

SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie

Chémia a technológie pre život

18. celoslovenská študentská vedecká konferencia
s medzinárodnou účasťou



Bratislava 9. 11. 2016

ISBN 978-80-227-4628-1

SCALE-UP A INTENZIFIKÁCIA VÝROBY CHEMICKÝCH ŠPECIALÍT S OHĽADOM NA BEZPEČNOSTNÉ LIMITY

Adriána Kačmárová

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9,812 37 Bratislava

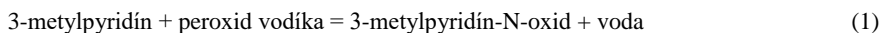
adriana.kacmarova@centrum.sk

Úvod

Žijeme vo svete, kde deň čo deň vidíme pokrok technológie a nárast populácie. Preto je dôležitú výrobu látok, ktoré sú nevyhnutné pre bytie, zintenzifikovať, no popritom nezaťažovať viac životné prostredie. Jednou z týchto látok je aj 3-metylpyridín-N-oxid, látka používaná vo farmaceutickom a agrochemickom priemysle, ako počiatočná surovina na výrobu antibiotík a iných druhov liečiv, herbicíd a insekticíd. Vyrába sa z 3-metylpyridínu oxidáciou peroxidom vodíka. V súčasnosti sa vyrába v poloprietokovom reaktore pri atmosférickom tlaku. Účelom tejto práce je povýšiť nový druh výroby z laboratórnych podmienok do priemyselného meradla, zvýšiť produkciu a zároveň minimalizovať bezpečnostné a ekologické riziko. To sa docieli výrobou v prietokovom reaktore s mechanickým miešaním.

Stavba matematického modelu

Analyzovaná výroba vychádza z matematického modelu laboratórneho reaktora s objemom 1 l, do ktorého sa privádzali 3-metylpyridín s vodným roztokom peroxidu vodíka v pomere prietokov 3,83 : 2,06 o teplote 50 °C [1]. Reakcia beží podľa schémy (1).



$$\text{vstup} = \text{výstup} + \text{reakcia} \quad (2)$$

$$\text{vstup} = \text{výstup} + \text{reakcia} + \text{chladenie} \quad (3)$$

Rovnica (2) je všeobecne zapísaná materiálová bilancia surovín a produktov v reaktore. Rovnica (3) predstavuje entalpickú bilanciu procesu, v ktorej je zahrnuté teplo, ktoré vznikne reakciou a teplo, ktoré sa odvedie chladiacou kvapalinou. Súčasťou modelu bola i entalpická bilancia chladiaceho média.

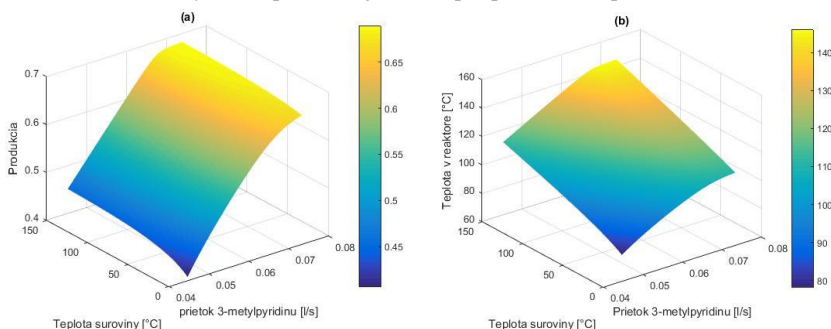
Výsledky a diskusia:

Pre tieto predpoklady sa vytvoril model reaktora s objemom 1 m³, po ktorom nasledovala jedno-parametrická citlivostná analýza. Kľúčovými optimalizovanými parametrami bol tok látkového množstva vyprodukovaného 3-metylpyridín-N-oxidu (ďalej „produkcia“) a teplota v reaktore. Sledovanie teploty v reaktore je dôležité pre bezpečnosť procesu. S rastúcou teplotou rastie rýchlosť reakcie, ale od určitej teploty dochádza k odparovaniu reakčnej zmesi, čo má za následok nárast tlaku v reaktore. Naopak, pri nízkej teplote dochádza k exotermickému rozkladu peroxidu vodíka na vodu a kyslík [2]. Experimentálne stanovený vhodný rozsah teplôt bol 110 – 125 °C [1]. Zmena týchto parametrov sa sledovala v závislosti od prietoku kľúčovej suroviny – 3-

metylpyridínu, koncentrácie katalyzátora, teploty suroviny na vstupe do reaktora, teploty chladiaceho média, čistoty peroxidu vodíka a objemu reaktora. Na priebehu týchto závislostí sa zistilo, že s narastajúcim prietokom 3-metylpyridínu produkcia rastie až do okamihu, kedy začne byť proces limitovaný prítomnosťou peroxidu vodíka, ktorý privádzame pri konštantnom množstve.

Teplota suroviny má významný vplyv na výslednú teplotu v reaktore, pri jej zvýšení o 10 °C narastie teplota v reaktore o približne 3 °C. Modifikácia hodnôt ostatných parametrov nemá zásadný vplyv na chovanie reaktora. Preto sa pri ďalších krokoch analýzy uvažovalo s ich konštantnými hodnotami, a teda na kľúčové parametre má najväčší vplyv prietok 3-metylpyridínu a teplota suroviny.

Na analýzu synergického efektu oboch parametrov bola vykonaná viac-parametrická optimalizácia. Výsledkom analýzy sú 3D grafy (Obrázok 1), v ktorých sa pomocou špeciálne zostaveného algoritmu hľadala maximálna produkcia, pričom teplota v reaktore musela spĺňať bezpečnostné kritérium a byť v intervale 110 – 125 °C. Na grafoch je vidieť, že zvyšovanie prietoku 3-metylpyridínu a teploty surovín zvyšuje hodnotu produkcie. Zároveň stúpa aj teplota v reaktore a môže dosiahnuť hodnoty, ktoré predstavujú riziko pre proces a bezpečnosť.



Obrázok 1: Závislosť produkcie (a) a teploty v reaktore (b) od prietoku 3-metylpyridínu a teploty suroviny.

Záver

Výsledkom práce sú nájdené optimálne hodnoty prietoku 3-metylpyridínu a teploty suroviny. Oproti laboratórnej výrobe optimálny pomer prietokov 3-metylpyridínu a peroxidu vodíka je 4,40 : 2,06 a suroviny sa privádzajú pri teplote 55°C. Tieto parametre zvýšia produkciu o 8 %, pričom teplota v reaktore nedosiahne kritickú hodnotu. V práci možno sledovať výhodu zostavenia matematického modelu procesu. Vďaka nemu možno optimalizovať výrobu z pohľadu intenzifikácie procesu i bezpečnosti procesu a predvídať neštandardné chovanie reaktora. Tieto informácie pomáhajú prevádzkam zabrániť poškodeniu technológií nesprávnym prevádzkovaním, predvídať bezpečnostné a ekologické záťaž a najmä predvídať výslednú ekonomickú bilanciu výroby.

Literatúra:

- [1] Cui, X.; Mannan, M. S.; Willhite, B.A.; Chem. Eng. Sci. **2015**, 137, 487-503.
- [2] Pineda-Solano, A.; Saenz, L. R.; Carreto, V.; Papadaki, M.; Mannan, M. S.; J. Loss Prev. Process Ind. **2012**, 25, 797-802.