

STRESZCZENIE ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

Opracowanie technologii wytwarzania kaprolaktonu oraz kontroli procesu jego oligomeryzacji wraz z optymalizacją procesu prowadzonego w sposób ciągły w skali przemysłowej

mgr inż. Jakub Bińczak

Promotor pracy: prof. dr hab. inż. Anna Chrobok

Opiekun pomocniczy: dr inż. Krzysztof Dziuba

Przedmiotem niniejszej rozprawy doktorskiej było opracowanie technologii otrzymywania ϵ -kaprolaktonu oraz możliwości kontroli procesu jego oligomeryzacji wraz z analizą ekonomiczną i studium wykonalności.

W części literaturowej przedstawiono ogólne właściwości laktonów oraz ich potencjał aplikacyjny. Szczególną uwagę zwrócono na znaczenie ϵ -kaprolaktonu oraz jego pochodnych, w tym poli- ϵ -kaprolaktonu i oligo- ϵ -kaprolaktonów. Scharakteryzowano najpopularniejsze metody otrzymywania laktonów i ich pochodnych, ze szczególnym uwzględnieniem opracowanych w ostatnich latach innowacyjnych metod, wykorzystujących katalizę enzymatyczną. Przeprowadzono przegląd literatury patentowej oraz zaprezentowano przemysłowe metody otrzymywania ϵ -kaprolaktonu wraz z opracowaną ostatnimi laty obiecującą metodą, wykorzystującą nadkwas n-dekanowy jako utleniacz w reakcji utleniania Baeyera-Villigera cykloheksanonu do ϵ -kaprolaktonu.

W części doświadczalnej zaprezentowano metodologię wykorzystanych metod analitycznych, w tym ^1H NMR, MS MALDI TOF, GC oraz oznaczania liczby nadtlenowej. Opisano sposób przeprowadzania eksperymentów laboratoryjnych w zakresie syntezy nadkwasu n-dekanowego, ekstrakcji i rozdzielenia faz po syntezie nadkwasu n-dekanowego, syntezy ϵ -kaprolaktonu, rozdzielenia produktów metodą destylacji oraz oligomeryzacji ϵ -kaprolaktonu. Ponadto, opisano przeprowadzone eksperymenty na wielkolaboratoryjnej instalacji doświadczalnej. Sposób prowadzenia badań miał charakter iteracyjny, gdzie w miarę zdobywania nowej wiedzy, weryfikowano ją w skali wielkolaboratoryjnej, gdzie obserwowano kolejne zjawiska, proponowano nowe założenia, które prowadziły do kolejnych eksperymentów w skali laboratoryjnej. Takie podejście, pozwoliło zachować praktyczność prowadzonych badań i zaproponować technologiczną metodę laboratoryjną procesu ciągłego.

W części wdrożeniowej przedstawiono założenia procesowe proponowanej instalacji przemysłowej do otrzymywania ϵ -kaprolaktonu wraz z możliwością kontroli procesu jego oligomeryzacji w ruchu ciągłym. Korzystając z symulatora procesowego, przygotowano symulację większości jednostek operacyjnych, uzupełniając ją o brakujące modele obliczeniowe reaktorów utleniania kwasu n-dekanowego oraz cykloheksanonu. Następnie, napisano algorytm optymalizacyjny, który posłużył do znalezienia optymalnych parametrów projektowych kluczowych jednostek operacyjnych, biorąc pod uwagę wpływ zmian każdego z parametru na nakłady inwestycyjne i koszty operacyjne a także wartość pieniądza w czasie.

W kolejnym kroku przeprowadzono optymalizację topologiczną w postaci analizy możliwości odzysku ciepła ze strumieni kondensatów pary grzewczej. Proponowany proces z wyznaczonymi parametrami optymalnymi stanowił bazę do przygotowania projektu procesowego oraz oszacowania wymaganych nakładów inwestycyjnych i kosztów operacyjnych.

Na podstawie przygotowanych danych, przeprowadzono analizę opłacalności projektu oraz analizę wrażliwości, zgodnie z metodologią przyjętą w Grupie Azoty Zakłady Azotowe „PUŁAWY” S.A. Następnie, biorąc pod uwagę historyczne zmiany cen głównych składników kosztów, napisano algorytm i przeprowadzono analizę ekonomiczną metodą Monte Carlo co umożliwiło ujęcie ryzyka inwestycyjnego w sposób ilościowy.

Efektem przeprowadzonych prac jest projekt procesowy instalacji w skali przemysłowej wraz z analizą ekonomiczną i potwierdzoną doświadczalnie możliwością prowadzenia kluczowych procesów i operacji jednostkowych. Projekt procesowy proponowanej instalacji może stanowić podstawę do przygotowania projektu bazowego. Wyniki przeprowadzonych analiz ekonomicznych potwierdzają opłacalność projektu oraz stanowią zestaw niezbędnych informacji do podjęcia decyzji biznesowych przez organy zarządcze w zakresie realizacji inwestycji.