



EVROPSKÁ UNIE

EVROPSKÝ FOND PRO REGIONÁLNÍ ROZVOJ

INVESTICE DO VAŠÍ BUDOUCNOSTI



# Strategická výzkumná agenda

## České technologické platformy pro udržitelnou chemii

aktualizace k 30. 11. 2014

Zpracováno v rámci projektu 5.1 SPTP02/035 „SusChem II“ v rámci OPPI - Spolupráce - Technologické platformy



## OBSAH:

1	Souhrn.....	4
2	Úvod.....	6
3	Průmyslové biotechnologie .....	7
3.1	Úvod.....	7
3.2	Využití biomasy pro průmyslovou biotechnologii .....	8
3.2.1	Úvod .....	8
3.2.2	Zdroje biomasy a jejich rozdělení .....	8
3.2.3	Směry technologií .....	9
3.2.4	Produkty zpracování biomasy .....	9
3.2.5	Termochemické procesy .....	10
3.2.6	Chemické látky .....	11
3.2.7	Výhled.....	13
3.3	Enzymatické biotechnologie.....	13
3.3.1	Enzymatické technologie v chemickém průmyslu .....	14
3.3.2	Bioreaktory .....	15
3.3.3	Enzymy jako katalyzátory .....	15
3.3.4	Environmentální biotechnologie.....	15
3.3.5	Enzymatické přípravy HVCH .....	16
3.4	Význam a priority výzkumu .....	16
3.5	Cíle strategické výzkumné agendy .....	17
4	Materiálové technologie .....	20
4.1	Úvod.....	20
4.2	Fotovoltaika (dále FV) .....	21
4.2.1	Význam .....	21
4.2.2	Prioritní výzkumná témata .....	22
4.3	Moderní katalyzátory .....	22
4.3.1	Význam .....	23
4.3.2	Prioritní výzkumná témata: .....	23
4.4	Efektivní světelné zdroje .....	24
4.4.1	Význam .....	24
4.4.2	Prioritní výzkumná témata: .....	25
4.5	Spotřební výrobky (kosmetika, nátěrové hmoty, textil, obaly a další) .....	25
4.5.1	Význam .....	25
4.5.2	Prioritní výzkumná témata .....	26
4.6	Nanokompozity.....	26
4.6.1	Význam .....	27
4.6.2	Prioritní výzkumná témata .....	27
4.7	Materiály pro zdravotnictví .....	28
4.7.1	Význam .....	29
4.7.2	Prioritní výzkumná témata .....	30
4.8	Závěry .....	30
5	Nové procesy a zařízení.....	32
5.1	Úvod.....	32
5.2	Oxidace pro čisté technologie .....	32
5.2.1	Význam pro udržitelný rozvoj ekologicky přijatelných technologií.....	32
5.2.2	Priority pro zpracování odpadních vod .....	33
5.3	Rozklad polutantů procesem mokré oxidace .....	34
5.4	Technologické aspekty katalytických mokrých oxidací .....	35
5.5	Závažná témata výzkumu procesů pro ochranu prostředí .....	36
5.6	Mikroreaktory a vývoj nových technologií .....	37
5.6.1	Význam pro vývoj procesu.....	37



EVROPSKÁ UNIE

EVROPSKÝ FOND PRO REGIONÁLNÍ ROZVOJ

INVESTICE DO VAŠÍ BUDOUCNOSTI



5.6.2	Intenzifikace procesů a bezpečné řízení .....	37
5.6.3	Význam pro syntézu chemických specialit .....	38
5.6.4	Přednosti a nevýhody mikro reaktorů .....	38
5.7	Výzkum chemických robotů .....	39
5.8	Prioritní výzkumná témata .....	40
5.9	Závěr .....	40
6	Horizontální otázky .....	42
7	Příloha 1 .....	43



## 1 Souhrn

Vzhledem k neustále se zvětšujícím nárokům společnosti na komodity z chemického průmyslu a ke skutečnosti, že chemické technologie jsou ve většině případů založeny na zpracování fosilních paliv, je český a světový průmysl plně závislý na těžbě těchto surovin. Případný problém v náhlé nedostupnosti těchto zdrojů by znamenal kolaps chemického průmyslu jako takového.

Využití a zapracování biotechnologických procesů do stávajících chemických technologií se nabízí jako jedno z možných částečných řešení v otázce "závislosti na ropě".

Z odpadní biomasy a jiných obnovitelných zdrojů lze termochemickými a enzymatickými postupy připravit látky, které jsou schopny substituovat stávající suroviny z fosilních zdrojů, v některých případech i za výhodnějších energetických podmínek. Po zavedení vhodných separačních metod, připravit a izolovat řadu produktů s přidanou hodnotou, které svými vlastnostmi budou moci konkurovat stávajícím produktům z ropných zdrojů.

Pro úspěšnou implementaci biotechnologií do průmyslu je zapotřebí vývoj a optimalizace vhodných procesních podmínek a výrobních postupů. Výzkum termochemických postupů se zaměřuje na výběr vhodných biosurovin, vývoj katalyzátorů. Enzymatické procesy vyžadují podporu a výzkum v oblasti biologie a genetické modifikace, která je nutná pro vysoce účinnou konverzi a syntézu cílových složek. Vývoj rafinačních a separačních metod je pak nejdůležitějším krokem ve využití těchto konverzí v průmyslu.

Návrh Strategické výzkumné agendy (dále SVA) pro materiálové technologie vychází z analýzy vědecko-výzkumné a výrobní základny ČR a z možností komercializovat výsledky vývoje s cílem posílit životaschopnost českého průmyslu. SVA se orientuje na podporu vývoje materiálů s vyšším obsahem know how, s novými funkcionalitami, na vývoj nových technologií, které budou dostatečně efektivní pro nové materiály s vlastnostmi šitými na míru a přátelské k životnímu prostředí. Je strukturován aplikačně se záměrem posílit perspektivu komercializace. Zahrnuje fotovoltaiiku, efektivní světelné zdroje, katalyzátory, spotřební zboží (např. stavební materiály, nátěrové hmoty, textil, kosmetiku), nanokompozity a materiály pro zdravotnictví.

SVA definuje prioritní výzkumná témata ve střednědobém a dlouhodobém horizontu.

U fotovoltaiiky jde především o vývoj nových typů fotovoltaiických článků s cílem vyrábět ze slunečního záření energii za srovnatelné náklady s konvenčními elektrárnami, v řadě dalších oborů se počítá s rozvojem aplikace nanotechnologií např. fotokatalyzátory, selektivní senzory, UV absorbéry, nanokompozity, materiály pro tkáňové inženýrství, pro vysoce účinnou katalýzu v chemických procesech a při přeměně energie ve fotovoltaiických a palivových člancích, biokonverzi energie či zpracování odpadů a kontrole ovzduší.

Pro zdravotnictví se budou vyvíjet nová diagnostická zařízení, terapeutika, transport léků nebo biokompatibilní materiály pro implantáty a protézy.

V souvislosti s dalším vývojem efektivních a environmentálně přijatelných technologií jsou hledány nové chemické procesy a aplikována netradiční zařízení. V této oblasti budou uplatňovány například oxidační postupy pro destrukci toxických, či obtížně biologicky odbouratelných organických polutantů metodami mokré oxidace za superkritických



EVROPSKÁ UNIE

EVROPSKÝ FOND PRO REGIONÁLNÍ ROZVOJ

INVESTICE DO VAŠÍ BUDOUCNOSTI



podmínek, či v přítomnosti nových katalyzátorů. Jedná se například o odpadní vody ze syntéz chemických specialit – farmaceutika, zemědělské ochranné prostředky, nátěrové hmoty apod.

Mezi netradiční varianty nových procesů v oblasti syntéz chemických specialit nepochybně budou patřit mikroreaktorové technologie. Intenzifikace procesů, založená na mikroaparátech, představuje nový koncept v oboru chemického inženýrství. Co je ale podstatné, je to, že mikro-aparáty se hodí zvláště pro vysoce hořlavé, explosivní či toxické reaktanty.



## 2 Úvod

Tento dokument byl zpracován Českou technologickou platformou pro udržitelnou chemii, SusChem ČR v rámci projektu 5.1 SPTP02/035 "SusChem II", podporovaného Ministerstvem průmyslu a obchodu v rámci OP Podnikání a inovace - Technologické platformy - Výzva II v období 1. 7. 2012 až 31. 12. 2014.

Bližší informace o ČTP SusChem, jejích členech, organizační struktuře atd. jsou zveřejněny na jejích webových stránkách <http://suschem.cz/> v oddíle „O ČTP SusChem“.

Základními cíli SusChem ČR jsou:

- Podporovat udržitelnost chemického průmyslu v České republice.
- Iniciace vědecko-technických výzkumů a komerčního využití vědeckých řešení, vytváření mostu mezi vědou, výzkumem a průmyslem v oblasti chemie.
- Propagace inovačních aktivit a vědecko-technického rozvoje v chemickém průmyslu.
- Zapojení České republiky do realizace hlavních činností Evropské technologické platformy pro udržitelnou chemii následujícími způsoby:
  - aktualizace programu strategického výzkumu (strategická výzkumná agenda, SVA)
  - iniciování vědecko-technických výzkumů
  - aktualizace strategie pro rozvoj moderních chemických technologií (implementační akční plán IAP)
  - spolupráce při vytváření politiky a právních předpisů sloužících k povzbuzení inovačních aktivit

Činnost TP je zaměřena po odborné stránce do tří základních oblastí:

- průmyslové biotechnologie
- technologie materiálů
- nových typů reakcí a procesů

Průřezovou (horizontální) oblastí je zaměření na:

- technologickou vyspělost
- bezpečnost a šetrnost k životnímu prostředí
- překonávání legislativních bariér
- surovinovou dostatečnost



## 3 Průmyslové biotechnologie

### 3.1 Úvod

Chemický průmysl přispěl rozhodující mírou k dosažení současné kvality života společnosti. V poslední době se ale dostal do situace, kdy jsou na něj vytvářeny tlaky na změnu dosavadních technologických postupů za postupy přátelštější k životnímu prostředí a nižší energetickou náročností. Přijmeme-li jako jednoznačnou skutečnost, že pouze zase rozvoj chemických technologií a technik a vědeckých poznání v chemii a chemickém inženýrství může takovým tlakům vyhovět, je zapotřebí postupně v řadě případů dospět k "zeleným" technologiím, aniž by byl zastaven nebo zbrzděn rozvoj společnosti. Cílem je zmírnit závislost průmyslu na neobnovitelných zdrojích a snížit produkce toxických produktů a meziproductů.

Průmyslové biotechnologie se díky neustále se stupňujícím nárokům na těžbu a využití fosilních zdrojů nabízejí jako alternativa. Využitím těchto technologií bude možno v budoucnu podpořit, zjednodušit a případně i nahradit látky vyráběné z fosilních surovin. Při zavedení nových typů biotechnologií jde zejména o ekonomické a environmentální přínosy (životní prostředí, přátelská produkce existujících a nových produktů, zlepšená ekonomie jejich produkce, redukce závislosti na neobnovitelných zdrojích energie a paliv, snížení hazardních stavů a bezpečnost výrob, zvýšení kvality života a zdraví společnosti, redukce vzniku potenciálních polutantů, management odpadů). Využitím biotechnologií a zpracováním biomasy je v řadě případů snížena poptávka po fosilních zdrojích a tím i zmenšena závislost na těchto surovinách, což je pozitivní pro další (udržitelný) rozvoj společnosti.

Chemický průmysl zahrnuje základní chemikálie (komodity), speciální chemikálie, chemikálie pro život (kosmetiku, detergenty), farmaka, přičemž pro řadu produktů ve všech těchto kategoriích může být racionální řešení v nahrazení fosilních zdrojů biologickými, či dokonce využití enzymatických biotechnologií.

Základním rozdělením v aplikaci průmyslových biotechnologií jsou vymezeny i oblasti jejich možného zásahu ve stávajícím průmyslu. V mnoha případech jde i o synergie několika vědních oborů jak chemického tak i biologického a genetického.

Jedním výchozím způsobem je využití standardních termo-chemických postupů při zpracování fosilních paliv a převedení jejich principů na oblast biologických obnovitelných zdrojů.

Odišným způsobem lze pojmout biotechnologie jako oblast pro využití enzymatických procesů a jejich využití při výrobě chemických látek a komodit.

Oba tyto směry můžeme podřazovat pod jednotnou hlavičku průmyslových biotechnologií, a to i proto, že se v mnoha případech vzájemně doplňují.

Proto je tato část strategické výzkumné agendy rozdělena do dvou rozpracovaných bloků:

- využití biomasy pro průmyslovou biotechnologii
- enzymatické biotechnologie



## 3.2 Využití biomasy pro průmyslovou biotechnologii

### 3.2.1 Úvod

Vzhledem ke stoupajícímu trendu používání biosložek v oblasti paliv se nabízí další možná implementace a využití biosložek, a to jak přímo specifikovaných produktů zemědělského průmyslu, tak i využití nezpracovaného odpadu ze zemědělské a potravinářské výroby a z výroby biopaliv. Trendy současných biorafinérských technologií se zaměřují spíše na neustále se zvyšující spotřebu elektrické energie a paliv (výroba Low value products) a oblast biosložek jako zdrojů pro stávající průmyslové výrobní procesy je neustále v mírném pozadí. Je na zvážení, zda např. odpadní materiály z výroby biopaliv (MEŘO, ethanol, bio-oil) lze využít i pro jiné než převážně krmné účely. Termochemické a biochemické technologie jsou jednou z možností jak tyto odpadní produkty upravit pro výrobu vysoce ceněných produktů (HVCH). Množství a typy těchto surovin jsou úzce spojeny nejen s metodami použitými v jejich zpracování, ale i se specifickým typem biosuroviny. Tyto klasifikace jednotlivých biosložek jsou trvalým potenciálem pro vývoj nových technologií se zaměřením na určitý výstup, který by se mohl uplatnit ve stávajícím chemickém petrochemickém, potravinářském nebo lékařském průmyslu.

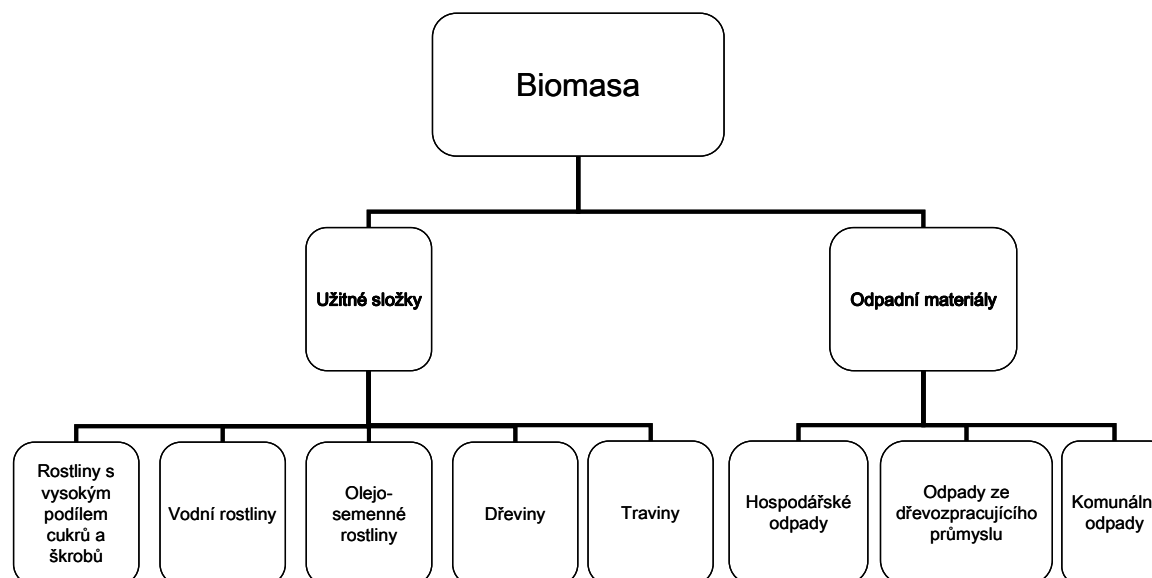
### 3.2.2 Zdroje biomasy a jejich rozdělení

V současné době se používá mnoho typů rozdělení pro specifikaci zdrojů biomasy. Jedním z nejzákladnějších je dle typu plodin. Na obrázku níže je stručné rozdělení jednotlivých druhů použitelných surovin, které se používají v širším měřítku

Systematicky je zde biomasa rozdělena na plodiny a odpadní produkty. Mezi další typ dělení lze považovat rozčlenění dle typu využívané složky. Suroviny obsahující tzv. primární metabolity (cukry, lignocelulosa) jsou používány v největší měřítku jako zdroje pro biopaliva. Sekundárními metabolity se míní méně zastoupené složky vyskytující se v biomase (gumy, pryskyřice, vosky, terpeny, steroidy, glyceridy, kyseliny). Ty jsou prekursory tzv. High Value Chemicals. Princip technologií pro izolaci a využití těchto látek pro průmysl se odvíjí specificky od suroviny a produktu. Jednou z možností využití těchto látek je výroba polymerních materiálů, aditiv, barviv, adhesiv atd.

Významným potencionálním zdrojem pro výrobu nových produktů z oblasti farmak, potravinových doplňků a komodit typu biopaliv, budou mikrořasy. Zde však bude nutné vyvinout nové způsoby desintegrace buněk a extrakce účinných látek z relativně zředěných vodných roztoků, případně i z organických rozpouštědel (membránové procesy, selektivní adsorpční procesy, extrakce za extrémních podmínek).





Obrázek 1 Rozdělení zdrojů

### 3.2.3 Směry technologií

V současné době je známo několik hlavních technologických směrů ve využití biomasy, a to zejména pro výrobu paliv, které tvoří majoritní podíl z celkového zpracování biomasy.

Pro výrobu biopaliv se využívají především termochemické konverze (Bio-oil) a biologické konverze (Biogas, Ethanol atd.) Biologická konverze se nabízí i pro získávání produktů z enzymatického štěpení (aminokyseliny). Chemická konverze se používá z největší části pro předúpravu biomasy a pro její lepší zpracování v termochemické a biologické konverzi. Použitím hydrolýzy dochází k extrakci jednotlivých složek biomasy, které jsou pak vhodné pro následnou fermentaci a pro extrakci High value chemikálií.

Jedním z problémů těchto technologií jsou například detoxifikace fermentovaných hydrolyzátů, zápach, tvorba fenolových vod nebo všudypřítomný vysoký obsah kyslíku v produktech.

### 3.2.4 Produkty zpracování biomasy

V rámci udržitelnosti rozvoje ve zpracování biomasy musíme uvažovat o intezifikaci všech biotechnologií, které vedou ke zpracování biomasy, a to jak na paliva, tak i pro získávání dalších chemických surovin.

Celosvětovým trendem v oblasti biotechnologií je zpracování tzv. "1. generace" biopaliv. Tyto paliva se vyrábí převážně z jedlých zemědělských plodin a dochází tedy k hlavnímu problému, ke konfrontaci potravinářského a chemického průmyslu. Tato paliva jsou produkována na úkor potravinového využití surovin. Mezi tyto typy technologií a paliv "1. generace" můžeme zařadit využití řepkového oleje pro výrobu FAME, zpracování cukernatých plodin za účelem výroby biolihu a anaerobní rozklad biomasy (LFG). Tyto



procesy jsou už komerčně známé a jsou známé i jejich nevýhody (využívání zemědělské půdy na úkor potravin, nutnost specifických plodin atd.)

V rámci těchto výrob, zvláště z výrob FAME a fermentačního procesu při výrobě etanolu, odpadá značná část nevyužitelného a dále nezpracovávaného zbytku, který se momentálně využívá pro krmné účely. V této oblasti se otevírá možnost výzkumu pro efektivní využití jednotlivých surovin. Mezi vybrané druhy dalšího zpracování můžeme zahrnout: pro jedlé suroviny - zpracování a izolace proteinů, př. alkaloidů a kyselin.; pro nejedlé - pesticidy, herbicidy. Pro všechny nevyužité odpady můžeme navrhnout termochemické využití - pyrolýza, zplyňování atd.

V posledních letech se prosazují biopaliva tzv. 1.5 generace. Jedná se většinou o hydrogenační procesy při zpracování odpadních olejů, např. technologie NesteOil.

Majoritním trendem je v této době příprava a optimalizace výroby paliv tzv. "2. generace", které se vyrábějí zpracováním potravinářsky nevhodných surovin a jiných levných materiálů, zejména na bázi lignocelulosity (odpadu z dřevařského průmyslu, využití nevhodných dřevin atd.). Při výrobě těchto paliv druhé generace jde o dva základní systémy jejich výroby: termochemický proces a enzymatický biotechnologický proces. Mezi těmito procesy dochází k vzájemné synergii (např. enzymatické štěpení celulosy na specifické cukry atd. ).

Výzvou je využití řas, které poskytují řadu žádaných produktů pro potravinářství, farmacii a kosmetiku (nenasycené mastné kyseliny - omega 3 a 6, karotenoidy, vitaminy, růstové faktory, chlorofyl atd.). Značný obsah bílkovin je předurčuje k využití jako krmiva nebo doplňku stravy. Výtěžnost řas, vztaženo na plochu, je mnohem vyšší než u hospodářských rostlin.

Samostatnou částí jsou pak skládkové plyny (LFG), které obsahují za ideálních podmínek 60 - 70 % methanu, při tomto procesu je určitým problémem výskyt VOC (vinylchlorid, H<sub>2</sub>S), proto je nutné před použitím tento plyn vyčistit. Novým trendem je z důvodu lepšího zpracování a manipulovatelnosti tento plyn převést na methanol.

### 3.2.5 Termochemické procesy

#### Zkapaňování

Zkapaňováním (hydrolýzou - katalyzátor Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) dřeva a dřevní biomasy dochází k oddělení ligninu od celulosy a hemicelulosy. Zkapaňováním dřeva vznikne směs těžkých uhlovodíků, které je možno nadále zpracovat pro petrochemickou výrobu. Momentálně existuje mnoho způsobů a technologií na odstraňování ligninu z lignocelulosové biomasy a tato problematika je hodně diskutovaná v severních evropských státech.

#### Pyrolýza

Pyrolýza dřeva je velmi aktuální téma z důvodu využití frakcí nejen pro palivové účely, ale i jako zdroj uhlovodíků s vysokou hodnotou. Předmětem řešení je hledání ideálních podmínek (teploty, tlaku, katalyzátoru) pro co největší výtěžnost plynných a kapalných produktů. Problém pyrolýzních olejů je v jejich vysokém obsahu kyslíku a vody.



## Hydrogenace rostlinných olejů

Hydrodeoxygenací, dekarboxylací a hydroizomerací mastných kyselin a triglyceridů vzniká tzv. green diesel, který má lepší vlastnosti než FAME.

## Chemická konverze biomasy

- hydrolýza
- extrakce látek rozpouštědlem
- izolace metabolitů pomocí činidel v superkritickém stavu

### 3.2.6 Chemické látky

Vzhledem k technologiím vhodných ke zpracování biomasy je zpracování biomasy pro chemické látky další možnou variantou. Zatímco primární metabolity jsou užívány vesměs pro energetické využití jak už v podobě cukrů pro následnou fermentaci, či jako estery vyšších mastných kyselin pro výrobu FAME, sekundární metabolity mají také své využití.

Nastavený trend je však využívat i primární metabolity jako zdroje chemických látek, důvodem je lehká dostupnost a majoritní podíl ve zpracovávané biomase.

#### Primární metabolity

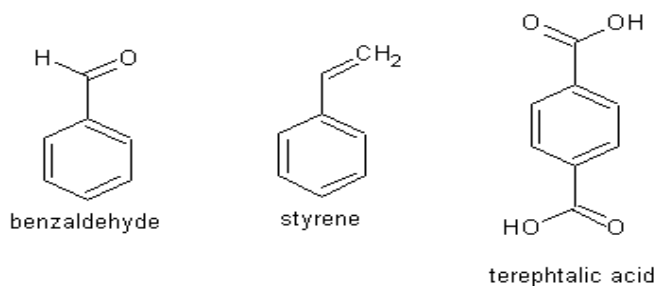
Mezi primární metabolity řadíme oleje, cukry, celulosu, hemicelulosu, lignin. Všechny tyto složky jsou v největší míře upravovány na koncový palivový produkt. Tyto metabolity však lze brát v úvahu i jako zdroje chemických látek. Enzymatickým štěpením celulosy a hemicelulosy dostáváme směs cukrů vhodných pro následnou separaci a využití v potravinářském a chemickém průmyslu.

Kromě využití cukrů jako zdrojů pro následnou fermentaci se objevují práce na téma hledání alternativních monomerů vyrobených z biomasy. Jde o vytvoření ekvivalentních polymerů vůči klasickým petrochemickým produktům. Řešení se objevuje např. ve vytvoření monomerů furanového základu, oproti benzenovému.

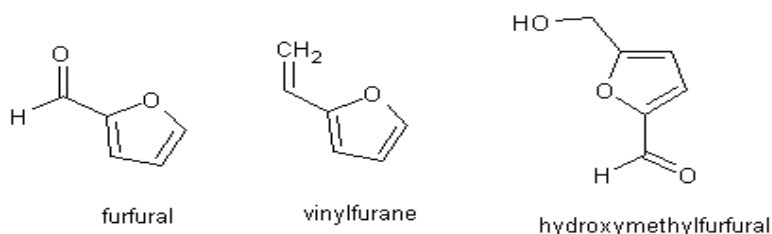
Dřevní pojivo lignin, které vypadává v procesu hydrolýzy dřeva, se díky své struktuře může brát jako prekursor vysoce aromatických sloučenin, které se získají za použití vhodného termochemického procesu.



### Standardní monomery



### Biomonomery



Obrázek 2 Substituce standardních monomerů za biomonomery

### Sekundární metabolity

Gumy, pryskyřice, vosky, terpeny, steroidy, glyceridy, kyseliny můžeme řadit označením jako sekundární metabolity obsažené v biomase. Jejich množství se značně odvíjí od druhu rostlin a jejich částí. V současné době se vyvíjí způsob efektivní izolace a vedlejšího využití těchto metabolitů. Využití sekundárních metabolitů v jednotlivých odvětvích je uvedeno na obrázku níže. Při zpracování sekundárních metabolitů se nabízí i alternativní cesta enzymatické transformace a izolace.

Tabulka I

Průmysl/Produkt	Využití
zpracování kůže	změkčování, čištění
strojnictví	řezné oleje, čisticí prostředky
pryže	vulkanizační aditiva, změkčovadla
elektronika	izolační a speciální materiály
oleje a maziva	složky pro základové oleje
nátěrové hmoty	pryskyřice
plastické hmoty	stabilizátory, plastifikátory, antistatika, polymerační emulgátory
vosky	součást vosků
mýdla a detergenty	speciální surfaktanty
kosmetický průmysl	aditiva kosmetických produktů
potravinářský průmysl	rostlinné tuky, emulgátory, výživové suplementy



### 3.2.7 Výhled

V posledních letech došlo k degradaci využití biomasy v rámci ČR především pro enegetické využití. Je to mimo jiné dáno špatnou legislativou, která řídí využívání biomasy. Biomasa se využívá především jako náhrada fosilních paliv v teplárnách a elektrárnách, kde je energie vyrobená tímto způsobem finančně bonifikována. S minimálními investičními náklady, lze nahradit část fosilních paliv, především pak hnědého uhlí, biomasou. Tento fakt snižuje dostupnost biomasy v ČR a více méně predikuje možnosti jejího využití.

Jde o využití biomasy jako zdroje High Value Chemicals, které v konečném měřítku zvýší celkovou cenu výstupních technologických produktů. Mezi návrhy na budoucí postupy při zpracování těchto typů chemikálií se objevují zejména návrhy na rozvoj separačních metod.

Separální metody směřované na zpracování biooleje - produktu pyrolýzy biomasy - se odvíjejí dle typu a vlastností izolovaných látek. Mezi hlavní výhledové separační metody můžeme zařadit: extraktivní destilace rozvětvených polymerů, izolace iontových kapalin, selektivní pervaporace a využití adsorpcí na molekulová síta. S neustálým vývojem nanotechnologií se nabízí využití selektivní nanofiltrace pro získávání uhlovodíků se specifickými rozměry.

Tyto postupy navazují na předcházející chemickou, resp. termochemickou konverzi. Kvalita a princip těchto konverzí je důležitým bodem ve zpracování biomasy, je proto důležité optimalizovat tyto konverzní procesy pro získávání stabilních produktů, pro které by bylo možno výše zmíněné separační metody aplikovat a vyvíjet. Pro výzkum a vývoj je nutné se věnovat několika bodům, které zaručí kvalitní výchozí surovinu pro tyto procesy.

Mezi dlouhodobé výzkumné cíle v této oblasti můžeme zařadit:

- úprava biomasy - separace primárních a sekundárních metabolitů
- vývoj termochemických procesů
- vývoj biologických procesů
- využití kombinace hlavních typů konverzí chemického a biologického směru

### 3.3 Enzymatické biotechnologie

V kontextu udržitelnosti rozvoje (sustainable development) si lze představit, že se budou vyrábět produkty, které mají nejenom vyšší užitnou hodnotu, ale jsou více trvalé, méně toxické, snadno recyklovatelné a biodegradovatelné, méně náročné na suroviny, ekologicky kompatibilní a společností přijímané. Možnosti náhrady některých technologických kroků jinými, které jsou přátelské k životnímu prostředí, zvýhodňují ekonomiku výroby a výrobu nových produktů s novými užitnými vlastnostmi, které nelze dosavadními technologiemi dosáhnout, představují velkou výzvu pro výzkum, vývoj a inovace v chemickém průmyslu. Jako klíčová technologie pro tyto cíle je dnes považovaná enzymatická konverze a biotechnologie. Biokatalyzátory umožňují nové chemické reakce, pracují za mírných reakčních podmínek, a tím se snižuje riziko vzniku vedlejších produktů, a tedy operační stupně se obvykle zjednodušují. Máme přitom na mysli, že hlavní dopad biotechnologií je ve zdravotnictví, medicíně, diagnostice, ochraně prostředí, zemědělství a v potravinářství.

Jednou z důležitých úloh při hledání cílů je ověření funkčnosti a vhodnosti jednotlivých enzymatických kroků.



### Tyto cíle jsou zejména:

- vyvinout biokatalyzátory, které jsou lepší, rychlejší a lacinější než běžné chemické katalyzátory,
- vývoj katalyzátorů, které mohou katalyzovat širší oblast reakcí, než doposud známe,
- zvýšit jejich teplotní stabilitu, aktivitu a kompatibilit k rozpouštědlům,
- vyvinout metody molekulárního modelování, dovolující rychlý návrh enzymů.

Tyto výhledy však narážejí na současné problémy, jako jsou

- omezená znalost mechanismů enzymových biokatalyzátorů
- omezené znalosti metabolických drah pro sekundární metabolity
- nedostatečně vyvinuté metody na "šití enzymů a buněk na míru"
- vysoká cena produkce enzymů a kofaktorů.

### 3.3.1 Enzymatické technologie v chemickém průmyslu

Chemický průmysl je již dávno zvyklý využívat tradiční biotechnologické procesy, jakými jsou např. produkce různých průmyslových enzymů (např. produkce pracích prášků, antibiotik, vitaminů, ethanolu, krmných kvasnic, apod.). Mikrobiální fermentace je v současné době pořád výjimečný způsob komerční masové produkce. V tomto směru se neustále objevují nové způsoby intenzifikace biologického procesu, a to jak pro zvýšení účinnosti konverzí, snížení jednotlivých stupňů výroby, tak selektivity reakcí. Příkladem může být změna tradiční výroby vitamínu B (riboflavinu), kdy 6-ti stupňový chemický proces je nahrazen jednostupňovou fermentací, přičemž je ještě produkční mikroorganismus geneticky manipulován, aby se zvýšila účinnost.

Zdá se, že hlavní impuls chemickému průmyslu se strany biotechnologického výzkumu daly pokroky v biokatalýze a v genetickém inženýrství. Techniky molekulární biologie jsou schopné připravit řadu nových specifických enzymů, které mají výhodnější vlastnosti, než podobné přírodní enzymy a dokáží též vyrobit transgenní rostliny, které mohou v řízené míře vyrábět žádané produkty a enzymy.

Spíše než u komodit je role biotechnologií patrná u méně objemových výrob u specialit, zejména u agrochemikálií a čistých chemikálií. Příklady využívání enzymatických procesů ve velkoobjemovém nasazení:

- konverze škrobu na lépe zpracovatelnější cukry (fruktosa, glukosa atd.)
- produkce akrylamidu hydrolýzou akrylonitrilu enzymem nitril hydratázou (imobilizovaným bakteriálním enzymem) - jednostupňový proces, lacinější atd.

Užití enzymů může přispět k rozvoji chemického průmyslu, který je největším ekonomickým sektorem světa. Je vysoce rozvinutý, ale současně se ukazuje nezbytnost zahrnutí nových technologií na bázi biokatalyzátorů do jeho dalšího udržitelného rozvoje. Aplikace enzymů je



zde v různém stupni vývoje, ale nejvíce se ukazuje v organické chemii, chemických specialitách a produktech spotřební chemie.

### 3.3.2 Bioreaktory

Bioinženýrským přístupem k řešení reaktorové techniky je zřejmý pozitivní přínos v hlavních případech v řešení bioreaktorové techniky a při řízení procesu. Tradiční bioreaktory typu vertikálních kolon s náplní částic obsahující imobilizované enzymy či buňky, které z hlediska hydrodynamiky systému mohou být obtížně počítačově kontrolovatelné, budou nejspíše nahrazovány membránovými bioreaktory. Protože řízení komplikovaného reakčního mechanismu může být v reálných případech velkých reaktorů, obtížné. Je zde možnost v užití mini-bioreaktorů. Nelze zapomínat, že enzymy a buňky produkované metodami molekulového modelování a genetickým inženýrstvím budou velmi citlivé na reakční podmínky. Nové a účinné způsoby jejich "imobilizace" bude důležité. Mikrobiální buňky jsou citlivé ke střihovým napětím při proudění a bude tedy nutné navrhovat nové typy bioreaktorů s potlačenými projevy fázových turbulencí.

### 3.3.3 Enzymy jako katalyzátory

Z řady (sociálních, politických a environmentálních) důvodů přitahuje produkce paliv značnou pozornost. S výjimkou biovodíku jsou již provozovány v pilotním i komerčním provedení výroby všech zmíněných energetických zdrojů. Ačkoliv konverze lignocelulózy biomasy na cukry a jejich fermentace na ethanol je již řadu let laboratorně ověřována (včetně enzymatické hydrolýzy), zůstává tento způsob stále otevřený pro průmyslovou aplikaci. I zde jako v termochemických konverzních procesech jsou překážkou náklady a limitovaná dostupnost. Tato skutečnost brání těmto způsobům v průmyslovém rozšíření. V takovýchto případech se jeví použití enzymatických katalýz jako vhodný systém pro snížení nákladů a rozšíření okruhu vhodných materiálů pro následné zpracování.

### 3.3.4 Environmentální biotechnologie

Rozsáhlý výzkum je v oblasti bioremediací kontaminovaných zemí, a to i s obsahem rekalitrantních složek, za pomoci geneticky upravených bakterií. Bioremediace zemí kontaminovaných ropnými produkty, nebo polyaromatickými uhlovodíky, je již běžně aplikovaný způsob.

Pro dekontaminaci vod a plynů je v této oblasti stále ještě prostor pro návrh vhodných typů bioreaktorů. Bioreakce v tuhé fázi (biofiltrace) může být úspěšně využita pro dekontaminaci nebezpečných a pachových složek v plynech a parách. Vodícím měřítkem pro tento druh zařízení je reakční rychlost jednotlivých enzymů a množství toxických produktů obsažených v čištěných odplynech.

Je známo, že rostlinné peroxidázy oxidují aromatické sloučeniny a tvoří polymerní, ve vodě nerozpustné produkty. Tyto polymery mohou být po jejich usazení odstraněny. Tato skutečnost představuje velký potenciál pro využití rostlinných peroxidáz pro dekontaminaci odpadů obsahujících toxické aromatické látky.



Aplikace environmentálních technologií přesahují i do dalších průmyslových odvětví - papírenský průmysl, textilní průmysl, plasty, kosmetika, mýdla, detergenty.

Významným přínosem může být enzymatické odbarvování papíru, např. z recyklátů novin a kancelářského papíru. Enzymatický způsob bělení není na rozdíl od chemického způsobu strukturu vláken. Dalším způsobem může být využití bio bělení za použití xylanáz a jiných oxygenáz, které mimo jiné snižuje potřeby chloru.

Bělení je v textilním průmyslu realizováno peroxidem vodíku, který může být nahrazen použitím enzymu katalázy.

### 3.3.5 Enzymatické přípravy HVCH

Využití enzymatických reakcí pro stereoselektivní oxidace C atomů, oxidativní halogenace, oxidace nukleosidů, výroba enantio-čistých látek za použití oxygenáz, halogenáz, dehydrogenáz a reduktáz popř. aldoláz.

Další skupinu představují enzymy, které závisejí na kofaktoru thiamin difosfátu. Je to versatilní kofaktor působící v mnoha katalyzovaných reakčních drahách. Tyto enzymy jsou zejména oblíbené pro katalýzy C-C vazeb (štěpení i syntézy), vedoucích například k chirálním hydroxyketonům a podobným sloučeninám, které jsou důležitými meziproducty pro některé bioaktivní substance. Tyto enzymy jsou schopné též ovlivňovat vazby C-O-, C-S-, C-N-. Chirální hydroxyketony jsou vhodnými složkami při syntézách různých farmak (pyruvát dekarboxyláza - L-efedrin).

Pomocí geneticky manipulovaných nejjednodušších mikroorganismů (E. coli) je fermentačně konvertován cukr ze škrobu na 1,3 - propandiol, který je výchozí složkou pro polypropylen tereftalát.

## 3.4 Význam a priority výzkumu

Význam tohoto textu slouží k posouzení současného stavu a využívání jednotlivých technologií pro úpravu biomasy a pro nástín využití enzymatických procesů v průmyslových biotechnologiích. Všechny tyto technologie fungují za specifických podmínek a pro specifický materiál a je proto nutné podpořit tento výzkum v přesně definovaných oblastech a cílech, které budou zaměřené převážně lokálně na území ČR. Tímto způsobem je možné udržet konkurenceschopnost českého chemického průmyslu v tomto průmyslovém odvětví ve světě.

Základem je změnit pohled na biomasu jako na zdroj paliv bez využití ostatních produktů, které je možné získat jejich úpravou. Nabízí se zde možnost vytvoření několika cílů pro následující výzkumnou agendu právě se zaměřením na vývoj technologií pro získávání chemických látek z biomasy, které se stanou buď částečnou náhradou stávajících, nebo samostatnou novou surovinou s vysokou přidanou hodnotou.

Vzhledem k řešení závislosti na ropném průmyslu a legislativě EU se vývoj těchto technologií stává prozatím sice parciálním řešením, ale nutným.





Význam použití těchto reakčních postupů a biotechnologií spočívá ve snížení technologické, energetické a environmentální náročnosti ve stávajících procesech a nastavení nových technologií pro úsporu fosilních paliv celkově.

Metodami termochemické a enzymatické konverze lze připravit produkty s vysokou hodnotou a po zvládnutí průmyslových separačních a purifikačních metod je i nabídnout trhu.

Významným faktorem může být v této oblasti nasazení superpočítačů. Nebývalý rozvoj výkonu výpočetní techniky v posledních letech umožňuje řadu procesů simulovat s přesnějšími výsledky a v nesrovnatelně kratším časovém intervalu. To může být významný faktor při návrhu nových molekul se specifickými vlastnostmi, nebo návrhu nových aparátů.

Výzkum by měl být zacílen i na specifické spektrum plodin, které jsou příznačné pro Českou republiku a její stávající zemědělskou produkci. Je vhodné, aby tomuto výzkumu předcházela systematická studie a přehled současných technologií pro výrobu komodit a vytipování vhodných cílů a možností nahrazení jednotlivých chemických postupů postupy biotechnologickými.

Specifikace podmínek pro výrobu chemických produktů a pro chemické zpracování plodin pěstovaných v ČR dává možnost rozvoje rafinérské výroby a možnost částečného nahrazení ropných produktů v průmyslu.

Důležitým faktorem zaváděním biotechnologií do chemického průmyslu je jeho udržitelnost z hlediska zlepšení kvality výrobku, bezpečnosti práce, snížení odpadů a s nížení spotřeby energie a surovin.

Prioritou těchto výzkumných cílů by mělo být vytvoření přesně definovaných biotechnologických procesů, které by měly vycházet z celosvětových trendů, a které by měly mít možnost se uplatnit ve stávajícím průmyslu. Optimální je zavedení výše zmíněných biotechnologických procesů do průmyslu a vytvoření nových oblastí výzkumu, které kopírují cíle SVA. Takto definovaná struktura výzkumu je schopna udržet krok s celosvětovými trendy a podpořit rozvoj průmysl v ČR.

### 3.5 Cíle strategické výzkumné agendy

#### Využití biomasy pro průmyslovou biotechnologii

##### Střednědobý horizont:

- extraktivní destilace rozvětvených bio-polymerů získaných z konverzí biomasy
- využití nanofiltrace pro izolaci jednotlivých uhlovodíkových frakcí
- využití jednotlivých oleochemických frakcí
- rafinace přírodních pryskyřic
- využití odpadních produktů z fermentačních a extrakčních procesů
- zdokonalení analytických postupů kvalitativního i kvantitativního stanovení jednotlivých komponent



### **Dlouhodobý horizont:**

- optimalizace procesu zkapalňování a pyrolýzy se zaměřením na výsledné produkty
- zkvalitnění pyrolýzních bio-olejů
- výzkum katalyzátoru pro termochemické procesy
- vývoj izolace metabolitů pomocí médií v superkritickém stavu
- vývoj možnosti využití sekundárních metabolitů z velkoobjemového zpracování biomasy
- výzkum a vývoj separačních metod

### **Enzymatické biotechnologie**

#### **Střednědobý horizont:**

- výzkum mechanismů enzymových biokatalyzátorů
- výzkum metabolických drah pro sekundární metabolity
- výzkum a vývoj metod na „šití enzymů a buněk na míru“
- výzkum genetického modelování – nezastupitelný způsob přípravy enzymů
- vývoj biokatalyzátorů pro oxidace a umožňující vazbu C-C
- vyvinout metody molekulárního modelování, dovolující rychlý návrh enzymů
- zvýšení teplotních stabilit, aktivit a kompatibility biokatalyzátorů k solventům
- výzkum a vývoj rekombinantních mikroorganismů pro enantio-selektivní reakce

#### **Dlouhodobý horizont:**

- snížení nákladů na výrobu a produkci enzymů a kofaktorů
- vývoj lepších, rychlejších a ekonomicky výhodnějších biokatalyzátorů
- vývoj enzymatických katalyzátorů pro širší oblast reakcí
- techniky regenerace koenzymů
- bioreaktorové techniky, řízení procesů (membránové bioreaktory, minibioreaktory – s potlačenými projevy turbulencí)
- užití enzymů v elektrochemických syntézách
- výzkum a vývoj biopolymerů

### **Společné**

#### **Dlouhodobý horizont:**

- kategorizace a výčet vhodných zemědělských plodin pěstovaných na území ČR z hlediska možnosti získání chemických produktů s vysokou hodnotou
- selekce chemických produktů biorafinérského zpracování dle možnosti využitelnosti v průmyslu



EVROPSKÁ UNIE

EVROPSKÝ FOND PRO REGIONÁLNÍ ROZVOJ

INVESTICE DO VAŠÍ BUDOUCNOSTI



- aplikovat enzymatické a termochemické reakce na procesy s komerčním potenciálem – KOMODITY
- návrh využití biorafinérských produktů ve stávajících podmínkách chemického průmyslu v ČR



## 4 Materiálové technologie

### 4.1 Úvod

Vývoj nových materiálů s vlastnostmi připravovanými na míru je důležitým stimulem nového podnikatelského rozvoje v řadě průmyslových odvětví. Potřeba budoucích technologií se promítá přímo do rostoucích požadavků na nové chemikálie a materiály s požadovanými vlastnostmi, metod jejich přípravy, nákladovosti výroby a jejich recyklovatelnosti.

Byla registrována potřeba zlepšené identifikace příležitostí v úzké spolupráci s průmyslovými partnery a zlepšení koordinace veřejného a soukromého výzkumu k překonání omezených přírodních a finančních zdrojů s cílem zamezit fragmentaci a duplicitám úsilí.

Nanotechnologie a nanomateriály jsou jednou z foresight technologií, kterým je pro 21. století prognózována velká budoucnost s ohledem na možnosti řešení hlavních současných problémů lidstva jako jsou energie, životní prostředí a zdraví. Navrhovaná výzkumná témata vycházejí proto z aplikací nanotechnologií a nanomateriálů. Nanotechnologie a nanomateriály již v současnosti nalézají potenciální uplatnění v mnoha oblastech běžného života jako je elektronika (paměťová média, spintronika, bioelektronika, kvantová elektronika), zdravotnictví (cílená doprava léčiv, umělé klouby, chlopně, náhrada tkání, desinfekční roztoky nové generace, analyzátory, ochranné roušky), strojírenství (supertvrdé povrchy s nízkým třením, samočisticí nepoškrábatelné laky, obráběcí nástroje), stavebnictví (nové izolační materiály, samočisticí fasádní nátěry, antiadhezní obklady), chemický průmysl (nanotrubice, nanokompozity, selektivní katalýza, senzory, aerogely), textilní průmysl (nemačkávé, hydrofóbní a nešpinící se tkaniny), elektrotechnický průmysl (vysokokapacitní záznamová média, fotomateriály, palivové články), optický průmysl (optické filtry, fotonické krystaly a fotonická vlákna, integrovaná optika), automobilový průmysl (nesmáčivé povrchy, filtry čelních skel), kosmický průmysl (katalyzátory, odolné povrchy satelitů), vojenský průmysl (nanosenzory, konstrukční prvky raketoplánů), životní prostředí (odstraňování nečistot, biodegradace, značkování potravin).

Z hlediska dlouhodobé perspektivy jsou hlavními kandidáty využití výsledků výzkumu v oblasti nanotechnologií informační a komunikační technologie a zdravotnictví. Zde mohou sehrát významnou roli uhlíkové nanotubičky a fullereny. Očekává se, že se budou rozvíjet metody výroby tenkých nanodrátků do nanosenzorů (např. pro detekci chemických a biologicky nebezpečných látek). Velké naděje se vkládají do budoucího využití tzv. „extrémní nanotechnologie“, která zahrnuje manipulaci s atomy a molekulami. Jde o samoreplikující se a samosestavující se systémy, jenž mohou mít uplatnění v elektronice nebo lékařství.

Nanomateriály s vylepšenými vlastnostmi se budou používat při vysoce účinné katalýze v chemických procesech a při přeměně energie ve fotovoltaických a palivových člancích, biokonverzi energie či zpracování odpadů a kontrole ovzduší.

V medicíně se budou dále vyvíjet nová diagnostická zařízení, terapeutika, transport léků nebo biokompatibilní materiály pro implantáty a protézy.



## 4.2 Fotovoltaika (dále FV)

Lidstvo stojí před mimořádně vážným problémem jak zajistit rychle rostoucí spotřebu energie a omezené neobnovitelné zdroje energie. Fotovoltaika patří k nejperspektivnějším zdrojům energie a očekává se, že během relativně krátké doby budou FV panely vyrábět až desetinu celosvětové spotřeby energie.

Aplikace fotovoltaiky v obvodových pláštích budov (střechy, fasády) představuje významný fenomén, který přispívá k její atraktivitě a má příznivý dopad na snížení nákladů na instalaci FV systémů. Velmi široká škála pojetí fotovoltaických fasád má původ v kreativitě, která je vlastní architektonickému pohledu na životní prostředí člověka. Jsou-li standardní stavební prvky pro realizaci pláště budovy vybaveny solárními články, získává tak budova novou dimenzi. Část své běžné energetické spotřeby je schopná krýt z vlastní produkované energie.

### 4.2.1 Význam

Přehled využití obnovitelných zdrojů energie zveřejnilo MPO na webu <http://oze.tzb-info.cz/12057-obnovitelne-zdroje-energie-v-roce-2013-1-cast>, <http://oze.tzb-info.cz/12057-obnovitelne-zdroje-energie-v-roce-2013-2-cast> a <http://oze.tzb-info.cz/12127-obnovitelne-zdroje-energie-v-roce-2013-3-cast>. Solární energie je jednou z perspektivních cest i s ohledem na ekologickou nezávadnost, neprodukuje škodlivé emise, nevytváří hluk, zápach, neškodí lidem ani zvířatům, nevyzařuje záření do okolí a nespoteblovává energii. Využití solární energie je ale v ČR limitováno mnoha faktory, především její geografickou polohou.

Z hlediska praktického využití pak platí, že z jedné instalované kilowaty běžného systému (FV články z monokrystalického, popř. multikrystalického křemíku) lze za rok získat v průměru 800 – 1100 kWh elektrické energie. Účinnost současných solárních panelů dosahuje až 17 %, v laboratorních podmínkách jsou dosahovány hodnoty u monokrystalických článků až 24 %. Zásadní nevýhodou stávajících FV článků je jejich vysoká cena, vysoká energetická náročnost jejich výroby a nízká účinnost přeměny sluneční energie.

Realizací DYE sensitized solar cells (DSC) lze snížit cenu solární elektřiny až na 0,01 Euro/kWh. Účinnost přeměny sluneční energie závisí na velikosti částic – při 100 nm je účinnost pouze 69 %, při 10 nm již 99 %. Vzhledem k rostoucí poptávce po zdrojích čisté energie se pozornost odborného světa začíná věnovat právě **organickým FV článkům** s využitím TiO<sub>2</sub> a metalo-organického senzitizera. Výrobní náklady na tyto články jsou asi třikrát nižší ve srovnání s křemíkovými. Slabinou TiO<sub>2</sub> článků je dosud menší citlivost na světelné záření než u křemíku a nižší životnost. Zajímavou vlastností organických článků je možnost vytvářet z něho pružné pláty.

Další nadějnou cestou jsou nanovlákná, která budou schopna nahradit jak klasické křemíkové články, tak i novou generaci článků s nanokompozity. Nabízí možnost fungování i za snížených světelných podmínek, tedy bez slunečního svitu.



## 4.2.2 Prioritní výzkumná témata

### a) Ve střednědobém horizontu:

- využití současných technologií k výrobě levnějších a efektivnějších [solárních článků](#);
- výzkum nových [tenkovrstvých solárních článků](#);
- Building Integrated Photovoltaics – [fotovoltaika integrovaná do budov](#);
- získání komplexních znalostí umožňujících cílený návrh nanostrukturních materiálů typu nanokompozitů pí-konjugovaných polymerů a oxidů kovů pro optoelektronické aplikace, zejména pro fotoelektrochemické a pevnolátkové solární články;
- vývoj amorfních Si-hybridních materiálů pro solární články;
- vývoj přípravy velmi čistých látek pro fotovoltaiku;
- vývoj mikrovláken pro fotovoltaiku;
- vývoj technologií pro zpracování starých solárních článků;

### b) V dlouhodobém horizontu:

- koncentrační fotovoltaika budoucí generace fotovoltaické architektury, která bude využívat [nanotechnologie](#) a další pokročilé technologie, např. [nanodrátky](#) nebo polovodičové kvantové tečky
- vývoj solárních článků třetí generace (např. DYE sensitized solar cells DSC)
- vývoj vícevrstevných solárních článků (z tenkých vrstev)
- vývoj článků s vícenásobnými pásy
- vývoj článků, které by využívaly „horké“ nosiče náboje pro generaci více párů elektronů a děr
- výzkum termofotovoltaické přeměny
- výzkum termofotonické přeměny

## 4.3 Moderní katalyzátory

I malé zlepšení v efektivnosti katalyzátorů představují významné zvýšení efektivnosti výroby, snížení energetické náročnosti a negativního vlivu na životní prostředí.

Významnou roli v potřebách moderních katalyzátorů hrají i požadavky na snížení emisí zdraví škodlivých plynů jako jsou oxidy dusíku, VOC a další.

Direktiva EU 1999/30/ES pro snížení emisí u maximálních limitů oxidu dusičitého a oxidů dusíku o 20% a to již od ledna 2010 ve všech členských zemích EU.

Jednou ze strategických výzkumných oblastí jsou originální konstrukce katalyzátorů založených na nanočásticích a sebeuspořádajících kov-organických komplexech s non-kovalentními vazbami pro katalytické aplikace a studium strukturních a elektronických vlastností těchto supramolekulárních systémů. Supramolekulární nanočástice obsahující různé ušlechtilé nebo přechodné kovy byly shledány jako vhodné katalyzátory pro širokou škálu reakcí: např. hydrogenace, hydrosilizace, hydrogenolysu, oxidační reakce a přímá přeměna v palivových článcích. Tyto nanočástice mají mnoho dalších potenciálních aplikací, jako jsou kvantové tečky pro použití ve speciálních elektronických součástkách, nanovlákna, chemické



senzory, světlo-emitující diody a magnetizované kapaliny. Výzkumnými záměry je pomocí vysoce efektivního modelování hledat nové teoretické přístupy k přípravě katalyzátorů, modelování polymerace, katalyzátory a získat další znalosti o molekulárních mechanismech heterogenní katalýzy a aktivace / deaktivace katalyzátorů v nano rozměrech.

#### 4.3.1 Význam

ČR má významnou fundovanou vědeckou základnu pro procesní inženýrství a vývoj katalyzátorů, včetně fotokatalyzátorů.

Aplikace nepigmentových forem  $\text{TiO}_2$  se neustále rozšiřují a vedle již delší dobu zavedených aplikací ultrajemné titanové běloby vznikají stále nové náměty. Významná část těchto aplikací využívá fotokatalytického efektu povrchu  $\text{TiO}_2$  pokud je osvětlen světlem nebo vysoké absorpční schopnosti vůči UV záření.

Mezi rychle se rozvíjející aplikace nano  $\text{TiO}_2$  patří samočisticí povrchy (keramika, nátěrové hmoty, vlákna, stavební materiály, zvukové bariéry, plasty, sklo, textil) a fotokatalyzátory (čištění vody, vzduchu, kontaminované zeminy). V současné době cca 54 % ultrajemné  $\text{TiO}_2$  je používáno pro výrobu katalyzátorů. Ultrajemný velmi čistý oxid titaničitý je vhodným prokurzorem pro výrobu  $\text{DeNO}_x$  katalyzátorů, katalyzátorů pro Clausův proces, pro oxidaci  $\text{SO}_2$  na  $\text{SO}_3$ , katalyzátorů pro epoxidaci olefinů, pro Fisher-Tropschovy syntézy, konverzi oxylenu na ftalanhydrid, konverze toluenu na benzaldehyd, pro parciální oxidaci  $\text{CH}_4$  na formaldehyd nebo hydrodesulfurizaci.

Samostatnou kapitolou jsou fotokatalyzátory. Tyto materiály mají díky fotokatalýze schopnost rozkládat organické látky v přímém kontaktu s aktivovaným povrchem, mají samočisticí vlastnosti, rozkládají znečišťující látky z ovzduší:  $\text{NO}_x$ ,  $\text{SO}_x$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}$ , aromatické uhlovodíky, aldehydy, organické chloridy, PM aj.

#### 4.3.2 Prioritní výzkumná témata:

##### a) Střednědobý horizont:

- výzkum homogenní a heterogenní katalýzy
- vývoj heterogenní katalýzy na bázi Pd, Pt, Raney Ni a Co, katalyzátorů na bázi Cu a Cr. Rozvoj homogenní katalýzy - katalyzátory Wilkinsonova typu, na bázi Ir a Rh, komplexní sloučeniny přechodných kovů, binukleární katalyzátory.
- nízkoteplotní katalýza pro rozklad zdraví škodlivých látek jako VOC ze stavebních hmot, lepidel a čisticích prostředků v interiérech;
- vývoj katalytických samočisticích povrchů pro fasády, barvy, zvukové bariéry
- vývoj katalytické vnitřní vrstvy obalů potravin pro odstranění zbytkového kyslíku pro skladování potravin.
- vývoj katalytického čištění vody v domácnostech
- výzkum výroby lehce nebo samočisticí superhydrofobní plochy (vrstvy oxidů wolframu,  $\text{TiO}_2$ ...) pro různé užití např. stěnové barvy, okna, auta, zvukové bariéry, oděvy
- vývoj nanostrukturních materiálů pro katalytické, elektrokatalytické a sorpční aplikace



- výzkum přípravy funkčních materiálů a materiálových technologií s využitím mikro – a nanoskopických metod;
- vývoj katalyzátorů pro domácí pračky a čisticí zařízení;

**b) Dlouhodobý horizont:**

- vypracovat metody přípravy nových nanostrukturních a nanokompozitních materiálů založených na unikátních vlastnostech nanočástic (slitin) kovů a (směsných) oxidů kovů a jejich interakci s anorganickými nosiči;
- získat systematické údaje týkající se principu fungování těchto materiálů v katalytických, elektrokatalytických a sorpčních aplikacích;
- objasnění mechanismu růstu kovových nanoklastrů, faktorů pro růst, vznik-kov obsahující micely blokových kopolymerů a na redukci solí kovů a možnost převodu nano struktur na ostatní média;
- vývoj průmyslové výroby nanostrukturních materiálů pro katalytické, elektrokatalytické a sorpční aplikace;
- vývoj přimíchávání katalytického centra do nanovláken a uhlíkových nanotrubic (různé modifikace povrchu vláken, templátování);
- vývoj polymer-stabilizovaný bimetalový nanokatalyzátorů;
- výzkum metalocenových katalyzátorů.

#### 4.4 Efektivní světelné zdroje

Tento program je součástí vize „domu budoucnosti“, který bude generovat energii a programů k úsporám energie. Prosazující se svítidla na bázi LED a OLED jsou v oblasti optických technologií příslibem pro zcela nové osvětlovací systémy. Zvýšení životnosti a účinnosti a spolehlivá výroba větších a flexibilnějších světelných ploch jsou rovněž cílem budoucí výzkumné činnosti.

Velkou výhodou LED diod oproti předchozím zdrojům světla je dlouhá životnost a nízká spotřeba energie. Při provozu LED diod nevzniká UV ani IR optické záření a nevyžadují složitou likvidaci. Nevýhodou oproti jiným světelným zdrojům je vyšší cena, které s rostoucí produkcí rychle klesá. Displeje z organických světlo emitujících diod OLED (Organic Light-Emitting Diode) jsou složeny z tenkých vrstev organického materiálu. Dnes se zatím nejčastěji využívají v malých zařízeních, jako jsou MP3 přehrávače, mobilní telefony či PDA. Začínají se však na trhu objevovat první OLED televize a s OLED displeji se počítá jako s nástupci LCD.

##### 4.4.1 Význam

Samotná OLED technologie má ambice nejen v počítačové resp. vizuální technice, ale také jako například v osvětlení místností. Protože jsou náklady na výrobu skutečně nízké, není problém vyrobit například desku na celý strop místnosti, která v případě potřeby bude svítit (samozřejmě je plynulá regulace jasu). Roste poptávka po OLED televizích. Pokud se OLED televizím podaří zbavit se dětských nemocí, především nízké životnosti, mají potenciál k postupné náhradě LCD obrazovek.





#### 4.4.2 Prioritní výzkumná témata:

##### a) Střednědobý horizont

- vývoj nových vysoce efektivních LED na základě nových substancí jako náhrada žárovek všech typů;
- zvýšení životnosti a efektivnosti LED a OLED;
- vývojem levnějších výrobních postupů vhodných chemických materiálů;
- vývoj nových světelných zdrojů a emitujících materiálů pro LED (Si, SiC, GaP, GaAs);
- architektura stavebních dílů pro osvětlovací zařízení;
- vývoj nových substancí vhodných pro LED a OLED diody.

#### 4.5 Spotřební výrobky (kosmetika, nátěrové hmoty, textil, obaly a další)

Jedním ze základních cílů Vize české chemie je přispět ke zlepšení kvality života při zachování principů trvalé udržitelnosti. Aplikacemi moderních technologií jako jsou nanotechnologie nebo biotechnologie lze získat nové materiály a výrobky s vyšší přidanou hodnotou často při využití obnovitelných zdrojů surovin.

Implementace moderní kontroly potravin a smart obalů umožní lepší management skladování potravin a současně umožní zákazníkům prokazatelně určit kvalitu výrobků. Smart obaly budou fungovat nejenom jako ochrana proti znečištění a proti oxidaci, ale budou fungovat současně jako senzory kvality, což je efektivnější než udávání doby respirace.

Dalším aspektem je vývoj nových anorganických UV absorbérů jak pro kosmetiku, tak pro nátěrové hmoty, plasty a vlákna. Ochrana proti zdraví škodlivému UV záření je jedním z opatření pro zdraví lidí.

Moderní technologie významně ovlivní vývoj i v textilním průmyslu. Příkladem využití nanočástic v těchto odvětvích může být výroba nemačkových a nešpinících se bavlněných tkanin, povlaků odolných vůči poškrábání se samočisticí schopností, nešpinivé antibakteriální a dezodorizační textilie a inteligentní oděvy schopné monitorovat puls a dýchání a regulovat teplotu.

##### 4.5.1 Význam

Rozvoj moderní chemie významně iniciuje spotřební průmysl. Výrobky chemického průmyslu jsou směřovány z cca 30 % právě pro spotřební zboží. Zvyšujícímu se dovozu spotřebního zboží a ztrátě konkurenceschopnosti lze čelit vyšší mírou inovací a snižováním výrobních nákladů. Právě nové materiály a nové technologie mohou přinést potřebný inovační impulsy.

V ČR jsou vhodné technické a výrobní předpoklady pro urychlení vývoje v naznačených směrech.



#### 4.5.2 Prioritní výzkumná témata

##### a) Střednědobý horizont:

- vývoj moderních zdravotně nezávadných anorganických UV absorbérů jak pro nátěrové hmoty, tak pro kosmetiku a plasty;
- vývoj transparentních UV absorbérů pro práškové nátěrové hmoty nanášené elektrostaticky;
- vývoj způsobů fixace práškových nanomateriálů na povrchu vybraných typů modelových textilií – vlivy na fotoaktivitu výsledné textilie;
- vývoj textilních pomocných prostředků umožňujících dostatečně pevnou a stabilní fixaci fotoaktivního prášku na povrch textilie;
- vývoj způsobu aplikace práškových materiálů na vlákenné substráty – ověření možných způsobů ochrany vlákna před fotoaktivitou materiálů na bázi TiO<sub>2</sub>;
- laboratorní a poloprovozní studium dispergace a mokrého mletí anatasového typu titanové běloby;

##### b) Dlouhodobý horizont:

- vývoj přípravy do textilu integrovaných senzorů;
- vývoj výroby samočistitelné nátěrové hmoty s delší životností, s vysokou odolností proti poškrábání a vysokou povětrnostní odolností;
- vývoj nových funkcionálních nátěrových hmot pro automobily, které zvyšují povětrnostní odolnost (nebo odolnost vůči vodě), snižují odpor vzduchu, a proto snižují spotřebu paliva a tedy snižují negativní dopad na životní prostředí.

#### 4.6 Nanokompozity

Nanokompozity jsou materiály složené ze dvou nebo více různých složek, z nich alespoň jedna se v materiálu vyskytuje ve formě částic o velikostech jednotek až desítek nanometrů, přičemž často jde o aktivní nanočástice, tj. částice se zajímavými optickými, magnetickými, elektrickými a jinými vlastnostmi rovnoměrně rozptýlené v nejčastěji v polymerní matici. Důvodem použití aktivní látky ve formě nanočástic jsou její kvalitativně odlišné fyzikální vlastnosti oproti běžným plnivům. Vlastnosti nanokompozitů se odvíjejí jednak od složení, ale zároveň od velikosti částic, jejich morfologie a uspořádání. Kompozitní nanomateriály mají velmi široké použití. Například ukládání informací, magnetické chlazení, ferrofluidy, zobrazovací metody v medicíně, různé senzory, elektromechanické a magnetomechanické měniče, antiseptická vlákna, a mnohé další.

Polymerní nanokompozity s anorganickými nanoplňivy (jíly, oxidy, kovy,...) mají dnes již poměrně široké průmyslové využití, např. automobilovém, leteckém a obranném průmyslu. Jednou ze stěžejních otázek přípravy těchto materiálů ale zůstává dispergace nanoplňiva v matici a jeho adheze k polymeru. Perspektivní jsou plastové konstrukční materiály, které budou mít vyšší pevnost, tvrdost, tvarovou stálost, větší tepelnou stabilitu a menší hořlavost. Polymerní nanokompozity se také uplatňují v případě nátěrových hmot a povrchových úprav. Takto lze použitím nanoplňiv očekávat zlepšení následujících vlastností: odolnosti proti poškrábání, zlepšení tepelné odolnosti, vzrůst tvrdosti, zlepšení oděruvzdornosti, zlepšení bariérového efektu (nižší plyno- a paropropustnost), zvýšení odolnosti proti UV záření,



snížení koeficientu tření na povrchu úpravy, snížení hodnoty expanzního koeficientu, snížení prostupnosti vůči kapalinám, snížení hořlavosti, antimikrobiální vlastnosti, rozměrovou stálost, zvýšenou odolnost proti šíření trhlin. Je tak možnost ovlivnit nejen životnost, ale tyto změny jsou extrémně důležité z hlediska konečné aplikace takového materiálu. Vyvíjené nanokompozity naleznou uplatnění zejména při zvyšování kvality plastových, gumárenských a dalších polymerních výrobků.

Stále více se budou používat nanomateriály v otěruvzdorných a korozivzdorných povlacích, v nových keramických materiálech pro výrobu vodních trysek, injektorů, opláštění zbraňových systémů či povlékání elektrod v energetických zařízeních. V elektronice se budou nahrazovat současné logické obvody optickými spoji. Nanotrubičky budou využívány pro výrobu pružných obrazovek, displejů a velkokapacitních paměti. V energetice se trubičky využijí pro uskladňování vodíku pro palivové články. Výzkumné práce budou zaměřeny zejména na přípravu nanočástic, dispergační proces a na studium vlivu modifikujících látek na konečné vlastnosti nanokompozitů.

Mezi nanokompozity lze také zařadit tzv. „chytré, inteligentní“ nátěry a povlaky, pokud jsou založeny na využití různých typů nanočástic. Tyto nátěry mají nové vlastnosti a funkce a jsou schopny reagovat na vnější podněty a interagovat s okolím. V současné době jsou tyto nátěry používány hlavně jako clearcoaty v automobilovém průmyslu a nanostrukturované elektro- nebo opticky aktivní inteligentní povrchy.

Zatím neprobádanou oblastí je ale vliv nanočástic na životní prostředí. Nanočástice zabudované v matrici, např. v platech asi zvláštní nebezpečí nepředstavují, ale nanočástice, které jsou např. v interiérových nátěrových barvách, mohou být potenciálně nebezpečné. Stejně tak antibakteriální stříbro přidávané do pracích prášků, může být potenciálně problémem pro biologické čistírny odpadních vod.

#### 4.6.1 Význam

Nanokompozity jsou reálnou aplikací nanomateriálů a nanotechnologií v řadě významných oborů techniky. Tyto materiály často s novými vynikajícími vlastnostmi přinášejí do řady odvětví žádoucí inovace a nezachycení těchto trendů může negativně ovlivnit budoucí konkurenceschopnost např. strojírenství, automobilového průmyslu, výroby nátěrových hmot, stavebnictví a atd. ČR má dobré předpoklady pro efektivní rozvoj aplikací moderních nanokompozitů.

Možný směr vývoje nanokompozitů by mohla být i možnost aplikace nanovláken. Tato vlákna na bázi různých polymerů i anorganických sloučenin ( $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$ ,  $\text{TiN}$ ) jsou v ČR vyvíjena na Technické Univerzitě v Liberci v úzké spolupráci s firmou Elmarco.

#### 4.6.2 Prioritní výzkumná témata

##### a) Střednědobý horizont:

- výzkum zaměřený na pochopení efektů nano-plniv s velkým specifickým povrchem na mechanické vlastnosti, degradační a hořlavostní chování polymerů, představující velmi atraktivní část;



- výzkum podmínek přípravy nových, netradičních typů nanokompozitních materiálů na bázi montmorillonitických jílu a dalších typů anorganických nanočástic;
- vývoj metod pro dispergaci nanočástic a hodnocení jejich vlastností;
- výzkumu povlakových technologií se specializací zejména na automobilový průmysl, a výrobu dopravních prostředků;
- využití a modifikace dosavadních způsobů přípravy nanočástic ke zlepšení vlastností polymerních materiálů a optimalizaci vlastností nanokompozitu vzhledem k zamýšlené oblasti jeho využití;
- studium možností náhrady klasických (kovových) materiálů pomocí kompozitů s vlastnostmi upravenými na míru;
- vývoj povrchových úprav se zlepšenými vlastnostmi a odolností proti různým, zejména povětrnostním vlivům;
- vývoj technologií přípravy nových typů anorganických a organických nanočástic;
- vývoj citlivých a spolehlivých analytických metod pro detekci nanočástic v životním prostředí.

**b) Dlouhodobý horizont:**

- vývoj samoorganizovatelných kompozitních materiálů a “chytrých povrchů“;
- studium vlivu používání nanočástic na životní prostředí a zdraví.

## 4.7 Materiály pro zdravotnictví

Farmaceutický průmysl a medicína jsou významnými iniciátory inovací jak v materiálové, tak technologické oblasti, také díky podstatně vyšším alokacím finančních prostředků zejména ve farmacii. Díky tomu již dne můžeme registrovat řadu aplikací bio a nanomateriálů jako např. kontrastní látky pro NMR a MPI, kde se většinou využívají nanočástice oxidů, umělé klouby, náhrada tkání, desinfekční roztoky nové generace, chirurgické materiály, které zabrání srůstu některých tkání apod. Další výrazné inovace, které ovlivní řadu oborů medicíny, jako jsou diagnostika nádorů, terapie nádorů a dalších onemocnění, regenerativní medicína, jsou předmětem intenzivního výzkumu. Podrobně zkoumanou oblastí je cílená likvidace tumorů, kdy se využívá absorpčních schopností nanočástic cíleně usazených v nádorových tkáních - po ozáření infračerveným laserovým nebo vysokofrekvenčním elektromagnetickým zářením dochází k destrukci nádorové tkáně.

Nanomateriály se již nyní uplatňují v neinvazivní medicíně. Ve stomatologii je jejich aplikace nejdále v záchovné stomatologii, v oblasti kostních substituentů a v dentální implantologii. V oboru nanokompozitů se jedná především o kompozity s uhlíkovou či polymerní maticí vyztuženou uhlíkovými vlákny. Jsou považovány za perspektivní např. pro konstrukci kostních a kloubních náhrad a kostních implantátů.

Záměrem lékařského výzkumu je nalézt terapii závažných, dnes obtížně léčitelných onemocnění. Výsledky materiálového výzkumu budou využitelné ve zdravotnictví především v oborech: neurochirurgie (umělé náhrady a přemostění defektů), traumatologie (poranění mozku a míchy), neurologie (Parkinsonova choroba, roztroušená skleróza), imunologie (poruchy imunity), pediatrie (vrozené vady, perinatální poškození), ortopedie (náhrady chrupavek a kostí), oftalmologie (náhrady rohovky), otolaryngologie, stomatologie (zubní náhrady), plastická chirurgie a dermatologie. Cílem je vývoj konkrétních produktů



využitelných pro klinické studie a léčbu, ve farmaceutickém průmyslu pro vývoj diagnostických kitů, nových léků a jejich testování na buněčných liniích. V řadě případů se může jednat i o prostředky pro veterinární účely.

Nové materiály (zejména nanomateriály) na jedné straně nabízejí nové vlastnosti, na druhé straně představují i dosud ne zcela prozkoumaná rizika vyplývající zejména z jejich bioaktivity.

Hudbou budoucnosti jsou návrhy diagnostických laboratoří na čipu, intenzivně se rozvíjejí odvětví elektronické diagnostiky, kdy analyzátor, skládající se z milionů nanočidel, bude schopen zobrazit okamžitě chemické složení tělních tekutin, nebo umělé krvinky, uvažuje se s využitím nanorobotů.

Vývoj vhodných materiálů pro zdravotnictví vyžaduje velmi úzkou spolupráci s vědeckými pracovišti ve zdravotnictví.

#### 4.7.1 Význam

Farmaceutický průmysl v ČR patří mezi nejdynamičtěji se rozvíjející průmyslové obory ČR a disponuje mezinárodně srovnatelnou úrovní základního výzkumu a velmi širokou paletou vědeckých pracovišť s vysokou odbornou úrovní sledující světové trendy. Tato oblast podnikání má velkou společenskou prestiž a uznání. Vývoj nových léků, zdravotnických prostředků a léčebných postupů je celosvětově ekonomicky podporovanou prioritou. Výroba „high-tech“ léků, zdravotnických prostředků, lékařských nástrojů a zařízení pro farmacii jsou ekonomicky výhodnou činností s vysokou přidanou hodnotou.

Díky vynálezům Technické univerzity Liberec v oblasti nanovláken se rozvíjejí aplikace externích a interních krytů ran a popálenin, tkáňové separační materiály a dočasné záplaty, různé materiály pro tkáňové inženýrství, v první řadě jako náhrada kůže, chrupavky a kostí, ale i jako náhrada různých funkčních tkání některých orgánů (např. jater a pankreasu), nervových vláken apod. Výrobky ke krytí ran mohou mít i hojivé účinky od zastavení krvácení po zabránění mokvání či přístupu bakterií a nečistost. Zkoumají se možnosti implementovat do obvazu léčivé látky, které se postupně uvolňují a ničí bakterie v okolí rány.

Chemický průmysl by mohl být zdrojem ekonomicky dostupných základních materiálů, jako jsou speciální polymery, biomateriály nebo nanomateriály. Tyto materiály musí respektovat základní požadavky medicíny a to jak netoxičnost, tak biokompatibilitu. Jedním z příkladů aplikace nových materiálů je oxycelulóza vyráběná v Synthesii. Chemický výzkum může významně přispět k objasnění jevů v tenkých vrstvách. Další skupinou materiálů jsou biopolymery, které jsou plně biokompatibilní, zcela netoxické a plně biodegradovatelné a navíc jsou dostupné jako suroviny průmyslově vyráběné v požadované čistotě.

Výzkum nových materiálů pro zdravotnictví se v zásadě ubírá ke čtyřem různým skupinám aplikací:

- nosiče léků určené pro jejich cílenou distribuci,
- dále materiály pro tzv. regenerativní medicínu a hojení ran (tkáňové inženýrství, biokompatibilní materiály a vrstvy),
- nanosystémy pro přenos genetických informací a genovou terapii
- biosenzory a diagnostické systémy.



Díky tomu, že nanomateriály vykazují vysoce specifické a jedinečné vlastnosti, které materiály s klasickými rozměry nemají, lze předpokládat, že systémy postavené na takovýchto materiálech budou mít v medicíně velkou budoucnost. Na základě marketingového průzkumu lze říci, že medicína na takovéto materiály a výrobky z nich doslova čeká a v podstatě je na počátku jejich užívání.

Již nastartované výzkumné programy se zabývají vývojem nové generace farmaceutických a magnetických nanočástic pro cílenou dopravu léčiv a širokou paletou aplikací nanovláken. Důležitým předpokladem úspěšné komercializace je úzké obchodní a technické napojení na přední evropské a světové farmaceutické firmy.

#### 4.7.2 Prioritní výzkumná témata

##### a) Střednědobý horizont:

- vývoj nové generace farmaceutických a magnetických nanočástic pro cílenou dopravu léčiv;
- vývoj speciálních materiálů (scaffoldů), které budou sloužit jako „lešení“ pro pěstování tkáňové kultury buněk lidské chrupavky. Scaffold se osází buňkami pacienta a vypěstuje se na něm mimo tělo pacientova jeho vlastní plnohodnotná tkáň – může to být kostní tkáň, nervová tkáň, chrupavka nebo jaterní buňky. TUL se zaměřuje na scaffoldy vhodné pro kolenní chrupavkové implantáty a pro náhrady jaterní tkáně;
- vývoj vhodných biopolymerů pro farmacii;
- vývoj tzv. bioanalogických polymerů (doprava léků, náhrada kůže nebo kostní dřevě);
- vývoj nanokomplexů, včetně hybridních materiálů ovladatelných vnějším magnetickým polem;
- vývoj výroby nových membrán pro dialýzu;

##### b) Dlouhodobý horizont:

- vývoj třídíčů buněk s aplikací nanotechnologií;
- rozvoj laboratorních metod na čipu;
- vývoj adaptivního sítnicového implantátu pro pacienty postižené onemocněním retinitis pigmentosa (postupný rozpad oční sítnice);
- vývoj přenosu genové informace, její aktivace a biodegradace v organismu.

#### 4.8 Závěry

Podpora aplikovaného výzkumu, který by přinesl efekty v relativně kratším výhledu, je důležitá zejména z toho důvodu, že po odeznění globální recese by měly tuzemské firmy nabídnout inovativní produkty s daleko vyšší přidanou hodnotou. Jde o zásadní otázky rozvoje konkurenceschopnosti ČR. Není reálné, že by v dohledné době bylo možno dosáhnout vedoucího postavení v Evropě v řadě oborů, proto je žádoucí koncentrace lidských, materiálových a zejména finančních zdrojů. V ČR registrujeme vzrůstající počet vědeckých ústavů, sdružení a soukromých společností, máme mezinárodně srovnatelnou úroveň



EVROPSKÁ UNIE

EVROPSKÝ FOND PRO REGIONÁLNÍ ROZVOJ

INVESTICE DO VAŠÍ BUDOUCNOSTI



základního výzkumu a nadprůměrný vědecký a osobnostní, potenciál českých malých a středních firem.

Na druhé straně byla postrádána existence národního nanotechnologického programu podporujícího aplikační výzkum a komercializaci získaných výsledků. Přetrvává nedostatečná provázanost mezi výzkumem a průmyslovými aplikacemi. V ČR je rovněž nedostatečné finanční zázemí a zkušenosti s tržní realizací větších inovačních projektů. Přes rostoucí zapojení základního výzkumu do mezinárodní spolupráce jsou minimální realizační výstupy do průmyslu ČR.

Komercializace nových materiálů vyžaduje dořešit zásadní problémy standardizace metod pro stanovení míry rizik jejich aplikací a výroby, ale také v ověřování jejich nových vlastností. Navrhujeme realizovat propagační a informační kampaň, zejména v oblasti nanomateriálů a nanotechnologií. Veřejnost by měla být informována jak o přínosech nových materiálů, tak i o cestách snižování rizik z jejich masového rozvoje. Negativní vztah veřejnosti k novým materiálům a technologiím může být značnou překážkou pro jejich rychlejší implementaci. Rychlejšímu zavádění nových materiálů do komerční praxe by významně přispěla úprava legislativy.



## 5 Nové procesy a zařízení

### 5.1 Úvod

Předkládaný text přináší pohledy na vybranou aktuální oblast chemické technologie, ve které se řeší problematika tzv. „čistých“ technologií s minimálním dopadem jejich provozování na kontaminaci životního prostředí a jejich význam pro chemický průmysl. V této studii je diskutována dále problematika miniaturizace procesů a aparátů, vedoucí ke zvýšené bezpečnosti provozu a snadnější intenzifikaci technologií především v oblasti chemických specialit.

V poslední době byly hledány způsoby, jak přesně stanovit kinetiku chemické přeměny za definovaných podmínek, a hlavně, jak bezpečně provozovat chemický proces. Jednou z cest představuje právě postup zmenšování měřítka (scale-down), který současně předpokládá přeměnu vsádkového procesu na kontinuální režim. Je evidentní, že řízení kontinuálního procesu v ustáleném stavu je jednodušší a současně zajišťuje časově konstantní, přesně definovanou kvalitu produktu. Výhodné řešení takového uspořádání představují mikrotechnologie, mikroreaktory a další aparáty malých rozměrů, provozované v průtočném, kontinuálním režimu s intenzivním přenosem hmoty, tepla a hybnosti. Předností je evidentně velmi vysoký poměr povrchu individuálního kanálku k jeho objemu, který dosahuje až 200krát větší hodnoty než má například baňka objemu 100 ml.

Chemické inženýrství jako samostatná disciplína vzniklo z nutnosti zvětšování měřítka (scale-up) chemických aparátů a výrobních procesů. K tomu bylo zapotřebí pochopit nejen přenosové jevy, tedy poznat podstatu sdílení hmoty, tepla a hybnosti v homogenních i heterogenních systémech, ale zvláště pak jejich interakci s probíhající chemickou reakcí, doprovázenou ve většině případů změnou entalpie. Ne vždy bylo k dispozici dostatek fyzikálně chemických dat o daném systému a tedy bylo nezbytné kvůli bezpečnému provozu zařízení a celého výrobního procesu budovat čtvrtprovozní a poloprovozní aparatury pro úspěšné převedení laboratorních poznatků do průmyslového měřítka. Je jasné, že v případě rychlé reakce a silně exotermního procesu může dojít ve větším reaktoru ke značnému přehřátí reakční směsi, spojenému se snížením selektivity reakce (tvorba vedlejších produktů při vyšší teplotě) a v některých případech až s havárií reaktoru s fatálními důsledky.

### 5.2 Oxidace pro čisté technologie

#### 5.2.1 Význam pro udržitelný rozvoj ekologicky přijatelných technologií

Na rozdíl od mechanických, například strojírenských technologií, vznikají v chemické výrobě odpadní proudy, které nelze jednoduše eliminovat, protože vznik nežádoucích vedlejších produktů a výtěžnost procesů je dána přírodními zákony nezávislými na lidském snažení. Přes značné úsilí spojené s regenerací surovin a náročnými separačními postupy zejména při syntéze farmaceutických a barvářských produktů značný podíl organických sloučenin odchází





z výroben jako součást procesních nebo odpadních vod případně emisí. Trvale udržitelný rozvoj průmyslu, přechod na tzv. čisté technologie a recyklace procesních toků si vynucují zavedení specifických čistících operací přímo do výrobních jednotek.

Typické koncentrované průmyslové odpadní vody z výroby speciálních chemikálií, farmaceutických preparátů nebo barvářských výrobků obsahují organické látky, většinou substituované aromáty, které jsou buď obtížně rozložitelné, nebo toxické pro aktivní kaly biologických čistíren. Složení těchto procesních vod je obvykle známé a nečistoty lze odstranit specifickými postupy v rámci vlastní výrobní jednotky. Tyto čistící procesy jsou součástí regenerace či předčištění procesních vod, popř. izolace a dalšího zpracování anorganických chemikálií obsažených v procesních vodách. Složení odpadní vody je charakterizováno obsahem chemicky oxidovatelných látek CHSK (chemická spotřeba kyslíku) a obsahem biologicky rozložitelných látek BSK<sub>5</sub> (pětidenní biologická spotřeba kyslíku). Faktory, které ztěžují biologický rozklad, jsou značná kyselost nebo alkalita vod, kladoucí nároky na neutralizaci a korozi zařízení a obvykle i vysoký obsah anorganických solí, které mají vliv na rozpustnost kyslíku i organických nečistot. Objem odpadních vod a požadavky kladené na vyčištěnou vodu pak určují výběr metody, kapacity zařízení a podmínek čištění.

Návrh řešení likvidace nečistot zahrnuje nejen volbu metod zpracování vod, kterou podmiňují nejen vlastnosti zpracovávané odpadní vody, ale i technologické a ekonomické možnosti zpracovatele, např. využití existujících zařízení a dalších zdrojů. Volba typu chemického reaktoru závisí na objemu zpracovávaných vod a nutné době zdržení. Provozní podmínky a vhodné oxidovadlo určuje potřebná míra oxidace a cena. Nezbytnou součástí řešení musí být i rozvaha o ekonomickém využití značného reakčního tepla a s tím související provozní bezpečnost procesu.

### 5.2.2 Priority pro zpracování odpadních vod

Oxidace organických látek ve vodách se provádí nejčastěji a také nejekonomičtěji v biologických čistírnách odpadních vod. Nevýhodou biologického čištění je však nízká maximální vstupní koncentrace nečistot ( $\text{CHSK} < 15 \text{ g.l}^{-1}$ ) a dále nemožnost zpracovávat látky toxické, baktericidní nebo pěnотvorné.

Další skupinou jsou metody používané původně pro náročnější úpravy pitné vody, označované jako chemické oxidace nebo jako pokročilé oxidační procesy, probíhající za atmosférického tlaku a teploty okolí. Principem jejich působení je vznik radikálů s oxidačními účinky, ponejvíce hydroxylového. Nejznámější z nich - ozonizace však vyžaduje řádově nižší koncentrace oxidovatelných látek proti biologickému čištění ( $\text{CHSK} \sim 0,5-1,7 \text{ g.l}^{-1}$ ), používá se vzduch nebo kyslík obohacený cca 10 % ozónu, výhodou je třináctinásobně větší rozpustnost ozónu ve vodě proti kyslíku. Fotooxidací, působením ultrafialového záření na peroxid vodíku nebo na polovodičový katalyzátor  $\text{TiO}_2$  se uvolňují také hydroxylové radikály se silně oxidačním účinkem. Oxidaci organických nečistot za vzniku oligomerů a jejich následnou koagulaci podporuje systém enzymu peroxidasa a peroxid vodíku. Koncentrovanější odpadní vody lze zpracovávat více jak 100 let známou Fentonovou reakcí, reaktivní hydroxylové radikály vznikají reakcí peroxidu vodíku se železnatými ionty v kyselém prostředí. Následnou neutralizací dojde navíc ke koagulaci vysrážením hydroxidu železitého.



Zvláštní místo v tomto výčtu zaujímá tzv. mokrá oxidace nečistot ve vodách vzduchem nebo kyslíkem za zvýšeného tlaku a teploty. Tento proces se nabízí jako nejvhodnější vzhledem k vysokým koncentracím (CHSK  $\sim$  20-200 g.l<sup>-1</sup>) nečistot v průmyslových vodách a velké kapacitě zpracování.

Spalování odpadních vod je výhodné až za podmínky, kdy spalné teplo nečistot (CHSK  $>$  200 g.l<sup>-1</sup>) kryje výparné teplo vody a ohřev spalin. Přítomnost většího množství anorganických solí ve vodách může však působit technické problémy, např. tvorbou úsad.

### 5.3 Rozklad polutantů procesem mokré oxidace

Mokrá oxidace se v současnosti provádí buď jako předstupeň před biologickým čištěním (pak dostačuje vést oxidaci do stadia biologicky dále rozložitelných látek, např. kyseliny octové), nebo se provozuje s cílem regenerace nebo dalšího zpracování anorganických látek ve vodách, např. regenerace chemikálií z výroby celulózy (pak je nezbytná totální oxidace organických látek až na oxid uhličitý a vodu).

Oxidaci organických látek charakterizuje volně radikálový mechanismus, probíhající přes stadium hydroperoxidů. Mírnějších reakčních podmínek lze dosáhnout použitím katalyzátorů na bázi kovových iontů a oxidů Mn, Cu, Fe, Zn a vzácných kovů Pt, Pd, Ru. Meziprodukty oxidace jsou nižší organické kyseliny, např. octová, které jsou značně odolné vůči další oxidaci. Výhodou procesu je autotermní provozování, kdy reakční teplo hradí energetické nároky na ohřev a poměrně nízká teplota proti spalování neumožňuje vznik dioxinů. Nevýhodou postupu je značně korozivní prostředí kladoucí velké nároky na materiál reaktoru, který musí být alespoň smaltovaný a v případě chlorovaných látek dokonce plátovaný titanem.

Realizované procesy mokré oxidace lze rozdělit do tří skupin podle podmínek, za nichž se oxidace provozuje. Přehled je uveden v Tab. I. Klasická mokrá oxidace vzduchem byla realizována v Norsku v roce 1958 pro regeneraci chemikálií z výroby celulózy. V současnosti je na světě v provozu asi 200 jednotek, řada z nich se používá také na oxidaci kalů z biologických čistíren. Oxidace je vedena v kontinuálních probublávaných reaktorech za teplot kolem 250 °C a tlaků cca 15 MPa.



**Tab. I.: Realizované procesy mokré oxidace**

Reakční podmínky	Katalytická mokrá oxidace	Mokrá oxidace vzduchem	Superkritická* mokrá oxidace
Teplota, °C	130 - 250	200 - 325	370 – 570
Tlak, MPa	2 - 5	2 - 21	22 – 27
Doba zdržení, min	10 - 60	10 - 90	1 – 10
Konverze	90 - 98	80 - 99	99 - 99,999
Produkty	CO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, N <sub>2</sub> soli a organ. kyseliny	CO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, N <sub>2</sub> soli a organ. kyseliny	CO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, N <sub>2</sub> Soli
Reaktory	autoklávy, probublávané kolony, zkrápěné reaktory	probublávané kolony	trubka v trubce uložená v hloubkovém vrtu 1500-3000 m
Odhad nákladů €·m <sup>-3</sup>	15 (Nippon Shokubai)	20 - 40 (Zimpro)	40 - 150 (EWT)

\*Pozn.: Kritický bod vody  $T_c = 373,976$  °C,  $p_c = 22,055$  MPa

Modifikací určenou pro speciální použití je oxidace provozovaná nad kritickým bodem vody, kdy dochází k dokonalé homogenizaci organických látek a kyslíku v prostředí. Tato "superkritická" oxidace je určena pro likvidaci zvláště nebezpečných látek. Proces je značně investičně a energeticky náročný, při teplotách nad 500 °C se udržuje reakčním teplem. Vysokého tlaku se dosahuje hydrostatickým tlakem reakční směsi, protože reaktor typu "trubka v trubce" je umístěn v hloubkovém vrtu.

Použitím katalyzátorů lze zmírnit reakční podmínky na teploty do 150 °C a tlaky kolem 5 MPa. Oxidace se provádí buď vsádkově v autoklávech, nebo kontinuálně v probublávaných reaktorech katalyzovaná většinou solemi mědi nebo železa a ve zkrápěných reaktorech s tvarovaným nosičovým katalyzátorem na bázi vzácných kovů. Právě tyto kontinuální procesy mokré oxidace se uplatňují jako součást jednotlivých výrobních jednotek ve farmaceutickém nebo barvářském průmyslu s cílem zlepšení biologické rozložitelnosti odpadních proudů. Jednotky tedy oxidují buď chemická individua, nebo podobné látky a téměř konstantní složení oxidované odpadní vody umožňuje optimalizovat jejich návrh i provoz.

#### 5.4 Technologické aspekty katalytických mokrých oxidací

K významným faktorům, které determinují technologický postup mokré oxidace, patří autokatalytický průběh reakce, velké množství paralelně následných reakcí za vzniku obtížně oxidovatelných nižších karboxylových kyselin a vývoj značného reakčního tepla.

Radikálové reakce vykazují autokatalytický průběh charakterizovaný na počátku tzv. indukční periodou, kdy reakce probíhá jen velmi pomalu. Indukční perioda je po dosažení kritické koncentrace hydroperoxidů následována autokatalytickým průběhem, kdy je reakce urychlována vznikajícími radikálovými meziprodukty. Katalyzátor zkrátí indukční periodu a potlačí potenciální nebezpečí skryté v latentním průběhu oxidace, následovaném vybavením velkého množství tepla.



Celkový popis rychlosti oxidace organických látek ve vodách uvažuje rychlou oxidaci výchozích látek a reaktivních meziproductů následovanou pomalou oxidací karboxylových kyselin až na oxid uhličitý a vodu. Kyselé prostředí a kyslíková atmosféra mají značně korozivní účinky na kovové materiály reaktorů, které je třeba smaltovat nebo chránit plastem.

Komplikaci představuje anomální rozpouštění kyslíku ve vodných roztocích, protože na koncentraci rozpuštěného kyslíku závisí rychlost oxidace. Závislost rozpustnosti kyslíku na teplotě vykazuje minimum v okolí bodu varu vody, zvláště patrné při vyšším tlaku. Za nízkého tlaku rozpustnost kyslíku ve vodě s teplotou klesá, naopak procesy superkritické oxidace využívají dokonalé mísitelnosti vody, organických látek a kyslíku za vysokých teplot a tlaků.

Během všech oxidačních procesů se uvolňuje značné množství reakčního tepla. U odpadních vod s vyšším obsahem organických látek, řádově několik procent, může při oxidaci dojít k ohřevu až o několik set stupňů, proto je třeba při návrhu brát v úvahu chlazení a využití reakčního tepla, včetně hledisek provozní bezpečnosti.

Rychlost oxidace látek ve vodě lze stanovit ze spotřeby kyslíku, analýzy složení nebo stanovení parametrů jako jsou CHSK a celkový organický uhlík. Vyhodnocení průběhu oxidace a stanovení kinetických parametrů lze s výhodou provádět pomocí simulátorů technologických procesů, např. AspenPlus.

## 5.5 Závažná témata výzkumu procesů pro ochranu prostředí

Jako ukázky aplikací katalytické mokré oxidace lze uvést příklady oxidací vod z výroby významného barvářského poloproductu H kyseliny a odpadní vody z výroby kyseliny akrylové, výchozí suroviny řady disperzí pro nátěrové hmoty a stavebnictví (VCHZ Syntezia, Pardubice Rybitví). Po krystalizaci významného barvářského productu, kyseliny 4-amino-5-hydroxy-naftalen-2,7-disulfonová, tzv. H kyseliny, z níž vychází celá řada azobarviv, odpadají filtráty s vysokým obsahem biologicky obtížně rozložitelných látek. Odpadní vodu charakterizuje obsah až 5 % organických látek a 25 %  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ , CHSK  $60 \text{ g.l}^{-1}$ , značná kyselost  $\text{pH} = 1,5$  a objem desítek tun denně.

Návrh řešení čištění těchto vod spočívá ve zvýšení biologické rozložitelnosti přítomných organických látek katalytickou mokrou oxidací a následném zpracování v biologické čistírně za současného využití existujících nízkotlakých smaltovaných aparátů. Nevýhodu nízké koncentrace rozpuštěného kyslíku lze překonat např. kombinací mokré oxidace s chemickými oxidačními procesy.

Podobně i vody odcházejících z výroby kyseliny akrylové dosahují značných objemů a jejich vyčištění vyžaduje nemalou zpracovatelskou kapacitu. Výhodou je, že neobsahují větší množství anorganických látek a organické nečistoty představují převážně kyseliny octová, mravenčí a kyselina akrylová a její estery v množství řádově desetin procent. Kyselina akrylová se oxiduje na kyselinu mravenčí, která je také produktem oxidace kyseliny octové. Chemická spotřeba kyslíku CHSK po zreagování kyseliny akrylové poklesne cca o třetinu díky vyšší oxidační stabilitě kyselin octové a mravenčí.



## 5.6 Mikroreaktory a vývoj nových technologií

### 5.6.1 Význam pro vývoj procesu

V případě rychle probíhající reakce, která je navíc silně tepelně zbarvena, není možné v nedokonale promíchávané baňce, či reaktorovém kotli dosáhnout homogenního teplotního pole. V důsledku toho se reakční směs přeměňuje v různých místech různě rychle, reakční produkty mohou reagovat s výchozí surovinou a dá se v případě existence následných reakcí očekávat nižší selektivita procesu, která značně komplikuje vyvíjenou technologii (nároky na čištění/separaci produktu, recyklace nezreagovaných komponent, problémy s odpady, atd.).

V poslední době se vývoj chemických procesů soustřeďuje na výrobu chemikálií s vysokou přidanou hodnotou za současného zvýšení jejich čistoty. Tento trend představuje velkou výzvu pro chemické inženýry, přičemž mikroaparáty představují slibné řešení, jak tomuto trendu vyhovět. Tomu odpovídá velká pozornost tomuto tématu v současnosti na řadě významných pracovišt'.

Mikroreaktorové technologie jsou založeny na aparátech, jejichž typická šířka či výška je menší než 1 mm a délka dosahuje od několika centimetrů do rozměru cca 1 m. Chemické reakce se tak kontinuálně odehrávají v těchto malých mikrostrukturách, reaktory takových rozměrů, kombinovaných paralelně ve velkém počtu (numbering-up) mohou produkovat až tisíc kilogramů za hodinu, takže se hodí rovněž pro komerční výrobu ve velkém měřítku. Eliminace gradientů koncentrace a teploty v reakčním prostoru usnadňuje přesné stanovení kinetiky reakce. Je příznačné, že firma Sigma-Aldrich přišla v současnosti na trh s atraktivní novinkou – sadou mikroreaktoru s čerpadly a příslušnými tlakovými čidly pro laboratorní syntézu a výzkum kinetiky náročných reakcí. Je ovšem evidentní, že „bezhlavé“ použití mikroreaktorové techniky bez termodynamického rozboru a kinetického posouzení dané reakce nemusí být vždy výhodné.

### 5.6.2 Intenzifikace procesů a bezpečné řízení

Intenzifikace procesů, založená na mikroaparátech, představuje nový koncept v oboru chemického inženýrství. Co je ale podstatné, je to, že mikro-aparáty se hodí zvláště pro vysoce hořlavé, explosivní či toxické reaktanty, lze v nich provozovat problémové reakce (oxidace, nitrace, fluorace, syntézy s organokovovými činidly, epoxidace, cyklizační reakce, adice azidů či diazo-reagentů, Grignardovy reakce, syntézy iontových kapalin, apod.) za netradičních podmínek, na příklad bez rozpouštědla, s vyloučením vlivu přenosových jevů na průběh procesu.

Zmenšení rozměru zařízení o několik řádů má vedle ekonomických výhod také výhodu v podstatném zvýšení vnitřní bezpečnosti procesu, neboť se snížilo riziko expozice toxickými či nebezpečnými látkami při případném selhání/havárii procesu. Hlavním cílem je snížení investičních a energetických nákladů spolu s podstatnou redukcí rozměru chemické jednotky, což má rovněž významný dopad na ochranu životního prostředí. Přitom lze snadno využít výhod kontinualizace procesu v porovnání s tradičním vsádkovým uspořádáním, neboť mikroreaktorové technologie jsou typické značnými rychlostmi míchání a sdílení tepla. Jsou



také flexibilní, což je velká výhoda v případě multi-produktových výrob. Významné aktivity v tomto směru vyvíjí v současné době např. *Centre for Process Innovation UK*.

### 5.6.3 Význam pro syntézu chemických specialit

Technologie mikoreaktorů byla nedávno představena jako slibná varianta také pro kontinuální výrobu farmaceutických produktů v komerčním měřítku. Přestože mikoreaktorové technologie mají mnoho předností ve srovnání se vsádkovými operacemi, bude nutné změnit myšlení a zvyklosti producentů, aby byly všeobecně akceptovány. Americký úřad pro kontrolu léčiv FDA, který je příkladnou autoritou pro většinu národních úřadů, např. v Evropě i u nás (Státní úřad pro kontrolu léčiv), vyjádřil před několika lety podporu inovacím a zvyšování efektivity farmaceutického vývoje, výroby a zajišťování kvality výrobků cestou „*návrhu a vývoje procesů, které umožní trvale zajistit předem definovanou kvalitu na konci farmaceutického procesu*“. Výrobcům léčiv bylo doporučeno:

- snížit dobu produkčního cyklu s použitím nepřetržitého měření a kontroly výroby
- potlačit produkci zmetků a/nebo nutnost přepracování produktů
- posílit využití automatizace výroby pro zlepšení její bezpečnosti a snížení možných chyb operátora
- snížit spotřební normy materiálu a energie a posílit nárůst výrobní kapacity
- zajistit kontinualizaci procesu pro zvýšení efektivity s použitím zařízení malého měřítka
- usnadnit variabilitu výrobní linky
- potlačit nejistotu při zvětšování měřítka

Dobrým příkladem průmyslové aplikace mikoreaktorové techniky je selektivní nitrace farmaceutického meziprojektu (za podmínek GMP – správné výrobní praxe) čistou kyselinou dusičnou s navazující neutralizací a zpracováním konečného produktu, vyvinuté společným úsilím firem *DSM* a *Corning* (producent mikoreaktorové techniky). Na zařízení se zpracovávají várky v objemu 25 tun, přičemž je dosahováno vysoké chemické selektivity, minimum odpadů při krátké době zdržení reakční směsi v zařízení.

### 5.6.4 Přednosti a nevýhody mikro reaktorů

Z předchozích kapitol je evidentní, že aplikace mikro reaktorů v průmyslu je v řadě případů výhodná, není však samozřejmě univerzálním návodem na zvyšování efektivity každého procesu. Jejich použití lze doporučit především v těchto situacích:

- rychle probíhající reakce s krátkou dobou zdržení v mikro reaktoru (zvýšená reakční rychlost může nastat při vysokých koncentracích reakčních složek – eliminace rozpouštědla z důvodů zjednodušení separace reakční směsi, vysokých požadavcích na čistotu produktu), např. neutralizační reakce, syntézy iontových kapalin,...
- silně exotermní reakce s nezbytným intenzivním odvodem reakčního tepla (k bezpečnému průběhu reakce je nezbytné zabránit nebezpečí tepelného výbuchu přesnou a přísnou stabilitou teploty v celém reakčním objemu, které ve velkoobjemových promíchávaných reaktorech není vždy zaručeno), např. oxidace, nitrace, sulfonace,...



- reakční komponenty či produkty patří mezi toxické chemické látky (nepředvídaný výron takových látek nezpůsobí dramatickou havárii kvůli velmi malému objemu reakční směsi, zadržované v mikro reaktoru), např. syntézy biologicky aktivních látek, léčiv, pesticidů,...
- reakční produkt je labilní a je nezbytné jej okamžitě v navazujícím stupni zpracovat (odstranění separace reakční směsi významně zkrátí manipulační dobu s nestálou látkou), např. peroxidy, organokovové komplexy, látky citlivé na světlo, vzdušný kyslík, vlhkost,...
- proces je nutné kontinualizovat (při stabilizaci teploty a průtoků reakčních komponent mikro reaktorem je dosahováno konstantní kvality produktu, mikro reaktorem proudí reakční směs pístovým tokem a lze tedy dosáhnout vysoké konverze reakce), např. ve farmaceutickém průmyslu při dodržování požadavků „správné výrobní praxe,...
- produkt reakce patří do kategorie chemických specialit (kapacita výroby je v měřítku do několika desítek tun ročně), např. farmaceutické produkty, chemikálie pro diagnostiku, laboratoře apod.

Hlavní nevýhodou mikroreaktorů jsou nepochybně vyšší pořizovací náklady, vztažené na jejich pracovní objem a obtížné vyplachování případných tuhých úsad či nánosů. Samozřejmě, jejich nasazení ve velkokapacitních výrobních linkách je zatím iluzorní, i když tzv. „paralelizace“ je samozřejmě možná, podobně jako v případě třeba trubkových katalytických reaktorů (běžně se používá několik set až tisíc trubek) nebo voštinových struktur pro katalytické čištění spalin (např. automobilových spalin). Nehodí se rovněž pro pomalu probíhající reakce (např. rovnovážné reakce, probíhající v blízkosti rovnovážného složení reakční směsi) a hodně viskózní reakční směsi (z důvodu vysoké tlakové ztráty systému).

## 5.7 Výzkum chemických robotů

Zároveň s nastartováním 7. Rámcového programu evropského výzkumu se otevřela možnost mladým vědcům žádat o granty - nejen v rámci velkých konsorcií, ale také individuálně u nově vzniklé Evropské výzkumné rady (ERC). S projektem CHOBOTIX na vývoj chemických robotů uspěl u Evropské výzkumné rady jako jediný Čech doc. František Štěpánek z VŠCHT Praha. Vybuodoval výzkumnou skupinu, která se zabývala především aplikacemi pro farmaceutický průmysl. Charakter výrobků je podobný jako u spotřební chemie - aktivní složka musí být stabilní po několik měsíců nebo i let během skladování, ale zároveň se musí po podání pacientovi začít danou rychlostí vylučovat, když se dostane do vodného prostředí zažívacího traktu. Při vývoji těchto specifických výrobků je nezbytné zvládnout procesy typu granulace, potahování částic různými vrstvami a podobně. Postupně se ukázalo, že je potřeba vytvořit částice, které by byly trochu „chytřejší“ a tím byla v projektu CHOBOTIX formulována koncepce tzv. chemických robotů.

Chemické roboty mohou být tvořeny jednobuněčnými organismy - částice o velikosti několika mikrometrů, které v sobě ukrývají několik rezervoárů. V nich se uchovávají chemické látky, které spolu ve správný okamžik začnou reagovat. Mohou se uplatnit především při cíleném uvolňování aktivních látek, hlavně léčiv. Roboti je mohou například doručit cíleně přímo k nádoru, aniž se kontaminují zdravé části těla. Také mohou vyrábět



látky, které jsou nestabilní a nelze je dlouho skladovat. Čili, s použitím takových robotů se aktivní látky syntetizují až na místě určení.

Vedle medicíny mohou chemičtí roboti najít využití například v účinnějších a šetrnějších čisticích a hygienických prostředcích, kde se aktivní látka vyrobí až na místě ve chvíli, kdy se částice dotknou nečistoty. Uvažuje se také o jejich využití v zemědělství, kde by mohly sloužit k transportu hnojiva přímo do rostlin. Další aplikací je opačný proces, kdy chceme ze znečištěného prostředí získat a akumulovat nějakou látku - třeba při dekontaminaci složek životního prostředí nebo při těžbě prvků z málo koncentrovaných surovin. Poslední možností jsou tzv. distribuované senzory. Robot může „proplout“ prostředím - ať už v lidském těle, nebo jinde, a chemickými změnami ve svém vlastním nitru zaznamenat, jaká teplota či koncentrace určité látky tam panuje.

## 5.8 Prioritní výzkumná témata

### a) Střednědobý horizont:

- vývoj recyklačních technologií pro omezování odpadů ve složkách životního prostředí
- výzkum destrukčních oxidačních procesů (mokrý oxidace, fotochemická oxidace, Fentonův proces,...)
- vývoj efektivních katalyzátorů pro destrukci obtížně rozložitelných chemických polutantů
- výzkum možnosti implementace mikroaparátů (mikroreaktorů, mikromísíčů, mikroseparačních aparátů, ...) do tradičních výrobních linek
- zvyšování inherentní (vnitřní) bezpečnosti výrobních linek s využitím mikroelementů

### b) Dlouhodobý horizont:

- vývoj fotooxidačních procesů se speciálními katalyzátory pro likvidaci zdravotně závadných látek
- návrh a vývoj flexibilních procesů s vysokým výkonem
- syntéza mikrostrukturovaných systémů s robotickými vlastnostmi
- využití chemických robotů v diagnostice

## 5.9 Závěr

Mezi oxidačními čisticími procesy se katalytická mokrý oxidace jeví jako velmi perspektivní metoda čištění průmyslových odpadních vod, toxických nebo jinak nevhodných pro biologické čištění a současně příliš zředěných pro efektivní spalování.

Oxidačního rozkladu i velmi odolných sloučenin lze dosáhnout kombinací mokré oxidace s chemickými oxidačními procesy. Při úvahách o technologické aplikaci mokré oxidace je třeba respektovat latentní průběh reakce během indukční periody a následující autokatalytický vývoj klade značné nároky na bezpečné řízení procesu. Vedení procesu do stadia biologicky rozložitelných organických kyselin vyžaduje méně náročné podmínky a tedy i náklady než totální oxidace až na oxid uhličitý a vodu. U odpadních vod s obsahem organických látek na úrovni několika procent může ohřev reakčním teplem oxidace dosahovat až stovek stupňů, toto teplo je třeba efektivně využít. Velké objemy vod lze účinně zpracovat jen kontinuálními





procesy mokré oxidace v průtočných katalytických reaktorech. Uvedené příklady ukazují možnosti procesu při rozkladu jak substituovaných aromatických uhlovodíků, tak nenasycených organických kyselin ve vodách.

Trendem poslední doby se tedy stávají mikroreaktorové technologie, které představují překonávání paradigmatu o tom, že pro laboratorní experimenty se hodí hlavně vsádkové reaktory a další aparáty. Významnou roli ve vývoji a výrobě mikroelementů v evropském teritoriu představují *Institut fuer Mikrotechnik Mainz* a koncern *Siemens*. Velkou výzvou pro chemické inženýrství a chemickou technologii je v dané chvíli hledání způsobů, jak integrovat nově navrhované mikroelementy s mimořádnými parametry do stávajících chemických, či biochemických výrob. K tomu účelu bude samozřejmě nezbytné využít interdisciplinární výměnu zkušeností a kooperaci se synergetickým efektem na ekonomický profit syntézy či výroby. Přitom se očekává, že aplikace mikroreaktorové techniky usnadní a urychlí přenos výzkumných výsledků do výrobního měřítká.

Mikroreaktorové technologie lze aplikovat nejen na reakce, probíhající v homogenní kapalně fázi. Pro reakce mezi plynnou a kapalnou komponentou lze volbou pracovního tlaku potlačit komplikovaný dvoufázový tok mobilních fází úzkým kanálem mikroreaktoru. Podobně, zvýšením tlaku v reaktoru lze snadno nastavit objemový průtok obou fází, pokud je jedním z produktů reakce plynná komponenta. V této souvislosti je zajímavé, že firma *Applikon Biotechnology* vyvíjí dokonce mikro-bioreaktory pro aerobní fermentace.

Otevřenou otázkou však zůstává, zda je současný chemický průmysl připraven přijmout popisované koncepční změny. Na uvedenou otázku se bude snažit odpovědět konsorcium řešitelů projektu „*F3 Factory, (fast, future, flexible)*“, v rámci 7. Rámcového programu EU. Projekt, jehož řešení bylo zahájeno v polovině roku 2009, koordinuje firma *Bayer* (Leverkusen, Německo) a mezi 20 týmy z průmyslu i akademického prostředí je také ÚCHP AV ČR.

Očekává se také, že budoucí technologie, založené na využití chemických robotů, mohou být prakticky využitelné teprve v příštích desetiletích na základě společného úsilí chemiků, biologů a v nemalé míře také chemických inženýrů.



## 6 Horizontální otázky

Sekce Horizontálních otázek (problémy společné celému chemickému průmyslu) je zaměřena na přezkoumávání nezbytných politických, sociálních a strukturálních reforem potřebných pro požadované evropské oživení k udržení náskoku uvnitř stále více se globalizujícího světa inovace. Pozornost je zaměřena na nalezení lepších řešení pro tyto inovace a tím poskytnout zlepšenou bezpečnost naší společnosti. Nejvyšším cílem je zajistit užitek z rozvoje a využití inovací vycházejících ze SusChem SVA. Obzvláště je třeba zajistit, aby příslušné technologie vedly k bohatství a tvorbě pracovních míst uvnitř EU. Přednostní oblasti pro další práci uvnitř jednotné arény odpovídají dvěma tématům: oslovení společenských zájmů spojených s novými produkty a procesy; a simulace důkazů inovace. Toto zahrnuje zhodnocení a zlepšení modelů financování pro inovace stejně jako prostředků na rozvoj příslušných dovedností ke zlepšení lidských možností, které budou podporou těchto inovací.

Přínos pro členy TP a pro rozvoj české chemie bude zhruba ve čtyřech hlavních oblastech:

- 1) **Oblast informační** – souhrn informací o stavu technologií a legislativy v ČR a porovnání se stavem v EU ve vztahu k udržitelnosti chemie jako oboru, informace a podklady o komerčně využitelných technologiích, pro výzkumné subjekty náměty na projekty
- 2) **Oblast finanční (věcná)** – TP vytvoří vhodné prostředí pro realizaci společných projektů mezi jednotlivými členy platformy a vytváření konsorcií, které se mohou v různých programech veřejné podpory ucházet o dotace na výzkum a realizaci svých inovačních záměrů, členové TP tak rozšíří své zkušenosti z řešení společných projektů s veřejnou podporou
- 3) **Oblast lidských zdrojů** – TP bude mapovat záměry jednotlivých členů v oblasti využití nových technologií, zdrojů surovin a nových materiálů a bude spolupracovat se vzdělávacími institucemi při formulaci nových studijních oborů
- 4) **Neformální komunikační kanály** – poslední oblastí je vznik neformálních pracovních skupin založených na osobních kontaktech, zahrnující průřezově různé specializace, tyto vazby jsou klíčové při formulaci a řešení komplexní projektů

Pomocí těchto výstupů bude v České republice rozvíjeno průmyslové odvětví, které bude navazovat na stávající výrobní aktivity, a to jak v oblasti zpracování fosilních zdrojů (ropa, zemní plyn), tak v oblasti využití biosložek jako vstupní suroviny pro chemickou výrobu a nové materiály, včetně nanotechnologií.



## 7 Příloha 1

### Návrh vize české chemie

Vize odráží předpokládaný vývoj národního hospodářství v horizontu 10 – 15 let.

1. Zachování výrobních kapacit chemického průmyslu v ČR, založené na moderních technologiích a inovacích.
2. Ve vybraných oborech se česká chemie zařadí mezi evropské leadery, především ve výrobě specialit.
3. Chemický průmysl získá reputaci schopného, bezpečného a odpovědného partnera ve společnosti.
4. Je nutné vyvinout trvalé úsilí o to, aby Česká republika poskytovala podporu pro chemické inovace a aby posilovala svoji znalostní základnu již od raných fází vzdělávání. Podpora možnosti studií technických a přírodovědeckých disciplín, podpora možnosti pokračovacích (postgraduálních) studií pro talenty v ČR i v zahraničí.
5. Podpora vzniku technologicky silných firem a / nebo seskupení.
6. Zapojení českých výzkumných pracovišť do řešení problémů chemického průmyslu a příbuzných oborů v Čechách.
7. Podpora rozvoje aplikovaných výzkumných pracovišť jako významného mezičlánku mezi základním výzkumem a realizací, jako zdroje inovačních podnětů a významné mezioborové styčné plochy.
8. Prohloubení využití primárních vstupů v oblasti petrochemie s cílem získávat látky s vyšší přidanou hodnotou a vytváření prostor pro jejich další využití především pro malé podniky. Důsledné snižování vlivu jednotlivých výrobních jednotek na životní prostředí.
9. Zvládnutí molekulárních měřítek (např. nanotechnologií) povede ke zlepšení vlastností nových generací produktů a k inovacím aplikací v řadě průmyslových odvětví.
10. V horizontu 10-15 let zůstane významnou složkou chemického průmyslu zpracování ropy a petrochemie. Jako další obor se bude rozvíjet nepotravinářské využití zemědělské produkce a biotechnologie. Teprve na dalším místě high-tech výroby, jako nanomateriály, nanokompozity, pigmenty, suroviny pro elektroniku a podobně.



### ***Vize v oblasti materiálů***

- Intenzivní podpora výzkumu a inovací v oblasti nanotechnologií, nanokompozitů a dalších materiálů s vysokou přidanou hodnotou.
- Použití nanomateriálů v nátěrových hmotách, keramice, stavebních materiálech, farmacii a elektronice umožní dosáhnout lepších či nových vlastností nových produktů.
- Vývoj nových plastických hmot na bázi kopolymerů a kompozitů povede k materiálům s novými, zlepšenými vlastnostmi.
- Moderní katalyzátory umožní výrazné zlepšení katalytických procesů, snížení spotřeby energií a odpadů.
- Širší využívání obnovitelných zdrojů surovin přispěje k omezení spotřeby tradičních surovin a jejich negativních vlivů.

### ***Vize chemického inženýrství***

- Projekcí bezpečnějších zařízení a aplikací nejmodernějších informačních technologií a nástrojů zpracování dat důsledně monitorovat stávající provozy a předem indikovat možná rizika a nebezpečí.
- Zvládnutí mezifázových procesů přispěje k excelenci v oblasti nanotechnologií, katalyzátorů a dalších technologiích.
- Flexibilní výrobní závody a nové, efektivnější postupy v oblasti chemických reakcí a chemicko-inženýrských procesů přinesou výrazné snížení energetické a materiálové náročnosti, přispějí k minimalizaci tvorby odpadů, budou umožňovat maximální recyklaci a umožní výrobu tradičních výrobků z obnovitelných zdrojů surovin.
- Podpora chemicko-inženýrských oborů zaměřených především na ekonomickou optimalizaci průmyslových procesů, zvýšení bezpečnosti průmyslových procesů a zkrácení inovačních cyklů.
- Důsledné rozvíjení oborů druhotného využití odpadů, především recyklaci plastů a jejich neenergetické využití.

### ***Vize v oblasti průmyslové biotechnologie***

- Podpora a rozvíjení nových oborů zaměřených na průmyslové využití zemědělské produkce včetně dřevní hmoty, podpora a rozvíjení výzkumu a inovací v oblasti výživy a ochrany rostlin.
- Podpora rozvoje průmyslové biotechnologie v oblasti vývoje a výroby nových doplňků stravy
- Podpora využívání alternativních surovin
- Využití biotechnologií pro likvidaci odpadů a starých ekologických zátěží