

Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu **APVV-0858-12****Modelovanie separácie azeotropických zmesí prostredníctvom extrakcie/extrakčnej destilácie a simulácia regenerácie rozpúšťadiel**Zodpovedný riešiteľ **Doc.Ing. Elena Graczová, PhD.**Príjemca **Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU Bratislava**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Ústav chemického a biochemického inžinierstva, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU Bratislava, Slovensko
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Ústav fyzikálnej chémie, Fakulta chemicko-inžinierská, VŠCHT Praha, Česko
- 2.
- 3.

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

- 1.
- 2.
- 3.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. Graczová E., Steltenpohl P., Šoltýs M., Katriňák T.: Design calculations of an extractor for aromatic and aliphatic hydrocarbons separation using ionic liquid. Chem. Papers 67 (12),1548-1559 (2013). DOI: 10.2478/s11696-012-0289-1
2. Steltenpohl P., Graczová E.: Optimization of extraction solvent-to-feed ratio: Aqueous ethanol mixture separation using [TDTHP][NTf₂] ionic liquid. Chemical Engineering Research and Design 121, 200–206 (2017). DOI: 10.1016/j.cherd.2017.02.017
3. Graczová E., Steltenpohl P., Labovský J.: Incorrect Ternary Liquid–Liquid Equilibria Description versus Extractor Design Simulation. Chemical Engineering Transaction, 45 (2),

1957 - 1962 (2015). DOI 10.3303/CET1545328

4. Graczořá E., Branislav ř., Steltenpohl P.: Energy Aspects of Imidazolium-Based Ionic Liquid Regeneration from Aqueous Solutions. Chemical Engineering Transection 61, 1153-8 (2017). DOI: 10.3303/CET1761190

5. Graczořá E., Steltenpohl P.: Ternary VLE description of the systems containing ionic liquids. In: 22nd International Congress of Chemical and Process Engineering CHISA 2016 Prague, 27.-31.8.2016, Praha, řR. Vydavateľ: řeská společnost chemického inženýrství (řSCHI), 2016, CD, příspěvek 0990 (prednářka)

Uplatnenie výsledkov projektu

Namerané boli nové sady rovnovážnych údajov kvapalina - kvapalina troch trojzložkových systémov obsahujúcich iónovú kvapalinu (IL); binárne rozpustnosti uhl'ovodíkov v IL a IL v uhl'ovodíkoch. Nové údaje poskytujú dôležitú informáciu o extrakčnej kapacite a selektivitě skúmanej IL.

řtúdie separačných vlastností IL a modelové výpočty deliacich a regeneračných jednotiek poskytujú informácie ktoré sú zaujímavé aj z pohľadu priemyselného využitia - poukazujú na nové možnosti delenia azeotropických zmesí.

Doplnená bola elektronická databáza TCDB ternárnych príspevkov o modelové trojzložkové systémy obsahujúce iónové kvapaliny. Databáza poskytuje základné informácie o správaní sa modelových systémov a je sprístupnená verejnosti formou Demo verzie na stránke oddelenia: <http://kchbi.chtf.stuba.sk/TCDB>.

V rámci pedagogického procesu sú výsledky súvisiace so řtúdiom vlastností viaczložkových systémov a s návrhovými výpočtami separačných zariadení sprístupnené pre študentov bakalárskeho a inžinierskeho řtúdia nášho odboru (Chemické inžinierstvo). Do riešenia čiastkových úloh projektu (experimentálne merania, simulačné výpočty zariadení) boli priamo zapojení študenti bakalárskeho řtúdia (15 bakalárskych prác) a inžinierskeho řtúdia formou diplomových prác (3), technologických projektov (4 študenti) a řVOČ prác (5). V roku 2016 získal náš řtuden řulgan 1. miesto v celoslovenskom kole řVOČ, v roku 2017 diplomant Molnár cenu "Najdiplomovka roka".

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Projekt sa zaoberal řtúdiom separácie modelových azeotropických systémov v prítomnosti rozpúšťadiel - iónových kvapalín (IL). Urobili sme rozsiahlu rešerř, na základe ktorej sme sa zamerali na priemyselne zaujímavé modelové azeotropické systémy: alkán – aromát (hexán – benzén, heptán - toluén, metylcyklohexán - benzén, toluén, m-xylén, alebo p-xylén); alkohol – voda (etanol, izopropanol, terc-butanol – voda); acetón – metanol a metylacetát – metanol).

Namerali sme sady kompletých L–L rovnovážnych údajov troch trojzložkových IL-systémov pri 25 °C: metylcyklohexán (MCH) – aromát (toluén, m-xylén a p-xylén) – IL ([EMim][NTf2]); binárne rozpustnosti MCH a aromátov v IL pri rôznych teplotách a rozpustnosť IL v MCH a aromátoch pri 25 °C. Namerali sme varné krivky dvoch V-L systémov: voda – IL [EMim]Br, [BMim]Br pri atm. tlaku v řirokej koncentračnej oblasti, resp. teplotnom rozsahu do 300 °C.

Vypracovali sme metodiku predpovede závislosti tlaku nasýtenej pary IL od teploty. To nám umožnilo korektnejšie opísať V–L rovnováhu IL-systémov aj pri vyšších teplotách v regeneračných jednotkách, predpovedať závislosti teplôt varu IL od teploty a poskytli podklady pre energetickú analýzu navrhovaných deliacich a regeneračných zariadení.

Pre hore uvedené modelové systémy s IL boli nami korektne opísané fázové rovnováhy L–L/ V–L príslušných trojzložkových systémov; urobené řtúdie základných charakteristík IL- rozpúšťadiel; vypracované návrhy separačných zariadení - extraktorov/extrakčných rektifikačných kolón. Zaoberali sme sa návrhom regeneračných zariadení a energetickými požiadavkami procesu. V prípade dostupnosti údajov, separačný proces s použitím IL bol porovnaný s procesom s komerčne používanými rozpúšťadlami.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku
(max. 20 riadkov)

The project dealt with the study of model systems separation in the presence of green solvents - ionic liquids (ILs). Extensive research focused on industrially interesting azeotropic model systems: alkane – aromatics (hexane – benzene, heptane – toluene, methyl cyclohexane – benzene, toluene, m-xylene or p-xylene); water – ethanol (ethanol, iso propanol, tert-butanol – water); acetone-methanol and methyl acetate – methanol), was done. Sets of complete L–L equilibrium data for three ternary IL-systems were measured at 25 °C: methyl cyclohexane (MCH) – aromatics (toluene, m-xylene and p-xylene) – IL ([EMim][NTf₂]); binary solubilities of MCH and aromatics in IL at different temperatures, and solubility of IL in MCH and aromatics were acquired at 25 °C. Also the t–x curves of two V–L systems (water – IL: [EMim]Br, [BMim]Br) in a wide concentration range and temperatures up to 300 °C were measured at Patm. A methodology for the prediction of the dependence of the saturated vapor pressure on temperature for IL has been developed, which allowed more accurate VLE description of the IL-systems even at higher temperatures occurring in regeneration units; prediction of the dependence of the IL boiling temperature on temperature and providing the basic energy analysis of the proposed separation and regeneration devices. For the above mentioned model systems with ILs, LLE/VLE of the respective ternary systems were correctly described; and basic characteristics of IL-solvents studies and separation equipment (extractor/extractive distillation columns) design were done. We dealt with the design of regeneration processes and their energy requirements. In case of data availability, the separation process using IL was compared to the process with commercially used solvents.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

doc. Ing. Elena Graczová, PhD.

V Bratislave 24.10.2017

Štatutárny zástupca príjemcu

prof. Ing. Ján Šajbidor, DrSc.

V Bratislave 25.10.2017

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu