Vliv co-solventu a nosiče niklového katalyzátoru na reduktivní depolymeraci polykarbonátu na bisfenol A

Jméno: Bc. Artur Chanyshev

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Miloš Auersvald, Ph.D.

Cílem tohoto projektu je přispět k rozvoji udržitelných technologií recyklace plastů a podpořit cirkulární ekonomiku prostřednictvím chemické recyklace polykarbonátu (PC) za účelem získání monomeru (bisfenolu A) a jeho derivátů. Experimentální postup zahrnuje rozpuštění polykarbonátu v tetrahydrofuranu a následnou katalytickou reduktivní depolymerizaci. Reakční produkty jsou analyzovány dvoudimenzionální plynovou chromatografií s plamenově ionizačním a hmotnostně spektrometrickým detektorem. Během pilotních experimentů na průtočném reaktoru s pevným ložem katalyzátoru na bázi redukovaného niklu na alumině bylo zjištěno, že adsorpční vlastnosti bisfenolu A na katalyzátoru (jak na niklu, tak zejména na nosiči) komplikují průběh depolymerace. Konkrétně BPA blokoval aktivní centra, což vedlo k rychlé deaktivaci katalyzátoru s rostoucím časem provozu. Byly zkoumány možnosti eliminace této postupné deaktivace prostřednictvím konkurenční adsorpce a změny nosiče katalyzátoru. V rámci prezentace budou diskutovány výsledky tohoto probíhajícího projektu se zaměřením na: i) vliv teploty a tlaku, ii) vliv co-solventu (konkurenčního adsorbentu), a iii) vliv alternativního nosiče niklového katalyzátoru na míru konverze PC a výtěžek bisfenolu A.

Porovnání univerzální frakce 150–250 °C s reálnými a alternativními vzorky petroleje

Jméno: Bc. Anastasiia Deriugina

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Bc. Hugo Kittel, CSc., MBA

Petrolej představuje významnou ropnou frakci s využitím jako kvalitní komponenta motorové nafty, letecké palivo, petrolej na svícení, topení a jako čistící prostředek. Vzhledem k rozmanitým možnostem jeho využití je důležité sledovat jeho složení a vlastnosti, které ovlivňují kvalitu uvedených produktů. Cílem studie bylo připravit a posoudit možnosti univerzálního využití petrolejové frakce s destilačním rozmezím 150–250 °C pro tyto produkty. Z frakcí těžkého benzínu, petroleje a plynového oleje byla v souladu s jejich reálnými výtěžky připravena směs, ze které byla laboratorní vícestupňovou destilací získána petrolejová frakce 150–250 °C. Byl vypočítán výtěžek této frakce. Pro výchozí suroviny a získanou frakci petroleje byly stanoveny hustota, viskozita, elementární složení, obsah aromatických uhlovodíků a simulovaná destilace, u vzorků petroleje dále výška nečadivého plamene. Získané výsledky byly porovnány s vlastnostmi reálných a alternativních vzorků petroleje a s kvalitativními požadavky pro jednotlivé oblasti využití. Na základě tohoto porovnání byla posouzena možnost univerzálního využití připravené petrolejové frakce 150-250 °C.

Dve metódy, jedno číslo kyslosti

Jméno: Bc. Jakub Majorský

Ročník studia: M1

Školitel: Ing. Miloš Auersvald, Ph.D.

Stanovenie čísla kyslosti TAN predstavuje dôležitý analytický parameter pri hodnotení kvality olejov, mazív a surovín určených na rafinérske a petrochemické spracovanie. Zvýšená kyslosť môže ovplyvniť korozívne vlastnosti materiálu, jeho stabilitu, spracovateľnosť a vhodnosť na ďalšie technologické využitie. Osobitnú analytickú výzvu predstavujú komplexné matrice alternatívnych surovín získaných termochemickou konverziou biomasy a plastov. Tieto materiály sa môžu vyznačovať vysokou variabilitou zloženia, intenzívnym sfarbením, zvýšenou viskozitou, obsahom vody, nerozpustných podielov a ďalších zložiek, ktoré môžu ovplyvňovať priebeh titrácie a spoľahlivosť určenia koncového bodu.

V rámci prezentácie budú predstavené a porovnané dva spôsoby stanovenia čísla kyslosti (TAN) v ropných produktoch, olejoch a alternatívnych surovinách – potenciometrická a termometrická titrácia. Pozornosť bude venovaná princípom detekcie koncového bodu, príslušným normám ASTM a praktickým skúsenostiam s využitím oboch metód

Diskutované budú hlavné výhody a obmedzenia jednotlivých prístupov z hľadiska spoľahlivosti výsledkov, rýchlosti analýzy, nárokov na obsluhu a prevádzkových nákladov. Na príkladoch z laboratórnej praxe budú priblížené problémy spojené s potenciometrickým stanovením, najmä starostlivosť o elektródu, stabilizácia signálu, životnosť senzora a náklady na jeho výmenu. Termometrická titrácia bude predstavená ako alternatíva s nízkymi nárokmi na údržbu a potenciálom na analýzu problematických vzoriek.

Copper catalyst for ester hydrogenolysis – the role of Cu-loading

Jméno: Marie Sedláčková

Ročník studia: B3

Školitel: Ing. Jaroslav Aubrecht, Ph.D.

Hydrogenolysis is one of the main processes used for alcohol production from esters. Alcohol demand continues to rise, and the current industrial catalyst is not meeting the requirements of green chemistry. This catalyst contains chromium, which is a toxic metal, problematic to remove and dispose of. Therefore, researchers are actively working on developing a chromium-free alternative. One of the promising solutions is copper on silica catalyst.

My goal is to determine the role of Cu-loading on the catalyst properties and activity before, during, and after the ester hydrogenolysis. For the catalyst synthesis, three methods and four loadings (4, 6, 8 and 12 %) were chosen. The model reaction was methyl butyrate hydrogenolysis and the conversion took place in an autoclave. Various characterization methods e.g. XRD, FTIR and TPR were used for evaluation of structural properties changes, as well as GC for the evaluation of catalyst activity and selectivity. From these values, effectiveness was calculated.

Understanding connections between Cu-loading, structure and performance of the catalyst is crucial for future development.

Testování kombinované adsorpčně-methanizační jednotky

Jméno: Bc. Anatolii Shestak

Ročník studia: M2

Školitel: doc. Ing. Karel Ciahotný, CSc.

Příspěvek se zabývá vývojem přepravitelné testovací jednotky pro technologii Power-to-Gas (P2G), která řeší částečné využití oxidu uhličitého pro výrobu udržitelných paliv. Testovací jednotka umožňuje in-situ konverzi CO_2 ze spalin na methan, nebo produkci koncentrovaného CO_2 vhodného pro kompresi a následné geologické ukládání.

Zařízení na úrovni technologické připravenosti TRL 5 bylo zkonstruováno jako kompaktní modul a převezeno k reálnému zdroji spalin do provozu Ško-Energo, s.r.o., kde probíhala jeho verifikace k dosažení TRL 6. V reaktoru byly testovány dva duální materiály (adsorbent/katalyzátor) na bázi niklem modifikovaných nosičů γ-Al_2O_3 a Envisorb B+.

Provozní testy potvrdily plnou funkčnost konceptu adsorpce a následné reakce v rámci jednoho reaktoru. Materiál na bázi γ-Al_2O_3 vykazoval průměrnou konverzi CO_2 na methan 72 %, zatímco Envisorb B+ dosáhl pouze 2,8 % a ukázal se jako nevhodný. V rámci dalších testů bude řešen vliv vody na methanizaci oxidu uhličitého.

Kinetic modeling of anisole hydrodeoxygenation reactions

Name: Bc. Yeva Tsypko

Year of study: M2

Supervisor: prof. Ing. David Kubička, Ph.D., MBA

The conversion of biomass into biofuels and high-value chemicals contributes to the development of sustainable technologies. Lignin, a major component of biomass, can be depolymerized into monomeric compounds that require further upgrading. Catalytic hydrodeoxygenation is an important route for converting these oxygen-containing compounds into useful products. Its performance depends on the catalyst and reaction conditions, including temperature and pressure. Experimental data can be used to develop kinetic models that describe reaction rates and product distributions, supporting the prediction and optimization of catalytic performance. This work investigates the hydrodeoxygenation of anisole, a model compound of lignin-derived oxygenates, over an alumina-supported nickel catalyst. The aim is to develop a kinetic model by fitting reaction parameters to experimental data and to describe the behavior of the reaction system under the investigated conditions.

Studium degradace kovů v prostředí tekutého olova při teplotě 520 °C

Jméno: Tadeáš Vyleťal

Ročník studia: B3

Školitel: Ing. Berka Jan, Ph.D.

Tato studentská práce se zabývá studiem korozních vlastností materiálu před a po expozici v prostředí kapalného olova (Pb) za podmínek simulujících reálný provoz pokročilých jaderných systémů typu SMR LFR IV. generace. Experimentální část je zaměřena na analýzu různých oblastí základního materiálu, které byly vystaveny statickým podmínkám při teplotě 520 °C po dobu 3000 hodin.

Před expozicí byly vzorky charakterizovány z hlediska mikrostruktury a chemického složení s cílem stanovit výchozí stav materiálu. Následně je hodnocen vliv dlouhodobého působení kapalného olova na degradační procesy, zejména korozi, difuzi prvků a změny mikrostruktury, které mohou ovlivnit celkovou integritu materiálů.

Výsledky práce přispějí k hlubšímu pochopení interakcí mezi konstrukčními materiály a kapalným kovem v extrémních podmínkách a poskytují důležité poznatky pro návrh a bezpečný provoz komponent v jaderných reaktorech IV. generace.

Pyrolýza PolyAl jako cesta k cirkularitě nápojových kartonů

Jméno: Bc. Vít Vyskočil

Ročník studia: M1

Školitel: Ing. Miloš Auersvald, Ph.D.

Recyklace vícevrstvých obalových materiálů, jako jsou nápojové kartony typu Tetra Pak, představuje velkou výzvu. Tetra Pak se skládá z přibližně 75 % papíru, 20 % polyethylenu a 5 % hliníkové fólie. V průmyslové praxi převládá mechanická recyklace, jejímž výsledkem jsou například stavební desky. Pokročilejší přístup zhodnocení je založen na rozvlákňování papíru pro jeho recyklaci a zbývající polyethylen-hliníková směs (PolyAl) se pak zpracovává na granulát nebo se rovnou spaluje pro získání energie. Perspektivnější variantou je chemická recyklace, která by umožnila efektivně oddělit plast od hliníku a následně je chemicky opětovně využít bez výrazné ztráty kvality. Mezi metody umožňující chemickou recyklaci PolyAlu patří pyrolýza, tedy tepelný rozklad materiálu v inertní atmosféře. Výhodou pyrolýzy je její schopnost zpracovávat směsné kontaminované materiály, což je pro vícevrstvé obaly zásadní. V případě PolyAlu umožňuje, aby hliník zůstal převážně v pevném produktu, zatímco většina plastu se přemění na pyrolýzní olej.

Cílem tohoto výzkumu je popsat vliv reakčních podmínek na výtěžky, složení a vlastnosti produktů pyrolýzy PolyAlu. Zvláštní pozornost je věnována tvorbě oleje s co nejnižším koncem destilace, což by zjednodušilo jeho následné zhodnocení v jednotkách parního krakování pro výrobu monomerů. Dále pak komplexní analýze vzniklého oleje (**Obrázek 1**) se zaměřením na jeho skupinové složení a charakterizaci kontaminantů, které limitují zpracování v parním krakování.



Obrázek 1: Peletovaný odpadní PolyAl (vlevo), těžký pyrolýzní olej (uprostřed), lehký pyrolýzní olej (vpravo)