametrů - tlaku, teploty, typu rozpouštědla a poměru katalyzátoru a modifikátoru na enantioselektivní průběh hydrogenace resp. na kinetické parametry - reakční rychlost a enantioselektivitu (ee). Bylo zjištěno, že poměrně vysokých enantioselektivních výtěžků (ee > 40 % ) bylo dosaženo při způsobu modifikace aerobní *in situ*, reakční teplotě 0 °C a tlaku 5 MPa. Poměr katalyzátoru a modifikátoru měl významný vliv na rychlost hydrogenace, zatímco vliv na enantioselektivní výtěžek byl téměř zanedbatelný (optimální poměr 2:1).

## **Matematický model kalorimetrického čidla pro identifikaci aktuální reaktivity směsi při exotermní reakci v režimu on-line**

Autor: Lenka Matějová  
Ročník: 5.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Prof. Ing. Josef Horák, DrSc.

Včasné rozpoznání nebezpečného stavu reaktoru je podmínkou bezpečného řízení. Jednou z příčin tzv. ujetí teploty ve vsádkovém reaktoru při exotermní reakci je příliš vysoká reaktivita reakční směsi. Úkolem studie bylo navrhnout adiabatické kalorimetrické čidlo umožňující vyhodnotit aktuální reaktivitu reakční směsi v režimu on-line. Kalorimetrické čidlo je nádoba, jejíž stěny jsou zhotoveny z materiálu s nízkou tepelnou vodivostí, v níž je senzor na měření teploty. Čidlo je umístěno v reakční směsi v chemickém reaktoru. Při určení reaktivity je čidlo ve zvoleném čase naplněno reakční směsí a uzavřeno.

K určení reakčních podmínek, za kterých je možné spolehlivě vyhodnotit aktuální reaktivitu směsi zpracováním údajů o průběhu teploty reakční směsi uvnitř čidla a v reaktoru, byl vytvořen simulační model reaktoru a čidla. Model byl odvozen pro reakci nultého řádu za předpokladu, že obsah reaktoru i čidla je dokonale promícháván, a že teplota v teplosměnném systému reaktoru je řízenou veličinou. K numerickému řešení diferenciálních rovnic byl vypracován software v programovacím jazyku MATLAB.

## Hydrogenace nitrilů v přítomnosti primárních aminů

Autor: Lenka Melezínková  
Ročník: 4  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Ing. Jiří Krupka

Hydrogenace nitrilů patří k významným metodám průmyslové přípravy řady důležitých aminů. Tato práce je součástí širší teoretické studie, jejímž cílem je rozšíření dosavadních poznatků o kinetice a mechanismu hydrogenace nitrilů. Předkládaná práce je věnována hydrogenaci nitrilů  $R^1-C\equiv N$  v přítomnosti primárního aminu  $R^2-CH_2-NH_2$  s alkylem odlišným od alkylu výchozího nitrilu. Na modelových reakčních systémech byl sledován vliv reakčních podmínek, struktury reaktantů a typu katalyzátoru na selektivitu reakce v kapalně fázi. Selektivita byla posuzována jednak z hlediska míry participování přidaného aminu na tvorbě sekundárních, resp. i terciárních aminů, a jednak z hlediska celkové tvorby vyšších (sek. a terc.) aminů. Mezi zajímavé výsledky práce patří i zjištění, že při hydrogenacích katalyzovaných Ni nebo Co obsahují reakční směsi v nezanedbatelných koncentracích i sekundární amin  $R^2-CH_2-NH-CH_2-R^2$ , jenž má oba alkylly shodné s alkylem přidaného aminu. V případě, že katalyzátorem byl Pd nebo Pt, nebyl tento amin detekován. Chemismus vzniku tohoto aminu byl diskutován.

## Selektivita hydrogenací nesymetrických sekundárních aldiminů

Autor: Jan Patera  
Ročník: 5.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Ing. Jiří Krupka

Práce se zabývá studiem hydrogenace nesymetrických sekundárních aldiminů, zejména pak vztahem mezi hydrogenačním katalyzátorem a tvorbou neobvyklých vedlejších produktů. Bylo zjištěno, že zatímco Pd a Pt katalyzátory vykazují pro hydrogenaci aldiminů typu  $R^1-CH=N-CH_2-R^2$  vysokou selektivitu na příslušný amin  $R^1-CH_2-NH-CH_2-R^2$ , selektivita Ni a Co katalyzátorů je značně nižší. Za katalýzy Ni a Co jsou dominantními složkami v hydrogenátu vedle  $R^1-CH_2-NH-CH_2-R^2$  též symetrické aminy  $R^1-CH_2-NH-CH_2-R^1$  a  $R^2-CH_2-NH-CH_2-R^2$ . V průběhu hydrogenace pak obsahují reakční směsi rovněž  $R^1-CH=N-CH_2-R^1$ ,  $R^2-CH=N-CH_2-R^2$  a  $R^2-CH=N-CH_2-R^1$ . Vznik těchto vedlejších produktů jsme vysvětlili migrací dvojně vazby kolem dusíkového atomu v molekule iminu  $R^1-CH=N-CH_2-R^2$ . K uvedené migraci dochází na Ni a Co katalyzátorech, a to výhradně za podmínek katalytické hydrogenace.

## Cyklizace ethylendiaminu na zeolitovém katalyzátoru

Autor: Zuzana Pavlačková  
Ročník: 5.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Ing. Miroslav Petrisko, CSc., Ing. Jiří Trejbal

Byly studovány cyklizační reakce ethylendiaminu na kyselém heterogenním katalyzátoru ZSM-5 při reakci v plynné fázi při teplotě 340 – 360 °C. Při těchto podmínkách probíhají substituční i eliminační reakce. V reakční směsi byly identifikovány látky jako piperazin, pyrazin a jejich deriváty, 1,4-diazabicyklo[2,2,2]oktan, ethylamin a další. Byly provedeny experimenty na katalyzátorech ZSM-5 s moduly 40, 45, 120, 200 (poměr prvků Si/Al). Substituční reakce vykazovaly maximum při použití katalyzátoru s modulem 120. Na katalyzátoru s modulem 40 byl zkoumán vliv molárního poměru amoniak : voda : ethylendiamin při konstantním celkovém molárním toku reaktorem. Bylo zjištěno, že s rostoucím obsahem vody v nástřiku vzrostl rozsah substitučních reakcí. Dále byl testován vliv amoniaku a dusíku použitých jako hnací plyny při konstantní koncentraci vody. Při poměru ethylendiamin : amoniak – 1 : 1 bylo zjištěno, že proběhly substituční reakce ve větší míře než při molárním poměru 1 : 5. Při použití dusíku jako hnacího plynu byly preferovány eliminační reakce.

## Čištění odpadního vzduchu z extrudéru

Autor: Václav Rohlík  
Ročník: 5.  
Ústav: ÚOT ( vypracováno na HTWK Leipzig – Energietechnik, SRN )  
Školitel: Dipl.- Ing. Karl – Heinz Dorn ( HTWK Leipzig )

Při polymerizaci methal-methacrylatu ( MMA ) na polyethylen-methacrylat ( PMMA ) se jako iniciátor polymerizace používá 2,2'- azoisobutyronitril ( AIBN ), který se ale asi z jedné poloviny rozkládá na tetramethylsuccinonitril ( TMSN ), který je prudce jedovatý, proto se musí ze směsi odstraňovat absorbcí do vhodného rozpouštědla.

Cílem této práce byla charakteristika rozpustností 5 různých pevných vzorků v různých rozpouštědlech s rozdílnou polaritou. Vzorky pocházely od firmy Barlo Plastics GmbH při separaci ze vzduchu v extrudéru při zpracování polymeru PMMA a polycarbonatu ( PC ) ve vakuu extrudéru. Pokusy se prováděly při teplotách 20°C, 40°C, 60°C a 80°C a porovnával se čas, za který se vzorky rozpustily. Na závěr byla zhotovena finanční analýza, kde se porovnávala rozpustnost, ztráta rozpouštědla při práci ve vakuu a cena. Jako nejlepší kompromis těchto vlastností se ukázalo průmyslové rozpouštědlo Genosorb 1843 při pracovní teplotě 45 °C.



## **Laboratorní pyrolýza zbytkové frakce C9**

Autor: Lucie Starkbaumová  
Ročník: 4.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Ing. Petr Zámostný Ph.D.

Ethylenová pyrolýza poskytuje širokou paletu produktů. Některé uhlovodíkové frakce jsou na trhu velmi obtížně uplatnitelné a alternativou k jejich spalování nebo nevýhodnému prodeji může být vrácení těchto produktů zpět do pyrolýzy, zpravidla formou kopyrolýzy recyklovaného proudu s vhodnou základní surovinou. Příkladem frakce, která se na pyrolýzní jednotce v Chemopetrolu Litvínov a.s. recykluje, je tzv. zbytková frakce C9 (ZC9), tvořená převážně substituovanými aromatickými a vícenenasycenými polycyklickými uhlovodíky.

Laboratorní pyrolýzu je možno využít k hodnocení výtěžků důležitých produktů. Ačkoliv výtěžky produktů neodpovídají zcela přesně výtěžkům dosaženým v provozním reaktoru, lze je dobře použít k relativnímu porovnání jednotlivých surovin. Laboratorní pyrolýzou byly otestovány vzorky surové ZC9 a produktů její selektivní hydrogenace. Zároveň byly s využitím GCMS identifikovány hlavní složky ZC9. Vliv jednotlivých složek ZC9 na celkové výtěžky pyrolýzy byl diskutován na základě výtěžků pyrolýzy cílených destilačních řezů ZC9.

## **Katalytické krakování olefinů**

Autor: Martina Šimíčková  
Ročník: 5.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Doc. Ing. V. Tukač, CSc.

S rostoucí poptávkou po propylenu a snahou o hlubší využití ropných surovin se pozornost zaměřuje na využití  $C_4 - C_6$  frakcí pro výrobu propylenu a ethylenu. Štěpení vazeb C – C slouží ke zpracovávání výševroucích ropných frakcí zejména výševroucích olejů a mazutu. Katalytické krakování je endotermní proces probíhající na kyselém katalyzátoru přes tvorbu karboniového iontu, která je rychlost určujícím krokem procesu. Současně může probíhat řada izomeračních reakcí, které jsou ovlivněny chemickou rovnováhou.

Cílem této práce je vyhodnotit experimentální testování krakovacích katalyzátorů provedené na výzkumné jednotce v Chemopetrolu Litvínov s modelovou látkou 1-hexenem, za tlaku 150 kPa a v rozmezí teplot 450 – 500°C. Pomocí programu Aspen Plus byla vytvořena počítačová simulace daného procesu. Model krakování zahrnoval průtočný ideálně míchaný katalytický reaktor, pro popis probíhajících chemických reakcí bylo užito zjednodušené reakční schéma se zástupnými látkami. Nelineární regresí byly identifikovány kinetické parametry modelu a s využitím databáze programu byly spočteny termodynamické rovnovážné konstanty a složení rovnovážných reakcí. Nejvýznamnější výsledky byly srovnány s experimentálně zjištěnými hodnotami pro řady dat stanovené pro dva různé katalyzátory.

## **Využití pyrolýzní plynové chromatografie k hodnocení surovin ethylenové pyrolýzy**

Autor: Daniela Vojtová  
Ročník: 5.  
Ústav: organické technologie  
Školitel: Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc., Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Častým úkolem provozní ethylenové pyrolýzy je hodnocení kvality benzinů, atmosférických plynových olejů a destilačních zbytků z hydrokrakování z hlediska výtěžků žádaných produktů. Je proto zkoumána možnost hodnocení surovin pyrolýzou v laboratorním reaktoru spojená s následnou transformací získaných dat do provozních podmínek.

V pyrolýzním mikroreaktoru plynového duálního chromatografu bylo pyrolýzováno přibližně 25 vzorků surovin, které byly současně pyrolýzovány na průmyslových reaktorech typu SRTIII a GK 6 při experimentech v Chemopetrolu Litvínov.

Pro přenos dat z laboratorního reaktoru do provozních podmínek byla použita umělá neuronová síť. Vstupy neuronové sítě byly zastoupeny 15 parametry: specifickým zatížením provozních reaktorů, ředícím poměrem pára/surovina, výstupní a výstupní teplotou reakční směsi na vlásenkách typu GK 6 a SRT III, dále indexem BMCI pyrolýzovaných surovin a laboratorními výtěžky 10 nejdůležitějších produktů pyrolýzy. Jako optimální se ukázala třívrstvá dopředná neuronová síť se dvěma skrytými vrstvami neuronů.