EVROPSKÁ UNIE
Evropský fond pro regionální rozvoj
OP Podnikání a inovace pro konkurenceschopnost

MINISTERSTVO PRŮMYSLU A OBCHODU

SUSCHEM CZ

Strategická výzkumná agenda

České technologické platformy pro udržitelnou chemii

Zpracováno v rámci projektu CZ.01.1.02/0.0/0.0/15_037/0007182 „SusChem III“, podporovaného v rámci OP PIK, programu Spolupráce – Technologické platformy

říjen 2017

Obsah

1. Souhrn ... 3

2. Úvod ... 4

2.1. Pozice chemického průmyslu v rozvinutých zemích ... 4

2.2. Aktuální pozice českého chemického průmyslu (SVOT analýza současného stavu chemického průmyslu, aplikovaného výzkumu a vzdělávání odborníků) ... 5

2.3. SWOT Analýza výzkumu a vývoje chemických procesů v podmínkách ČR ... 6

2.4. SWOT analýza současného stavu českého chemického průmyslu ... 7

2.5. Strategie českého chemického průmyslu – Česká národní iniciativa Průmysl 4.0 ... 8

3. Hlavní očekávané směry rozvoje české chemie ... 10

3.1. Průmyslové biotechnologie ... 10

3.1.1. Biorafinerie - chemikálie a energie z biologických materiálů a biotechnologií ... 11

3.1.2. Biokatalyzátory ... 11

3.1.3. Využívání bioproduktů pro syntézu chemických specialit ... 12

3.2. Pokročilé materiály a technologie ... 13

3.2.1. Nanotechnologie a nanomateriály ... 13

3.2.2. Nano a mikro tisk pro průmyslovou výrobu aditivních materiálů ... 17

3.2.3. Výroba prášků z kovů, funkčních slitin, keramiky a intermetalických látek ... 21

3.2.4. Lehké multifunkční materiály a kompozity ... 27

3.3. Ekologie, zelené průmyslové procesy ... 29

3.3.1. Materiály pro konverzi a skladování energií ... 39

3.3.2. Moderní katalyzátory ... 48

3.4. Procesy a zařízení ... 62

3.5. Zpracování ropy ... 66

4. Horizontální otázky (témata) ... 74

5. Závěr ... 75

6. Seznam použitých zkratek ... 76

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 částečně substituovat stávající suroviny z fosilních zdrojů, v některých případech i za výhodnějších energetických podmínek. Po zavedení vhodných separačních metod, bude možné připravit a izolovat řadu produktů s přidanou hodnotou, které svými vlastnostmi budou moci konkurovat stávajícím produktům z ropných zdrojů.
Pro úspěšnou implementaci biotechnologií do chemického 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 využitím 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 strukturována aplikačně se záměrem posílit perspektivu komercializace. Zahrnuje fotovoltaiku, efektivní světelné zdroje, katalyzátory, spotřební zboží (např. stavební materiály, nátěrové hmoty, textil, kosmetiku), nanokompozity a materiály pro farmaceutický průmysl a zdravotnictví.
SVA definuje prioritní výzkumná témata ve střednědobém a dlouhodobém horizontu.
U fotovoltaiky jde především o vývoj nových typů fotovoltaických 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 fotovoltaických a palivových článcích, biokonverzi energie či zpracováni odpadů a kontrole čistoty ovzduší.
Pro zdravotnictví se budou vyvíjet nová diagnostická zařízeni, terapeutika, transport léků nebo biokompatibilní materiály pro implantáty a protézy.
V souvislosti s dalším vývojem efektivních a enviromentálně 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 podmínek, či v přítomnosti nových katalyzátorů. Jedná se například o průmyslové 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 rizikové hořlavé, explosivní či toxické reaktanty.

2. Úvod

Tento dokument byl zpracován Českou technologickou platformou pro udržitelnou chemii, SusChem ČR v rámci projektu „Technologická platforma pro trvale udržitelnou chemii III“, registrační číslo CZ.01.1.02/0.0/0.0/15 037/0007182, podporovaného Ministerstvem průmyslu a obchodu v rámci OP Podnikání a inovace. Bližší informace o ČTP SusChem, jejích členech, organizační struktuře atd. jsou zveřejněny na jejích webových stránkách http://suschem.cz/ v oddíle „O ČTP SusChem“. Návrh vychází z posouzení současného vývoje a potřebě zařadit taková aktuální témata jako je hospodaření s vodou, Cirkulární ekonomika a substituce nebezpečných látek.

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 SusChem ČR je zaměřena po odborné stránce do základních oblastí:

- průmyslové biotechnologie
- pokročilé materiály a technologie
- procesní inženýrství
- cirkulární ekonomika

Průřezovou (horizontální) oblastí je zaměření na:

- standardizaci, regulaci, bezpečnost
- mezinárodní spolupráci
- oblast informační
- oblast finanční
- oblast lidských zdrojů

2.1. Pozice chemického průmyslu v rozvinutých zemích

Chemický průmysl je se svými výrobky neodmyslitelnou základnou pro všechny rezorty národního hospodářství, ale přitom vychází v drtivé míře z fosilních surovin, ať jsou to minerály a rudy pro anorganické výrobky (například hnojiva, pigmenty pro nátěrové hmoty, metalurgii, prostředky pro výrobu skla, keramiky apod.), nebo uhlí, ropa a plyn pro celou plejádu organických výrobků (polymerní materiály, léčiva, potravinové doplňky, barviva, nátěrové hmoty, zemědělské ochranné prostředky, drogistické a kosmetické zboží apod.). Zajišťuje vstupy vlastně do všech výrobních postupů ostatních rezortů. Chemickými procesy se čistí komunální a průmyslové odpadní vody, odstraňují škodliviny ze spalin tepelných elektráren i dopravních prostředků, produkují se veškeré stavební hmoty, (bez dřevěného řeziva), zemědělské ochranné prostředky, hnojiva ale také mnoho různorodých materiálů pro velmi užitečné věci každodenní potřeby, ať jsou to třeba oděvy, obuv, spotřební elektronika, mobilní telefony či sportovní potřeby.

Samostatnou kapitolou je chemická podpora zemědělské výroby i produkce potravin a pitné vody. Budoucí vývoj celé lidské populace bude patrně v dohledné době poznamenán jejím dosud nezřízeným exponenciálním růstem, omezenými zdroji surovin v zemské kůře, kontaminací složek životního prostředí metabolity z životních procesů lidí i ostatních živočichů.
Chemický průmysl je důležitou součástí zpracovatelského průmyslu v EU i ve světě. Representuje kolem 7 % průmyslové produkce EU. Dvě třetiny ze své produkce vydá na zásobování ostatních sektorů zpracovatelského průmyslu. Další důležitá propojení existují se sektorem zemědělství a službami. Chemický průmysl EU je energeticky náročný a pod silným konkurenčním tlakem.
Potýká se s výzvami, jako jsou zvýšená mezinárodní konkurence, zvyšování cen energií a vstupních surovin, tlak na účinnější využívání zdrojů, nové předpisy, zákony a potřeba inovací. Jako energeticky náročné odvětví je chemický průmysl závislý na hospodářské politice v oblasti změn klimatu a energetiky. Navíc, chemický sektor je velmi regulovaný z důvodu ochrany zdraví svých zaměstnanců, zdraví konzumentů a ochrany životního prostředí.
Podle údajů Eurostatu a Cefic (European Chemical Industry Council) se v roce 2014 podílel chemický průmysl EU na tvorbě hrubého domácího produktu EU 1,1%. Tento relativně nízký podíl je ovlivněn klesajícím podílem průmyslu na tvorbě HDP ve vyspělých zemích a naopak růstem podílu sektoru služeb. V EU jsou využívány přibližně dvě třetiny chemikálií v průmyslovém sektoru, včetně stavebnictví, zatímco více než jedna třetina směřuje do dalších oblastí ekonomiky, jako jsou zemědělství, služby apod.
V tomto kontextu zaujímají specifické, interdisciplinární postavení obory chemie, chemické technologie a procesního inženýrství, neboť se uplatňují v mnoha oborech lidské činnosti zajišťujících každodenní potřeby, od biomedicíny až po distribuci energie. Proto si napříště musíme představit, že veškeré budoucí výrobky mohou počítat jen s důslednou recyklací a obnovitelnými uhlíkatými surovinovými zdroji pro chemický průmysl, který, jak bylo již zmíněno výše, jednoznačně podporuje všechny hospodářské rezorty nezbytné pro chod každé rozvinuté společnosti.

2.2. Aktuální pozice českého chemického průmyslu (SVOT analýza současného stavu chemického průmyslu, aplikovaného výzkumu a vzdělávání odborníků)

Výroba chemických látek a chemických přípravků zaujímá v hospodářství České republiky důležitou pozici. Chemický sektor je silně provázaný s ostatními oddíly zpracovatelského průmyslu, jako jsou výroba plastů a pryže, textilní průmysl, elektronický průmysl, automobilový průmysl a další a představuje pro ně důležité subdodavatelské odvětví.
Podíl na tržbách zpracovatelského průmyslu ČR se pohybuje kolem 5 %. Chemické výrobky nacházejí uplatnění ve všech oblastech ekonomiky a chemický sektor je důležitým dodavatelem vstupních surovin pro mnoho jiných oborů zpracovatelského průmyslu. Významnými odběrateli chemikálií jsou zejména gumárenský a plastikářský průmysl, stavebnictví, průmysl papíru a celulózy a automobilový průmysl.
Chemický průmysl je v České republice koncentrován především do krajů – Ústeckého, Pardubického, Moravskoslezského a Středočeského. Deset největších chemických podniků v ČR patří do výrobkové skupiny CZ-NACE 20.1 (Unipetrol RPA, s.r.o., Synthos Kralupy a.s., Deza, a.s., BorsodChem MCHZ, s.r.o., Spolana, a.s., Lovochemie, a.s., Spolchemie – Spolek pro chemickou a hutní výrobu, a.s., Synthesia, a.s., Silon s.r.o. a Linde Gas a.s.). Z ostatních výrobkových skupin to pak jsou například Indet Safety a.s., Austin Detonator s.r.o. (CZ-NACE

20.5), Schwan Cosmetics CR, s.r.o., Procter&Gamble (CZ-NACE 20.4), Glanzstoff Bohemia, s.r.o. (CZ-NACE 20.6), EFTEC (Czech Republic), a.s. (CZ-NACE 20.3).
Z globálního i evropského pohledu patří chemický průmysl ČR k těm méně významným. Na Českou republiku připadá zhruba 0,2 % světových tržeb. Evropským lídrem je dlouhodobě Německo, v roce 2014 na něj připadalo 26,7 % světových tržeb.
V příštích desetiletích lze očekávat vynucený přechod části chemického průmyslu na biochemické technologie zaměřené na důkladnější využívání biologického odpadu všeho druhu, a to nikoliv jen na biopaliva různě pokročilých generací.
Klíčové technologie komoditní chemie byly po roce 2000 modernizovány a řadí se k vyspělejším dostupným technologiím střední kapacity s převažujícím exportním zaměřením. Investice do rozvoje odvětví a do inovací, včetně výzkumu a vývoje, jsou nezbytné pro zachování budoucí konkurenceschopnosti evropského chemického průmyslu. Náklady na výzkum a vývoj v evropském chemickém průmyslu se v období 1992 až 2014 pohybovaly ročně v průměru kolem 7,8 mld. EUR. Výdaje na výzkum a vývoj se celkem v odvětví chemického průmyslu ČR pohybují na úrovni cca 3,5 mld. Kč ročně, což představuje cca 12 % podíl na výzkumu a vývoji v rámci zpracovatelského průmyslu. Dosavadní systém hodnocení kvality a systém financování výzkumu v ČR působil doposud v mnoha ohledech proti snahám o zvýšení kvality výzkumu.
V poslední době byly vytipovány základní strategické oblasti, pro které existuje nebo je vytvářen v České republice dostatečný vědeckotechnický potenciál, záměry jsou realizovatelné a mohou významně přispět k řešení potřeb české společnosti:

- průmyslové biotechnologie a využití obnovitelných zdrojů,
- technologie materiálů vč. nanomateriálů,
- výroba a zpracování polymerů a biopolymerů,
- využití plastů po skončení jejich životnosti,
- nové typy reakcí a procesů.

Nově k těmto základním směrům přistupují další aktuální témata:

- cirkulární ekonomika,
- náhrada zdravotně a ekologicky problematických látek,
- vodní hospodářství,
- materiály pro energetiku,
- speciální polymery,
- prevence zvyšování výskytu odpadních plastů v životním prostředí.

Rezort výzkumu a vývoje v oboru chemických procesů v příštích letech bude patrně využívat následujících příležitostí a předností, naopak se bude potýkat s lokálními nedostatky a globálními výzvami.

2.3. SWOT Analýza výzkumu a vývoje chemických procesů v podmínkách ČR

Silné stránky:

- solidní infrastruktura a vybavení vědeckovýzkumné základny
- konkurenceschopná výchova a vzdělávání odborníků
- dobrá komunikace mezi akademickým, univerzitním a aplikovaným výzkumem
- možnost mezinárodní spolupráce

Slabé stránky:

- nízké ohodnocení kvalifikovaných tvůrčích pracovníků
- nekoncepční, krátkodobé a pro podniky příliš komplikované financování aplikovaného výzkumu

- nízký podíl institucionálního financování výzkumu v akademické sféře
- špatné vnímání chemie veřejností
- nedostatečná popularizace chemie v médiích
- nízký stupeň provázanosti výzkumných projektů
- zaostáváme v investicích rizikového kapitálu do VaV
- malý počet mezinárodních patentů

Příležitosti:

- využívání velkých, moderních infrastruktur pro řešení perspektivních témat V&V
- zapojení do mezinárodní spolupráce v rámci ERA
- navazování osobních kontaktů na odborných akcích v tuzemsku (ICCT, CHISA, …) i v zahraničí

Hrozby:

- vytěžování klesajících surovinových zásob
- exponenciální globální nárůst obyvatelstva
- světová podvýživa
- změna klimatu, oteplování planety, nedostatek vody
- zhoršení životního prostředí
- už za 3 roky přijde ČR o výraznou část peněz, které dostává z Evropské unie na VaV.

Na trhu práce v České republice se v posledních dvou desetiletích prohlubuje nedostatek kvalifikovaných mladých odborníků, kteří by nahradili starší odcházející generaci, a to nejen při zajištění výroby v chemickém průmyslu, ale i při využití chemických látek a technologií v energetice, zemědělství, zdravotnictví, metalurgii, papírenském průmyslu, sklářství, strojírenství včetně automobilového průmyslu a v posledních letech také při zpracování odpadů a jejich recyklaci. Vzniklé nedostatky v personálním zajištění sektoru chemie jsou zesíleny tím, že odborné učňovské školství bylo v posledních letech prakticky zcela zlikvidováno. Za účelem alespoň částečného omezení existujících nedostatků byla realizována řada opatření. Mnoho firem chemického průmyslu bilaterálně spolupracuje se středními odbornými školami a vysokými školami, probíhají praxe studentů ve firmách, které si tím vybírají své budoucí zaměstnance.
V roce 2015 zaznamenaly hmotné investice v odvětví chemického průmyslu výrazný meziroční růst o téměř 19 % na 28,1 mld. Kč a tento trend pokračoval i v roce 2016. Chemický průmysl je po automobilovém průmyslu druhým nejvýznamnějším odvětvím zpracovatelského průmyslu v České republice z hlediska tržeb. V roce 2015 dosáhly tržby 561 mld. Kč, přičemž v chemickém průmyslu pracovalo cca 120 000 zaměstnanců.

2.4. SWOT analýza současného stavu českého chemického průmyslu

Silné stránky:

- vzdělaná pracovní síla (střední odborné a vysokoškolské vzdělání)
- strategická poloha České republiky v rámci Evropy
- unikátní síť produktovodů v České republice (ropa, zemní plyn, motorová paliva, ethylen, ethylbenzen, propylen)
- dlouhá historie a tradice chemického průmyslu v České republice
- pokračování nových investic do chemického průmyslu
- sociální partnerství, dobrá spolupráce mezi podniky a odbory
- napojení na prioritní strategickou specializaci dopravní prostředky, výroba pneumatik, plastů a baterií

Slabé stránky:

- relativně vysoké ceny energií ve srovnání s okolními regiony (zemní plyn, elektrická energie, voda)
- silná závislost na dovozu surovin (především ropy)
- relativně nízká recyklace odpadů (plasty atd.)
- nízký počet výrobních jednotek s konkurenceschopnou kapacitou
- postupně klesající podíl chemického průmyslu na průmyslové výrobě celkem
- nízký podíl specialit
- nárust byrokracie a regulace

Příležitosti:

- posilování významného postavení České republiky ve výrobě pryžových a plastových výrobků (Česká republika je v rámci Evropy významným producentem pneumatik pro průmyslové a zemědělské účely a plastů pro automobilový průmysl)
- vstup zahraničních investic a poskytování know-how do chemického průmyslu
- možnost intenzivnějšího využití vzniklých technologických parků a center excelence
- čerpání dotačních titulů pro podporu výzkumu, vývoje a investic
- zpracování národní strategie RIS pro chemický průmysl

Hrozby:

- složité a zatěžující právní předpisy ČR a EU
- nutnost investic do technologického vybavení a další modernizace petrochemického a rafinérského průmyslu
- omezení dostupnosti a nárůst cen strategických surovin (především ropy)
- zvýšení dovozu levnějších chemikálií z Číny a Indie
- další zpřísnění regulací ze strany EU (např. pro nano nebo biocidní výrobky)

2.5. Strategie českého chemického průmyslu – Česká národní iniciativa Průmysl 4.0

Nástup nových trendů v rámci Průmyslu 4.0 využívajícího výhod digitalizace, automatizace, elektronické komunikace, kyberfyzikálních systémů atd. je globální objektivní realita, která se dotýká i chemického průmyslu. K udržení konkurenceschopnosti je nutné přistupovat aktivně k možnostem, které Průmysl 4.0 přináší, a to přesto, že hrozí i negativní dopady jako zejména očekávaný úbytek některých pracovních pozic.

K aktivnímu přístupu k Průmyslu 4.0 jsou nutné inovativní lidské zdroje, jejích motivace pro technické obory již od základních škol až po doplňování informací celoživotním vzděláváním a podporování aktivity a kreativity ve vyšším věku. Vzdělávání by nemělo být chápáno jako prevence negativních dopadů Průmyslu 4.0, ale jako nutná podmínka a hybná síla pro využití Průmyslu 4.0 jako příležitosti ke zvýšení konkurenceschopnosti českého chemického průmyslu.

Chemický průmysl je již delší dobu globalizovaný, vysoce provázaný a ve vysoké míře řízený automatizovanými systémy s nízkými požadavky na přítomnost fyzické obsluhy. Průmysl 4.0 tedy neznamená přímé ohrožení chemického průmyslu, ale lze jej využít jako příležitost pro další zvyšování konkurenceschopnosti vyšší produktivitou a vyšším podílem kvalifikované práce v chemické výrobě vč. souvisejících aktivit (logistika apod.). K tomu je potřebné spolupracovat na národní i evropské úrovni na vytváření vhodných podmínek jako jsou právní rámec, regulace, standardizace, kybernetická bezpečnost apod.

Potřebnými kroky a legislativními změnami na podporu Průmyslu 4.0 jsou:

- Podporovat vzdělávání jako aktivní nástroj pro využívání příležitostí, které Průmysl 4.0 přináší.
- Výrazně a důsledně podporovat dynamický rozvoj moderní veřejné správy, která prioritně využívá digitálních prostředků komunikace jak interně, tak i navenek.
- Podporovat spolupráci v rámci EU k zajištění volného toku dat a jednotného digitálního prostředí.
- Věnovat vysokou pozornost kybernetické bezpečnosti.
- Důsledně rozdělit opatření na krátkodobá a na strategická s uplatňováním projektového řešení a financování.
- Zajistit čerpání z ESIF na projekty rozvoje digitálních témat jako jeden z důležitých zdrojů k rychlému rozvoji digitální ekonomiky.
- Podporovat rozvoj malých a středních podniků zejména prostřednictvím specifických dotačních titulů.

3. Hlavní očekávané směry rozvoje české chemie

3.1. Průmyslové biotechnologie

Biorafinace představuje progresivní způsob získávání cenných produktů z rostlinné a živočišné biomasy. Mohou to být jak primární suroviny, které poskytuje sama příroda, tak i případné odpadní druhotné suroviny ze zemědělsko-potravinářského komplexu. Takové procesy se zabývají ekonomicky výhodným a ekologicky přátelským způsobem získávat cenné produkty z rostlinné a živočišné biomasy, které jsou obecně využitelné v řadě odvětví zemědělského, potravinářského a spotřebního průmyslu, nebo v konečné fázi i jako energetické zdroje a biopaliva. Významnou předností je využívání domácí surovinové základny, při účinném propojení akademických pracovišť a podnikatelských subjektů. Cílem těchto postupů je dokonalé využití biomasy, recyklace biogenních prvků a příprava ceněných netradičních produktů s vysokou přidanou hodnotou (chemických, farmaceutických, kosmetických, potravinářských výrobků) převážně za šetrných podmínek v separačních aparátech a bioreaktorech.

Centrum kompetence pro výzkum biorafinací BIORAF, podpořené Technologickou agenturou ČR sdružuje pod koordinací Ústavu chemických procesů AV ČR další významná akademická pracoviště (Botanický ústav AV ČR, Ústav biochemie a mikrobiologie VŠCHT v Praze, Ústav biotechnologie VŠCHT v Praze, Ústav analýzy potravin a výživy VŠCHT v Praze) a současně podnikatelské subjekty Ecofuel, s. r. o., Praha, Rabbit a.s. Trhový Štěpánov, Briklis, s. r. o., Malšice, Agra Group, a. s., Střelské Hoštice.

Jediným obnovitelným zdrojem, nositelem uhlíku, je hmota organického původu – biomasa. Naprostá většina energeticky a materiálově využitelné biomasy připadá na fytomasu, která vzniká za působení sluneční energie, oxidu uhličitého a vody chemickou reakcí – fotosyntézou. Biomasa fotosyntetického původu je jako nezastupitelná živina sekundárně zdrojem biomasy živočišného původu.

Biomasa jako surovina obsahuje řadu využitelných složek, jako je lignin, celulóza, hemicelulóza, škrob, lipidy, povrchově aktivní látky, silice, keratin, apod. Při biorafinačním procesu dochází k mechanické, termické, chemické a biochemické přeměně (konverzi) biomasy na žádané produkty. Využívá se přitom poznatků biorafinačního procesního inženýrství, které popisuje chování biomasy při biorafinačním procesu, na tomto základě se navrhují reaktory pro chemickou, termickou a biologickou přeměnu biomasy na žádané produkty a postupy a zařízení pro separaci těchto produktů pro jejich další využití. Biorafinaci lze posuzovat v analogii existujících a široce provozovaných procesů rafinace neobnovitelné fosilní ropy. Jednotkové operace jsou přitom při biorafinačním procesu obvykle rozdílné než u chemických technologií a jedná se zejména o jednotkové procesy zaměřené na tuhé fáze, například mletí vláknitých materiálů, extrakce tuhá látka – kapalina (biodegradabilními rozpouštědly) atd. Výhoda biorafinace ve srovnání s rafinací ropy vychází z větší rozmanitosti surovin, nevýhodou je množství procesních kroků, které je nutno pro získání výrobku biorafinací aplikovat, přičemž většina biotechnologií je ještě v před-komerčním stadiu. Tím větší výzvu dnes biorafinace pro vědu a udržitelný rozvoj společnosti představuje.

Současně platí, že biorafinace je založená na obnovitelných zdrojích a jejich komplexním (simultánním) zpracování na netradiční chemické produkty s důrazem na využívání odpadů. Významně pozitivně řeší i problematiku životního prostředí, která je u tradičních (fosilních) zdrojů společností vnímána problematicky.

Obrovská společenská výhoda biorafinace spočívá též v tom, že na rozdíl od průmyslu založeného na zpracování neobnovitelných fosilních zdrojů (z nichž ropu a zemní plyn je nutno dovážet) je biorafinace nejnadějnější cestou pro vznik nových technologií, využívajících především domácí obnovitelné zdroje.

3.1.1. Biorafinerie - chemikálie a energie z biologických materiálů a biotechnologií

Rychle rostoucí rostliny (vrba, topol, Miscanthus atp.) jsou v současnosti předmětem zájmu (výtěžnosti dendromasy jsou až 10t/ha/rok).
Jako příklad biorafinačního procesu lze dále zmínit využití „slunečnice“ topinambur (Helianthus tuberosus). Přímá lodyha dorůstá výšky až 3 m a obsahuje mimo jiné dietně příznivý polysacharid inulin, který z ní a samozřejmě z hlíz, lze izolovat a využít do řady produktů, např. potravinových doplňků pro diabetiky.
Technologie zplynování dřevní biomasy se ukazuje jako velmi perspektivní, zejména pro výrobu tzv. biooleje pyrolýzou nebo zplynování dřevních štěpků na syntetický plyn (směs CO + H2, případně se stopami CO2), který může být dále využit k výrobě kvalitního paliva (BtL procesy). Moderním procesním způsobem zplynování je fluidní technika. Zplynování dřevní biomasy je výhodné zejména při aplikaci energetických rostlin využívaných při tzv. fytoremediaci zamořených půd (rostliny svým kořenovým systémem rozloží nebo „nasají“ škodliviny z kontaminovaných lokalit půd); proces je vhodný např. pro separace těžkých kovů ze zamořených lokalit. Těžké kovy jsou po zplynování enkapsulovány do pevného uhlíkatého zbytku (tzv. char), resp. do popele, a nepronikají do ovzduší.
V rámci biorafinačního přístupu je prováděn (např. ÚCHP) mj. výzkum zplynování vhodných (energetických) rostlin po jejich předchozím materiálovém využití (např. extrakce vosků). Odpadní plyny po fluidním zplynování mohou být energeticky využity (např. na výrobu motorových paliv nebo tepla), únos tuhých částic je pak separován v cyklonu. Popílek může mj. enkapsulovat těžké kovy (v případě, že jsou využívány dřeviny aplikované při fytoremediaci).
Další možností je biorafinace lignocelulózových materiálů hydrolýzou. Vybrané energetické rostliny, resp. odpadní lesní materiál, jsou hydrolyzovány na rozpustné složky (celulózu a hemicelulózu), které jsou mikrobiologicky konvertovány na etanol, nerozpustný lignin může být buď spalován přímo na výrobu tepla a elektřiny, nebo upraven gasifikací na syntézní plyn (H_2, CO, CO_2, CH_4) využitelného jako uhlíková surovina k syntézám, nebo rovněž jako palivo.
Lze také využít bioaktivní látky z produkce živočišné výroby. Vedlejší produkty z jateční produkce vepřů, hovězího dobytka a kuřat - kosti, tuk, peří, běháky (roční produkce v rámci ČR lze odhadnout kolem 850 tun) jsou zdrojem bioaktivních látek (keratin, kolagen, chondroitin sulfát, polysacharidové polymery, hyaluronová kyselina, a další).
Keratin z peří kuřat lze využít po hydrolýze jako fytostimulantu a k ochranným postřikům nebo jako přísady do krmiva. Podobně lze využít kolagen (např. z chrupavek, kostí a kůže drůbeže a hospodářských zvířat) nebo jeho chemicky čistá varianta želatina se využívá jako přísada do potravin se sníženým obsahem tuku, jako tradiční kloubní výživa dodávající aminokyseliny potřebné k regeneraci chrupavek nebo také v kosmetice jako dermatologicky výživový přídavek do krémů a pleťových masek.

3.1.2. Biokatalyzátory

Netradiční biomasou pro průmyslové využití skýtají řasy. Mikrořasy mohou obsahovat až 70 % škrobu, nebo až 50 % oleje, který je složením velmi podobný rostlinným olejům. Velkoobjemové pěstování řas je prozatím vyřešeno hlavně pro rychle rostoucí řasy, např. rodu Chlorella. Zde je obrovský prostor pro výzkum v oblasti kultivace nových kmenů (bohatých na obsah škrobu nebo lipidů) se zaměřením jak na urychlování růstu řas, tak na zvyšování obsahu olejů. Vedle fototropních bioreaktorů potřebujících světlo) je zde velký prostor pro optimalizace vhodných typů autotrofních fotobioreaktorů (na bázi fermentační produkce řas, což je nový a pro průmyslovou produkci řas současný výzkumný trend). Venkovní otevřené fotobioreaktory (tzv. autotrofní reaktory) jsou konstrukčně jednoduché, ale zabírají značnou

plochu. Jsou vhodné pro rychle rostoucí jednoduché fotosyntetizující řasy, které zde dosahují relativně nízkých konečných koncentrací. Pomalu rostoucí řasy s vysokým obsahem lipidů a jiných bioaktivních látek jsou zde rychle potlačeny růstem náletových rychle rostoucích řas. Pro takové řasy jsou vhodné nákladnější uzavřené typy fotobioreaktorů nebo tzv. heterotrofní reaktory (fermentory nebo mixotrofní bioreaktory).
Mixotrofní bioreaktory pracují jako fermentory, tj. uhlík potřebný k růstu řas získávají z živin na bázi vhodného sacharidu a přijímají kyslík respirací ze vzduchu, ale přitom umožňují současnou asimilaci uvolněného oxidu uhličitého fotosyntézou.
Řasy poskytují též řadu žádaných produktů pro potravinářství, farmacii a kosmetiku (nenasycené omega 3- a 6- mastné kyseliny, karotenoidy, vitamíny, růstové faktory, chlorofyl apod.), značný obsah bílkovin je předurčuje i jako doplněk stravy a krmiv. Výtěžnosti řas vztažené na plochu potřebnou k pěstování jsou však mnohem vyšší než u hospodářských rostlin.

3.1.3. Využívání bioproduktů pro syntézu chemických specialit

Biorafinačním postupem tak lze z obnovitelných zdrojů biomasy získat takové platformní chemikálie, které mohou v blízké budoucnosti zcela změnit tvář průmyslové chemie. Na komerční bázi se již dnes z biomasy produkují například oxid uhličitý, kyselina octová, kvasnými procesy jednoduché alifatické alkoholy, aldehydy a též aceton, glycerol, organické kyseliny, třeba octová, mléčná, citronová i řada nutričních aminokyselin či fermentačně syntetizovaných antibiotik.
Průmysl chemického zpracování biomasy, založený na principu biorafinace, bude koncepčně samozřejmě vycházet z jiných základních chemikálií, než je tomu v petrochemii. Teoreticky je sice možno většinu petrochemických produktů (uvádí se až 80 %) získat i biorafinační cestou (prakticky je to možné např. v produkci alifatických uhlovodíků), ale bylo by to v řadě případů dosažitelné třeba s menšími výtěžky a nesrovnatelně vyššími provozními náklady.
Na druhé straně, významnou řadu chemických produktů nezbytných pro zajištění základních potřeb společnosti by již dnes nebylo možné, nebo jen s obtížemi a značným energetickým výdajem připravit na bázi fosilních zdrojů (příkladem jsou nenasycené mastné kyseliny, antibiotika, fytohormony, apod.).
Významnou roli v chemii biomasy bude hrát její "karbohydrátová" frakce. Dá se předpokládat, že její složky budou biologicky nebo chemicky konvertovány na běžné základní chemikálie, funkčně analogické základním (platformním) petrochemickým chemikáliím (etylen, propylen, olefiny, benzen atp.).
Tak zvané bio-platformní chemikálie zahrnují řadu látek, z nichž lze uvést např. glycerol (je vhodnou surovinou pro syntézu epichlorhydrinu, přičemž odpadá v současnosti při výrobě biopaliva MEŘO – metylesteru řepkového oleje), kyselinu jantarovou (vzniká fermentací z cukerných hydrolyzátů a je využitelná pro syntézu 1,4-butandiolu, gama-butyrolaktonu, tetrahydrofuranu, nebo jako složka polyesterů, atd.), butanol (fermentační produkt s vyšší energetickou zásobou než má etanol, mísitelný do fosilních motorových paliv a je výchozí chemikálií pro návazné chemické syntézy apod.). Do tohoto výčtu patří rovněž biodegradabilní polymery z hydroxykyselin (mléčná, 3-hydroxymáselná, 3-hydroxypropionová) na polyhydroxyalkanoáty.
Je evidentní, že biomasa je jedinečná tím, že má kromě energetického také významné využití v chemické technologii a potravinářství. Její zpracování má dále význam pro zdravotnictví, farmacii, kosmetiku i pro ochranu krajiny a životního prostředí.

Prioritní výzkumná témata

- šlechtění a kultivace nových typů mikroorganizmů pro účinné a selektivní realizace nových chemických produktů pro potravinářství, zemědělství, kosmetiku na substrátech,

které jsou produktem biorafinace biomasy, při potlačení negativních stresových podmínek;
- šlechtění nových typů mikroorganizmů pro biopolymery na bázi recyklovaných médií jako substrátu (např. odpadního glycerolu);
- mikrobiologie a podmínky pro vypěstování mikroorganizmů produkujících netradiční biopaliva na netradičních (odpadních) substrátech;
- šlechtění a produkce nových kmenů mikrořas produkujících žádané složky s vysokou přidanou hodnotou, včetně biopolymerů, platformních chemických látek, nenasycených mastných kyselin, lipidů a škrobu využitelných jako biopaliva;
- návrh a provozování nových typů foto-bioreaktorů a tzv. mixotropních bioreaktorů pro kultivace řas, srovnání s kultivacemi v heterotropním režimu;
- chemické a enzymatické hydrolýzy netradičních biologických materiálů rostlinného a živočišného původu, a to i za aplikace netradičních technik (mikrovlny, ultrazvuk) s cílem získání produktů využitelných v potravinových doplňcích nebo kosmetice či jako růstové faktory (např. chondroitin, karotenoidy, antioxidanty, platformní kyseliny – zejména kyselina jantarová, atp.);
- řešení ekonomicky přijatelných způsobů sklízení mikroorganizmů včetně mikrořas a jejich dezintegrace pro následnou extrakci cenných komponent;
- optimální provozování bioreaktorů a fermentorů pilotních rozměrů;
- řešení nových způsobů separace chemických látek z materiálu biologického původu, zejména selektivní extrakcí novými typy rozpouštědel (superkritické kapaliny) resp. technik (mikrovlny, ultrazvuk, pulzní elektrické pole, atd.).
- řešení membránových separací plynů, zejména z bioplynu;
- netradiční vysokotlakové konverze materiálů biologického původu (subkritickými environmnetálně přijatelnými rozpouštědly);
- pilotní aplikace hydrolýzy netradičních biomateriálů z odpadů rostlinné a živočišné výroby (peří, chrupavky drůbeže, hydrolýzy vybraných energetických rostlin obsahujících další cenné chemické látky, separace produktů);
- vývoj nových produktů (pro kosmetiku a potravinové doplňky) na bázi odpadních látek z rostlinné a živočišné zemědělské produkce;
- vývoj nových postupů BtL (Biomass to Liquid) zpracování organických odpadů;
- zpřesňování metodiky LCA (analýza životního cyklu, Life Cycle Analysis) pro bioprodukty a biopaliva vyrobená v biorafinériích;
- nové konstrukce bioreaktorů, zařízení pro briketování odpadní biomasy využitelné pro energetické účely apod.

3.2. Pokročilé materiály a technologie

3.2.1. Nanotechnologie a nanomateriály

Komerčně vyráběné nanomateriály

Nanotechnologie a nanomateriály jsou jednou z perspektívních 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 obyvatel. Realizace záměrů Národní Strategie inteligentní specializace ČR a zejména Průmyslu 4.0 není reálná bez široké aplikace nanomateriálů a nanotechnologií.

Průnik nanotechnologií na trhu zatím není tak spontánní jak se očekávalo, ale přesto se v blízké budoucnosti předpokládá dynamický nárůst s ohledem na přínos pro přidanou hodnotu výrobků. Experti předpokládají, že globální trh s nanomateriály v příštím desetiletí poroste meziročně přibližně o 20,5 – 23,1 %.

EU v současné době vynakládá zhruba 740 milionů eur (zhruba 1,2 miliardy USD) ročně z veřejných finančních prostředků na výzkum nanotechnologií. Velká podpora ze strany EU je také zaměřena na rozvoj mezinárodní spolupráce v nanotechnologiích. ČR je do těchto aktivit zapojena v rámci projektů NANOMAT, NENAMAT a MNT ERANET.

Z hlediska dlouhodobé perspektivy jsou hlavními kandidáty využiti výsledků výzkumu v oblasti nanotechnologií informační a komunikační technologie, jenž nahradí stávající mikroelektroniku nanoelektronikou. Zde sehraji významnou roli uhlíkové nanotrubičky a fullereny. Očekává se, že se budou rozvíjet metody výroby tenkých nanodrátků do nanosenzorů (např. pro detekci chemických a biologicky nebezpečných látek). NM s vylepšenými vlastnostmi se budou používat při vysoce účinné katalýze v chemických procesech a při přeměně energie ve fotovoltaických a palivových článcích, biokonverzi energie či zpracováni odpadů a kontrole ovzduší. V medicíně se budou dále vyvíjet nová diagnostická zařízeni, terapeutika, transport léků nebo biokompatibilní materiály pro implantáty a protézy.

Velké naděje se vkládají do budoucího využiti tzv. „extrémní nanotechnologie“, která zahrnuje manipulaci s atomy a molekulami. Jde o samoreplikujici se a samosestavující se systémy, které mohou mít uplatněni v elektronice nebo lékařství.

Zatímco v současnosti je největším spotřebitelským sektorem výroba nátěrových hmot, rychlejším růstem spotřeby nanomateriálů v elektronice v dohledné době překročí jejich aplikace 30 % podíl na trhu. Největší objem nanomateriálů v současné době je založen na Ag, uhlíku a oxidech Ti, Si a Zn. Do skupiny komerčních nanomateriálů dále patří CeO2, FeOx, AlOx, grafen . Za velmi perspektivní prvek je považováno lithium zejména v souvislosti s velmi dynamickým nárůstem trhu s autobateriemi pro elektromobily.

Nanotechnologie není nějaké nové průmyslové odvětví, je to zcela nový technologický přístup, který jde napříč prakticky všemi obory od medicíny až třeba po kosmický vývoj.

Nanomateriály mohou být připraveny prostřednictvím širokého spektra různých cest. Výsledné materiály mohou mít značně rozdílné vlastnosti, v závislosti na zvoleném postupu jejich výroby. Zjednodušeně lze rozdělit techniky přípravy nanomateriálů následovně:

a.) Chemické procesy na mokré cestě

Mezi ně patří koloidní chemie, metody hydrotermální, sol-gely a další srážecí procesy. V podstatě, roztoky různými ionty se smísí v dobře definovaných množství a za kontrolovaných podmínek teploty a tlaku, aby podporovaly tvorbu nerozpustných sloučenin, které se vysráží z roztoku. Tato sraženina se pak oddělí filtrováním nebo sušením rozprašováním za vzniku suchého prášku.

Mezi výhody těchto mokrých chemických procesů je, že může být připraveno velké množství sloučenin, včetně anorganických, organických látek a také některých kovů, v podstatě s použitím levných zařízení. Dalším důležitým faktorem je schopnost řídit úzké rozdělení velikosti částic a produkovat vysoce monodisperzní materiály. Často je třeba dopovat krystalovou mřížku materiálu dalšími prvky (např. P, Mn, Al, Zn a další) nebo provést povrchovou úpravu nanomateriálů (např. Zr, silany, SiO_2 nebo Al_2O_3) pro zlepšení požadovaných vlastností finálního nanomateriálu, funkcionalizaci povrchu a zlepšení jeho dispergovatelnosti.

b.) Mechanické procesy

Patří mezi ně mletí, mikronizace , frézování a mechanické slévací techniky. Výhody těchto technik je, že jsou jednoduché, vyžadují nízké náklady na zařízení. Nicméně mohou nastat problémy, jako je aglomerace prášků, široké rozdělení velikosti částic, kontaminace ze samotného technického zařízení, a často obtíže při získávání na velmi jemné velikosti částic se solidními výnosy.

c.) Procesy „ Form-in-place“
Mezi ně patří litografie, vakuové nanášení, jako jsou fyzikální nanášení par a chemické depozice z plynné fáze a nástřiků. S využitím 3D tisku je intenzivně vyvíjen nový hybridní přístup, který je vhodně využit pro výrobu nanostruktur, nanokatalyzátorů, polovodičů a nanokompozitů. Výhodou této metody je, že velké množství jednosměrných nanostruktur lze syntetizovat řízeně při omezeném růstu velikosti částic od jednoho do několika nanometrů.

d.) Procesy v plynné fázi
patří mezi ně CDV (Chemical Vapour Dekomposition) technologie, plamenová pyrolýza, elektro-expozice, laserové ablace, vysoké teploty napařování a syntézy plazmové techniky. Plamenová pyrolýza se používá již mnoho let ve výrobě sazí a pyrogenního oxidu křemičitého. DuPont vyrábí nano-TiO_2 plazmovým procesem, firma Milpitas využívá laserovou technologii. Laserovou ablací je možno připravit téměř všechny nanomateriály, protože využívá kombinaci fyzické eroze a odpařování. Metoda je zatím nejvhodnější pro výzkumné účely.
Výroba fullerenů a uhlíkových nanotrubiček je specifická podskupina syntézy v plynné fázi. Všechny postupy v podstatě zahrnují kontrolovaný růst nanotrubičky na částice katalyzátoru při krakování plynů bohatých na uhlík, jako je metan, acetylén.
Pro dosažení požadované vysoké čistotě nanomateriálů je nutno často pracovat při vysokých teplotách a tlacích, za použití velkého množství organických rozpouštědel pro udržení příznivých podmínek pro jejich výrobu. Tyto skutečnosti jsou příčinou vysoké spotřeby energií při výrobě některých nanomateriálů.
V ČR je významnou příležitostí pro rozvoj výroby nanomateriálů národní strategická specializace, zejména na takové obory jako je výroba dopravních prostředků, elektronika, energetika, péče o zdraví lidí.
Na 250 subjektů veřejného a soukromého sektoru se v ČR zabývá nanotechnologiemi. A zájem o tento průřezový obor budoucnosti stále stoupá, zvláště mezi firmami. Vidí v něm šanci jak se vzdálit konkurenci a pouštějí se do průmyslového využití nanotechnologií, zejména do výroby nanomateriálů. Nejvíc konkrétních výzkumných úkolů se podařilo dovést do praxe chemickému průmyslu. Například nanofilmy našly uplatnění v solárních článcích, světelných diodách, fotonice, bezdrátové komunikaci nebo polovodičích. Nanotechnologie se rychle rozšířily též ve výrobě nosičů pro ukládání dat. V příštích letech bude podporovat dynamiku trhu hlavně poptávka obranného sektoru a zdravotnictví, tedy oborů, které v tak velké míře (jako některá jiná odvětví) nepodléhají výkyvům hospodářského cyklu. Nanotechnologickou mapu ČR v posledních 5 letech rozšířilo nejméně 8 regionálních výzkumných center, které se ve větší či menší míře zabývají aplikovaným výzkumem nanotechnologií. Jejich vznik byl podpořen ze strukturálních fondů EU a státního rozpočtu ČR úhrnnou částkou 170 milionů EUR. Na dlouhodobou výzkumnou spolupráci akademické sféry s průmyslovými firmami v nanotechnologiích je zaměřeno rovněž 10 tzv. Center kompetence podpořených Technologickou agenturou ČR. Jedno z těchto center se zabývá využitím šetrných nanotechnologií a biotechnologií pro čištění vod a půd, další vývojem a aplikacemi nanokompozitů na bázi grafenu nebo výzkumem povrchových úprav. Převážně základní nanotechnologický výzkum probíhá nebo bude probíhat též v šesti velkých výzkumných Centrech excelence budovaných nákladem 840 milionů EUR z fondů EU a ČR v Dolních Břežanech, Brně, Řeži u Prahy, Ostravě a ve Vestci u Prahy.
Vedle nanotechnologických výzkumných kapacit v ČR přibývá i firem, které v nanotechnologiích vidí zajímavou podnikatelskou šanci. Počet subjektů zabývajících se v ČR výzkumem, vývojem nanotechnologií a výrobou konkrétních nanoaplikací se za posledních 7 let ztrojnásobil. Největší dynamika je přitom patrná mezi malými a středními firmami. Mnohé z nich mají nanotechnologie součástí core businessu. Jedná se například o nanovlákenné filtry

a membrány, antialergické lůžkoviny, funkční nátěry, oblečení s hydrofobním povrchem, čističky vody s nanotechnologiemi, nanovlákenné struktury pro regenerativní medicínu a další. Také se dokáže pomocí 3D nanotiskárny postavit jemný skelet pro vytváření náhradních lidských orgánů. Český patent 3D nanobaterie má potenciál na vyřešení problému uskladnění energie z obnovitelných zdrojů. Umíme pomocí nanočástic vyčistit vzduch, vody i půdu.
Obor nanotechnologií je v současnosti ve fázi, kdy malé a střední firmy s velkým inovačním potenciálem a dynamikou růstu nemají dostatečné zdroje na profinancování rozvojových projektů. Proto je tak důležité využívat např. granty na předaplikační vývoj, vytvoření Národního inovačního fondu, vytvořit podmínky pro větší podporu podnikatelského sektoru rizikovým kapitálem a cíleně orientovaných investičních pobídek.
Mezinárodního úspěchu dosahuje rozvoj výroby a aplikací nanovláken. V ČR máme silné zastoupení v oblasti organických a anorganických nanovláken a jejich použití v textilním průmyslu, k filtraci a čištění vody, ve zdravotnictví i energetice. Umíme pomocí nanočástic vyčistit vzduch i vodu od nečistot a patogenů. České nanotechnologie v lůžkovinách s nanovlákennou bariérou pomáhají alergikům.
Již dnes existují v tomto segmentu v ČR výrobní závody nebo výrobní poloprovozy, např. Nano Iron (nano železo), CS Cabot (saze), Precheza (výrobní poloprovoz nano TiO_2 a výrobní závod v Číně), Bochemie (nano ZnO).
Využití nanotechnologií a nanomateriálů je velmi rozsáhlé, již v současnosti nacházejí uplatnění v mnoha tradičních oborech, jako jsou výroba nátěrových hmot, kosmetika, gumárenský a plastikářský průmysl, fotovoltaika, zdravotnictví, textilní průmysl, strojírenství, automobilový průmysl, stavebnictví, elektronika, ochrana životního prostředí, chemický průmysl, elektrotechnický průmysl, optický průmysl, potravinářství, výroba obalů a další. Roste aplikace nanomateriálů ve vojenském sektoru a kosmických technologiích, v energetice a ochraně životního prostředí.
Nanotechnologie bychom mohli definovat jako interdisciplinární a průřezové technologie, zabývající se praktickým využitím nových a neobvyklých vlastností nanomateriálů pro konstrukci nových struktur, materiálů a zařízení. V souladu s nastupující třetí technologickou revolucí byly identifikovány čtyři perspektivní směry budoucího rozvoje nanotechnologií: senzorika, chytré materiály, generování a uskladňování energie a zpracování velkých objemů dat.
Jednou z hlavních překážek rychlejšímu rozvoji výroby a aplikací nanomateriálů je dosud nedořešená legislativa v oblasti bezpečnosti v celém životním cyklu nanomateriálů a také nedostatečná standardizace metod posuzování účinnosti a životnosti těchto zcela nových materiálů. Z toho pramení i určité obavy veřejnosti o bezpečnost výroba a aplikace nanomateriálů. Řešení otázek rizik spojených s aplikací nanomateriálů dlouhodobě pokulhává v celosvětovém kontextu za samotným vývojem nanotechnologií. Posouzení možných rizik musí předcházet studium unikátních vlastností nanomateriálů a jejich možné toxicity, zejména mechanismů této toxicity. Je třeba identifikovat klíčové fyzikálně chemické vlastnosti nanomateriálů, které určují jejich biologické účinky, tj. jejich transport buněčnými stěnami a interakce s DNA, RNA, proteiny a lipidy. Dle expertů EU lze očekávat, že do 5 let bude na základě vědeckých projektů z oblasti bezpečnosti nanotechnologií definován legislativní rámec pro nejdůležitější nanomateriály. Bylo by žádoucí zapojit české odborníky do práce mezinárodních konsorcií, které pro EU připravují podklady.
Vzhledem k prognózovanému dynamickému růst spotřeby nano TiO_2 je příležitost vyvíjet jeho ekonomicky efektivní výrobu (např. rozprašovací hydrolýzou) a současně rozvíjet přednostně takové aplikace nano TiO_2 kde nehrozí dopad ze změny legislativy. Jedná se zejména o ochranu povrchů, nátěrové hmoty, fotokatalyzátory a katalyzátory, čištění vod a ovzduší, materiály pro elektroniku, stavební materiály, sklo a keramika.

Výzkum se soustředí na nadějné aplikace grafenu a jeho derivátů např. v environmentální oblasti, elektroniky, ale také strojírenství.
Další žádoucí výzkumnou oblastí jsou multifunkční nanohybridní materiály, nanokompozity a senzory. Vždy je potřebná úzká spolupráce s koncovým uživatelem nanomateriálů. Velké naděje se vkládají do budoucího využiti tzv. „extrémní nanotechnologie“, která zahrnuje manipulaci s atomy a molekulami. Jde o samoreplikujici se a samosestavující se systémy, které mohou mít uplatněni v elektronice nebo lékařství.

Prioritní výzkumná témata

- Ekonomicky efektivní postupy výroby nanočástic oxidu titaničitého
- Rozvoj aplikací nano TiO_2 ve stavebnictví, pro frikční materiály
- Průmyslová výroba nano ZnO ze zpracování odpadních odzinkovacích lázní
- Rozvoj aplikací nano ZnO v gumárenském průmyslu, v kosmetice, výrobě nátěrových hmot a plastů
- Vývoj nanomateriálů na bázi levných fotokatalyticky aktivních oxidů kovů
- Lepší syntetické metody k vytvoření a řízení morfologie částic
- Zvýšit výkonnost funkčních nanopovlaků
- Vývoj velkokapacitní přípravy grafenu
- Dvoudimenzionální chemie směrem ke grafenovým derivátům
- Výzkumu nanočástic oxidů kovů pro katalytické, magnetické a biomedicínské aplikace
- Kompozitní nanomateriály na bázi grafenu s jedinečnými vlastnostmi pro environmentální aplikace
- Vývoj transparentních nanohybridních systémů s mimořádnou odolností proti UV záření a extrémním teplotám
- Vývoj multifunkčních hybridních nanomateriálů
- Ověření využitelnosti fotokatalytické technologie pro čištění vzduchu od nebezpečných látek a navržení optimálního způsobu jejího využití
- Standardizace různých postupů souvisejících s charakterizací a využitím nanočástic
- Bezpečnostní hlediska aplikací založených na nanotechnologiích a podpora regulačních opatření
- Syntéza kompozitních fotokatalytických nanočástic ZnO-mSiO2 použitím nové aerosolové metody
- Uhlíkové nanostruktury pro senzorové aplikace
- Transparentní nanohybridních systémy s mimořádnou odolností proti UV záření a extrémním teplotám
- Vývoj práškových materiálů na bázi oxidů kovů pro bioaplikace, lékařskou diagnostiku i terapii

3.2.2. Nano a mikro tisk pro průmyslovou výrobu aditivních materiálů

Technologie 3D tisku je podskupinou aditivní výroby (dále AM) což je zjednodušeně proces spojování materiálů, který vytváří objekty z dat modelu 3D, obvykle vrstvu na vrstvě. Mikro- a nano-tiskové techniky nalézají řadu aplikací v oblasti elektroniky, biotechnologie a syntézy materiálů. Považují se za zárodek další průmyslové revoluce.
Aditivní výroba má řadu předností - zkrácení času vývoje, omezení počtu výrobních operací, snížení spotřeby energií, snížení nákladů a úsporu materiálů. To by mohlo zmírnit rostoucí propast mezi nabídkou a poptávkou po neobnovitelných zdrojích (např. kovy vzácných zemin). Vzhledem k tomu, že proces tisku má téměř nulový odpad ve srovnání s klasickou výrobou současnými procesy, vede k úspoře cenných zdrojů surovin. Aplikace aditivní výroby by navíc mohla zvýšit schopnost používat recyklované materiály, jako jsou plasty a kovy. Dalším

zdrojem odpadu, který lze výrazně snížit nebo odstranit, je nadměrná nebo neprodaná výroba, jakož i náklady na skladování zásob a náhradních dílů.
Se vzrůstajícím množstvím aplikací aditivní výroby z kovů a plastů roste i potenciál této technologie stát se hlavní produkční technologií budoucnosti.
Pro 3D tisk není problém tisknout i v rozměrech nanosvěta. V nanoměřítku mohou objekty vykazovat jedinečné optické, tepelné a elektrochemické vlastnosti, které se liší od vlastností sypkého materiálu nebo molekul. Tyto vlastnosti významně závisí na velikosti a tvaru nanostruktur. Existuje široká škála nanomateriálů, včetně nanočástic uhlíku, nanovláken, nano trubiček, grafenu, kovových a keramických nanočástic a kvantových teček, které se uvažuje využít k 3D tisku. Tyto materiály mají jedinečné vlastnosti, které umožňují aplikace v oblastech, jako je snímání, separace, plasmonika, katalýza, nanoelektronika, terapeutika a biologické zobrazování a diagnostika. Mikro- a nano-tiskové techniky nalezly řadu aplikací v oblasti elektroniky, biotechnologie a syntézy materiálů.
Přidání kovových nanočástic obecně snižuje teploty slinování, zlepšuje hustotu dílů a snižuje smrštění a deformaci tištěných částí. Kovové nanočástice zabudované do polymerních materiálů mohou rovněž poskytovat lepší elektrickou vodivost ve vyrobených objektech. Začlenění uhlíkových nanotrubiček do tiskových médií nabízí potenciální způsob, jak zlepšit mechanické vlastnosti konečných součástí a zvýšit elektrickou a tepelnou vodivost. Přidání uhlíkových nanotrubiček do „bioscaffold“ může poskytnout vynikající zvýšení proliferace buněk. Přidání polovodičových a keramických nanočástic do tiskového média může vést ke zlepšení mechanických vlastností konečných součástí. Keramické nanočástice mohou být efektivně použity pro inženýrství kostních tkání.
Ve spojení aditivní výroby a nanotechnologií existuje mnoho příležitostí, ale také významné technické a vědecké výzvy. Obvykle je třeba řešit komplex otázek jako je vhodná technologie tisku pro požadovaný výrobek, 3D tiskárna, sofistikovaný software, případná konečná úprava po tisku (např. oddělení podložky) a nalezení vhodných materiálů.
Moderní technologie aditivní výroby používají takové materiály, jako jsou kapalné, pevné a práškové polymery, práškové kovy, keramika. Jednotlivé varianty materiálů jsou tedy omezeny na termoplasty, elastomery, železné kovy (slitiny oceli), neželezné kovy (např. hliník, bronz, Co-Cr a Ti) a některé keramické materiály (například SiO2, TiO2). Nové kompozity s jinými materiály mohou nabídnout větší možnosti rozšíření současných omezení materiálů v aditivní výrobě. Technologie 3D tisku má velký potenciál pro vytvoření nové třídy multifunkčních nanokompozitů.
Uplatnění konceptů 3D tisku na nanotechnologie může přinést řadu výhod – rychlost, přesnost, méně odpadu, ekonomickou životaschopnost. Například tisk trojrozměrných objektů s neuvěřitelně jemnými detaily je již možné pomocí přímé metody laserového tisku nazývaná dvoufotonová litografie. Aplikace této nové pokročilé technologie jsou určeny zejména pro mikroelektroniku, pro výrobu čipů, senzorů, speciální úpravu povrchů, výrobu baterií, nové generace solárních článků, palivových článků, OLED a další.
Stejně jako 3D tisk, nanotechnologie má extrémně širokou škálu možných aplikací: povrchové inženýrství, organická chemie, molekulární biologie, polovodičová fyzika, mikrofabrikace, molekulární inženýrství, nanomedicína, nanoelektronika, biomateriály, výroba energie, spotřební výrobky atd.
Technologie nano 3D tisku by mohla být užitečná i pro nanotechnologické procesy s ekologickými aplikacemi jako je čištění vody. Byly prováděny zkoušky čištění ropných skvrn pomocí nanozařízení. 3D tisk může být jedním ze způsobů, jak urychlit výrobu nanočlánků a zařízení potřebných pro tyto aplikace. Byly publikovány práce o vývoji nanosenzorů pro identifikaci NH_3 nebo NO_2.
Specifickým oborem 3D tisku je bioprinting vytvářející trojrozměrné struktury ze živých buněk nebo jiných tkání. Dělá se to tak, že buňky odebrané z pacienta a namnožené se nastřikují ve

zvláštním gelu na určená místa, kde se uchytí a vytvoří tkáň požadovaného tvaru a vlastností. Tak lze například vyrobit náhradní srdeční chlopně, cévy, uši, části obličeje i jiné poškozené části těla, aniž by hrozila odmítavá imunitní reakce organismu.
Často se hovoří o možném dopadu 3D tisku na chemický průmysl, ale to není jednosměrný vztah. Vlastně chemie zlepšuje spoustu 3D technologií tisku a dokonce připravuje svou budoucnost tím, že umožňuje 4D tisk.
Tyto nové technologie mohou urychlit a zlevnit chemický výzkum. Díky 3D tisku je nyní možné vytvářet spolehlivé a robustní miniaturizované fluidní reaktory jako "mikroplatformy" pro vícestupňové organické chemické syntézy a materiály, tištěné za pár hodin s levnými materiály. Tyto mikroreaktory umožňují vytvářet cílovou molekulu pomocí vícestupňové syntézy, stejně jako rozbíjení molekulárních struktur a detekci stavebních bloků pomocí činidel, které by mohly být vloženy během procesu 3D tisku.Mikroreaktory mohou být také použity jako malé prototypy pro simulaci výrobních procesů. Ve srovnání s klasickým laboratorním vybavením nabízí reakční software větší finanční nezávislost a novou příležitost k realizaci chemické syntézy.
Chemický výzkum má také rozhodující vliv na vývoj jednotlivých technik pro 3D tisk. Existuje asi 20 různých procesů, které mají jednu společnou vlastnost - vrstevnaté pokládání tiskárnou. Konečný produkt by mohl být generován z tavných termoplastických pryskyřic (například technologií laserového slinování nebo modelování fúzovaných depozic) nebo pomocí fotochemické reakce, jako je například stereo-litografie nebo modelování s více tryskami. Pro oba typy procesů jsou fyzikální a chemické vlastnosti vstupních surovin rozhodujícími faktory úspěchu při zpracování a pro kvalitu konečného produktu.
Chemický výzkum může přispět také k urychlení 3D tisku jednak vývojem nových technik „vkládání molekul a atomů“ do tištěných produktů a také vývojem vhodných akcelerátorů procesů tisku. Vkládání vrstev se v budoucnu může zrychlit, ale je nepravděpodobné, že bude na základě aktuálních technik tisku 100x rychlejší.
Implementace 3D nano a mikro tisku může tedy poskytnout chemickému průmyslu řadu výhod, představuje však také mnoho výzev pro chemický výzkum. 3D tisk je příležitostí v oblasti chemie vyvinout inovativní suroviny a získat výrobu výrobků s vyšší přidanou hodnotou. Tyto inovace se týkají především molekulárních syntéz a nových procesů pro transformaci hmoty. Zatímco více než 3000 materiálů se používá při výrobě konvenčních komponent, pro 3D tisk je v současné době k dispozici pouze něco přes 30 materiálů. Předpokládá se, že trh s chemickými práškovými materiály použitelnými pro 3D tisk bude do roku 2020 více než 630 milionů USD ročně. Plasty a pryskyřice, stejně jako kovové prášky nebo keramické materiály se již používají nebo vyhodnocují pro tisk prototypů, částí průmyslových výrobků nebo polotovarů, zejména těch, které jsou složité k výrobě a vyžadují se pouze v malých šaržích. VaV správných postupů přípravy těchto nových materiálů je předmětem neustálých inovací v oblasti chemie takže lze oprávněně předpokládat zavedení nových materiálů v budoucnosti.
Jsou publikovány výzkumné práce s materiály, jako jsou polyanilin, polypyrrol, graphene oxid, fluorované polymery, silikony, polyuretany a další.
Přestože aditivní procesy jsou na trhu k dispozici již přes tři desetiletí, až v současné době začíná rozšiřování jejich aplikací, včetně nanotechnologií. Jedním z hlavních směrů vývoje je rozšíření doposud omezeného sortimentiu materiálů použitelného pro AM.
Evropští odborníci se shodli v potřebě vyvíjet následující nové nanomateriály pro nano 3D tisk:

- plastové nanostruktury jako inteligentní povrchy (např. lotosový efekt);
- polymerní mikrooptiku jako čočky nebo pyramidy;
- hybridní optika pro LED a osvětlení;
- různé polymerní součástky pro MEMS a optická zařízení;
- nové kombinace substrátových inkoustů;
- transparentní vodivé oxidy pro tištěnou keramiku;

- materiály pro tištěnou organickou elektroniku;
- materiály pro laserovou polymeraci;
- materiály pro integrované obvody a pevná paměťová zařízení;
- materiály pro optickou fotoniku integrovanou na Si;
- plazmonická zařízení;
- tisknutelné polovodičové a dielektrické materiály pro tištěnou elektroniku;
- vývoj řady inovativních monokrystalových vodivých inkoustů;

Existuje i celá řada technologických otázek, které by měly být řešeny, abychom mohli získat tržní 3D tiskové produkty. Jedná se o zavedení kontinuální výroby, zabezpečení reprodukovatelnosti špičkové kvality, začlenění přípravy příslušné nanostruktury do výrobní linky s 3D tiskem. Potřeba vyvinout nové propojovací technologie, které mohou využívat submikronové prvky (zejména pro silné fólie), vývoj alternativy pro submikronovou litografii přizpůsobenou pro velkoplošný flexibilní podklad, vývoj tiskových systémů, které mohou obsahovat nano strukturované materiály jako příze z uhlíkových nano trubiček nebo filtry na bázi nanovláken. Nadějným tématem VaV jsou monokrystalové vodivé inkousty, které umožní využívat rychlé a nenákladné technologie inkoustového tisku na řadě flexibilních podkladů a tisknout 3D elektroniku. Grafen je látka, které je věnována mimořádná pozornost i v našich vědeckých a výzkumných centrech. 3D tištěné grafenové aerogelové elektrody pro superkapacitory předčí srovnatelné elektrody vyrobené klasickým postupem.
V ČR probíhá výzkum senzorů obsahujících grafen. Tyto senzory by se měly používat například v inteligentních textiliích, měly by hlásit přítomnost plynů v ovzduší. Využívala by se tak další vlastnost grafenu, a to jeho nepropustnost pro plyny. Plánovaná další použití – požární hlásiče, monitorování stavu pacientů.
Probíhá výzkum využití vysoce vodivého materiálu s uhlíkovými nanotrubičkami pro monitorování složení kapalin nebo detekci toxických kapalin. Velmi nadějnou oblastí jsou tzv. tištěné vodivé polymery (polyanilin, polythiofen nebo polypyroly atd.). V současnosti je používanou technikou pro ukládání stávajících vodivých polymerů odstřeďování.
Nové trendy 3D tisku jsou díky schopnosti připravit tvarově složité produkty konečné podoby na základě trojrozměrného počítačového modelu významným přínosem zejména v oblasti medicíny. Náhrady tvrdých kostních tkání je nyní díky 3D tisku možné připravit přesně dle fyziologických požadavků pacienta.
Do budoucna je velmí zajímavé řešení syntézy nanomateriálů se schopností vlastního sestavení se s použitím nano 3D tisku.

Prioritní výzkumná témata

- Vývoj vhodných nanomateriálů pro jednotlivé aplikace 3 D tisku
- Příprava tenkých fotokatalytických vrstev TiO_2 pomocí piezoelektrického tisku;
- Inovativní tištěný senzor pro detekci přítomnosti těžkých kovů ve vodném prostředí
- Příprava inkoustu s oxidem grafenu;
- Příprava vysoce vodivého Ag inkoustu
- Vývoj nano-epoxidových dielektrických inkoustů;
- Flexibilní tištěná mikroelektronika s využitím organických a hybridních materiálů
- Syntézy nanomateriálů a samosestavování struktur za použití 3 D tisku
- Tištěné optické chemické senzory
- Flexibilní tištěná mikroelektronika s využitím organických a hybridních materiálů
- Implementace pokročilých plniv do výroby extrudovaných kompozitních profilů využívaných progresivními aditivními technologiemi v oblasti 3D tisku
- Porézmí kovové materiály pro kostní náhrady připravené 3D tiskem

3.2.3. Výroba prášků z kovů, funkčních slitin, keramiky a intermetalických látek

Intenzivní vývoj materiálového inženýrství, rostoucí požadavky automobilového a leteckého průmyslu, strojírenství a elekroniky, obranného průmyslu, ale i na ochranu životního prostředí, na řešení deficitu neobnovitelných surovin přináší nebývalý zájem o výzkum zaměřený na nové výrobní technologie, nové suroviny a vede k vývoji mnoha pokročilých materiálů s jedinečnými vlastnostmi.

Do této poměrně členité oblasti aplikací nanotechnologií zahrnujeme prášky z kovů, nano-oxidů a nano keramiky, nano slitin, nanoporézní systémy (kov-organické matrice) používaných pro katalýzu, čištění plynů, nanomedicínu, fluids, hybridní nanoprášky (keramické nebo kovové nanoprášky obsahující funkční skupiny - polymery, biomolekuly) používané pro aplikace v elektronice, nanomedicíně, nanohybridní výplňový materiál na bázi keramiky pro dentální účely, luminofory, malé jednotlivé nanočástice s velikostí pod 5 nm, ale také třeba plasmony nebo metamateriály. S nano prášky se však můžeme setkat u řady spotřebních výrobků jako nař. v autokosmetice a čisticích prostředcích, u profesionálních systémů pro mazání sjezdařských lyží (nano- fluorokarbonových prášky), ale i ve stavebnictví (např. fasádní barvy s nanokeramickými částicemi).

Cestovní mapa evropské platformy (TP SusChem) definovala následující problémy a příležitosti:

a) Cenově výhodné průmyslové technologie pro syntézu plniv a technologie pro jejich dispergaci.

Hlavní požadované produkty: nano oxidy, nano keramika, nano slitiny, kov-polymer kompozity, technologie přípravy nano materiálů, katalyzátory a nanodisperze, velmi malé částice (pod 5 nm), fluids, nanoporézní systémy a hybridní nano prášky (keramické nebo kovové nanoprášky obsahující funkční skupiny). Kompozitům a katalyzátorům se věnují jiné kapitoly SVA.

Komerční techniky přípravy keramických prášků (sol-gel proces, společné srážení z roztoku, hydrotermání syntézy, pyrolýza aerosolů, vymrazování, srážení z plynné fáze, mechano-chemická syntéza, hydrotermální metoda společného srážení, aj.). Všechny tyto techniky mají jeden nebo více problémů nebo nedostatků jako je nízký výtěžek, nízká rychlost, vysoká energetická spotřeba, vysoké výrobní náklady, vznik polydisperních prášků, problémy s dosažením požadované mimořádné čistoty nano materiálu. U jiných metod (např. mletí a mikronizace) vznikají příliš polydisperzní částice, další technika pracuje s příliš vysokou teplotou, kterou např. některé farmaceutické látky nesnášejí. Některé z těchto metod neumožňují připravit velmi malé částice (pod 5 nm). Přitom je dostatečně prokázáno, že řada žádaných nanofunkcí je dosahována právě zmenšováním velikosti částic (například fotokatalytický efekt, antimikrobiální aktivita, vulkanizační aktivita ZnO, ale také se zvyšuje životnost požadované funkcionality).

Relativně snadnou a ekonomickou metodou pro přípravu velkého množství pokročilých materiálů je samospouštějící se vysokoteplotní syntéza (SHS). Mezi rozsáhlé aplikace syntézy spalování patří příprava různých druhů keramických prášků včetně nitridů (Si_3N_4, AlN, TiN, BN, SiAlON atd.), karbidů (SiC, TiC, ZrC, Ti_3SiC_2, Ti_3AlC_2, Ti_2AlC atd.), boridů (MgB_2, TiB_2, ZrB_2 atd.), silicidů (například $MoSi_2$) a oxidů (například ferity, supravodič Y-Ba-Cu-O). Velikost zrna a morfologie keramických prášků mohou být manipulovány ovládáním parametrů zpracování a volbou surovin.

Mezi nově vyvíjené ekonomicky schůdné procesy výroby nano prášků patří tzv. FOCUSED ENERGY SYNTHESIS ("FES") firmy Lorad Chemical Corporation. Tato metoda byla úspěšně aplikována pro výrobu luminofórů, nanoprášků oxidu tantalu nebo oxidu niobia nebo vícesložkových oxidů tantal / niob, pro přípravu tepelně bariérových povrchových úprav (např. stabilizovaného Zr, yttriem nebo dalšími stabilizátory jako CaO, MgO nebo Al_2O_3),

termoelektrických oxidů**,** materiálů pro tištěnou elektroniku, aditiv pro zvýšení odolnosti proti opotřebění povrchových úprav a řada dalších nano materiálů. Byly připraveny i materiály na bázi céru jako pevných elektrolytů pro alternativní palivové články z pevných oxidů.
Přes úspěchy komercionalizace výroby nanoprášků v posledních letech, zůstává jedním z hlavních technických problémů dispergace těchto materiálů a stabilita těchto disperzí. Jsou potřebná nová řešení, která umožní účinnou dispergaci nanočástic v suspenzi a pastách připravených pro průmyslové aplikace, usnadňující manipulaci a zpracování nanomateriálů. Technologie založené na mokrých metodách vyžadují lepší pochopení vztahu mezi procesem a materiály, reprodukovatelností a spolehlivostí stabilizace disperzí nanočástic v médiích za účelem lepšího ovládání rozhraní.
Cílem dispergace je tedy disperzní podíl rozmíchat v disperzním prostředí za účelem vytvoření homogenní disperze. Existují různé metody dispergace. Abychom dosáhli určité velikosti částic, musíme do dané soustavy vložit odpovídající množství energie. Schopnost dispergace částic se dramaticky mění s klesající velikostí částic. Pro větší částice převládají gravitační síly nad adhezními a dispergace je tudíž snadná. Ovšem pro částice menší jak 20 μm dochází k prudkému růstu adhezních sil a tím i potřebné energie pro jejich překonání a dosažení menších částic. Určení maximální stabilní velikosti částic závisí na velikosti vratných sil a na velikosti vnějších deformačních sil.
Metoda dispergace využívající technologii ultrazvuku je defacto jedinou metodou, která je schopna dispergovat částice spadající do řádu nanočástic. Shluky částic jsou drženy pohromadě přitažlivými silami různých fyzikálních a chemických povah, které je nutno překonat pro dobrou homogenizaci částic v disperzním prostředí, případně deaglomeraci částic. Hlavním rysem nanokrystalických materiálů (ve srovnání s jejich mikrokrystalickými obdobami) je relativní zvětšení objemové frakce fázového rozhraní složek, tzn. styčných ploch a hran V případě velikosti zrn pod 20 nm se stává hrana důležitější než plocha. Částice o velikosti nanometrů kovů, polovodičů a keramiky mají jedinečné zpracovatelské charakteristiky a výkonnostní vlastnosti. Nové vlastnosti nano-krystalických materiálů jsou způsobeny jejich malými zbytkovými velikostmi pórů (malé vnitřní velikosti defektů), omezenými zrny, jedinečným Bohrovým poloměrem a velkou frakcí atomů umístěných v rozhraních. Konkrétně je známo, že keramika vyrobená z ultrajemných částic má vysokou pevnost a houževnatost vzhledem k velmi malým vnitřním velikostem defektů a schopností hranice zrn projít velkou plastickou deformací. U vícefázového materiálu mohou omezené fázové rozměry znamenat omezenou dráhu šíření trhlin, jestliže křehká fáze je obklopena tvárnými fázemi, takže praskliny v křehké fázi nedosáhnou snadno kritické velikosti trhliny.

b) Rozvoj generování nano-funkcí jako rozsáhlý a nízko nákladový zdroj nanomateriálů.
Úspěšné přizpůsobení nanotechnologií konečným produktům vyžaduje v mnoha případech využití materiálů, které jsou schopny rozvíjet své nano-funkčnosti během standardního procesu výroby polotovaru konečného výrobku. Jako příklady lze uvést přísady do plastů, které krystalizují v nanočástice během vstřikování, tvarování kovové fáze během kování, nebo hierarchická struktura, která spontánně vzniká během nanášení povlaku. Je žádocí sledovat možnost získání nanofukčních vlastností přímo v průběhu výroby. Takový proces pak výrazně snižuje bezpečnostní rizika související s používáním volných nanočástic. Současně je třeba řešit aspekt opětovného použití, recyklace nebo likvidace materiálů obsahujících vyvinuté nano funkce.

c) V letech 2019-2022 podporovat rozvoj materiálů pro skladování energií.
Nano prášky a sypké materiály s konstrukčními vlastnostmi (jako je pórovitost, hydrofobicita a reaktivita povrchu, řízené vlastnosti tepelného přenosu) by měly být připraveny pro

skladování specifických plynů (např. zemní plyn, vodík) nebo kapalin se schopnostmi uchovávat energii (například materiály s fázovou změnou).
Jako nadějný příklad lze uvést aplikace slitin na bázi hořčíku pro vodíkové hospodářství. Vodík, který je v současnosti předmětem zájmu jako alternativní zdroj energie pro pohon automobilů nebo jiných energetických zařízení, je možné bezpečně uchovávat ve formě hydridů na bázi hořčíku, v které jsou slibným materiálem pro své kinetické a termodynamické vlastnosti při sorpci a desorpci vodíku. U hydridů, které budou připraveny různými metodami (mechanickým legováním ve vodíku, elektrochemickými metodami, tepelným zpracováním v atmosféře vodíku) jsou sledovány různé charakteristiky: vliv struktury (amorfní, nanokrystalické) na množství uloženého vodíku, vliv legujících prvků na kinetiku reakce při desorpci a na množství uloženého vodíku, vliv technologie přípravy na strukturní vlastnosti. Výsledky těchto experimentů umožní volbu složení a procesu přípravy materiálu pro uchovávání vodíku.

d) Rozvoj technologií nanomateriálů pro náhradu kritických surovin.
Nové materiály, které nahrazují kritické suroviny, musí být navrženy tak, aby měly požadované technologické vlastnosti v aplikacích. Nanoprášky, tenké filmy nebo silné povrchové povlaky s podobnými nebo dokonce se zlepšenými funkčními vlastnostmi ve srovnání se současnými materiály, musí být navrženy pro špičkové aplikace, avšak se sníženým nebo žádným obsahem kritickým materiálů. V současnosti mnoho z těchto špičkových aplikací využívá prvky vzácných zemin a další kritické materiály, Nitridy přechodných kovů získaly velkou oblibu díky jejich jedinečným chemickým a fyzikálním vlastnostnostem. Mezi těmito materiály je zajímavý především TiN. Má vynikající tvrdost, dobrou tepelnou stabilitu, vysokou odolnost proti opotřebení, vynikající odolnost korozi a relativně vysokou elektrickou vodivost. Může se používat jako materiál na úpravu povrchů řezných nástrojů, difuzní bariéra v mikroelektronických zařízeních a ochranná vrstva na optických součástech. Důležitou metodou pro přípravu TiN prášků je spalovací proces, který umožňuje přípravu TiN s různou morfologií. Jako příklad požadovaného řešení náhrady kritických surovin lze uvést hledání náhrady oxidu india a cínu (ITO), což je nejrozšířenější průhledný oxidový film v různých zobrazovacích technologijích. Tato aplikace je limitována omezenými dodávkami india a vysokými náklady, křehkostí a nedostatečnou pružností. K překonání těchto obtíží bylo studováno využití uhlíkových nano trubiček a graphenu jako nadějné náhrady za ITO. Pokud bude tento vývoj úspěšný, nahrazení ITO odstraní potřebu použití vzácného india a současně poskytne nové a velmi žádoucí vlastnosti, jako je flexibilita.

e) Po roce 2022 se uvažuje s vývojem syntéz tzv. „hostujících“ nano částic pro nanomedicinu.
Do této skupiny nano materiálů můžeme zařadit velmi malé individuální nano částice pod 5 nm. Hybridní keramické nebo kovové nano prášky obsahující funkční skupiny (např. polymery, biomolekuly) určené pro nanomedicinu, ale také pro elektroniku**.** Hostující nanočástice nesmí být pro člověka toxické, měly by se snadno zpracovávat, selektivně se připojovat a uvolňovat aktivní molekuly hosta. Jedná se o přípravu nanodisperzí, nanoemulzí, denrimerů, které by měly být připraveny a kombinovány s aktivními molekulami hosta. Vývoj nanostrukturních systémů distribuce léků pro potřeby nanomedicíny za dodržení přísných požadavků biomedicinských aplikací.
V posledních letech kovové nanočástice přitahují značný zájem kvůli svým zajímavým fyzikálně-chemickým vlastnostem, malému rozměru a povrchovému plazmonickému chování. Typickými reprezentanty velmi malých částic jsou Ag a Au. Nano částice Ag dosáhly nejvyšší úroveň komercializace s 55,4 % podílem z celkového množství nano výrobků dostupných na trhu. Nanočástice stříbra jsou využívány v různých oblastech, jako kosmetika, optoelektronika,

biosenzory, katalýza, aplikace povrchově rozšířeného Ramanova rozptylu (SERS) a jako antimikrobiální látka.
Zabudováním částeček Ag do plastů, kompozitů a lepidel zvyšuje elektrickou vodivost materiálu. Stříbrné pasty a epoxidy jsou široce využívány v elektronickém průmyslu. Inkousty na bázi stříbra a jeho nanočástic se používají k tisku pružné elektroniky a mají tu výhodu, že teplota tání malých stříbrných nanočástic v inkoustu je snížena o stovky stupňů ve srovnání s makro stříbrem. Při stírání mají tyto inkousty na bázi nanočástic stříbra vynikající vodivost. Velký potenciál do budoucna je spatřován ve využití velkých rozptylových a absorpčních schopností plazmonických stříbrných nanočástic pro solární aplikace. Protože nanočástice působí jako účinné optické antény, lze získat velmi vysokou účinnost, když jsou nanočástice začleněny do kolektorů.
Podobně lze uvažovat s využitím nano Au částic k přípravě nanostrukrur s vynikajícími vlastnostmi, které se mohou stát základem čidel, pro monitorování životního prostředí například při sledování chemických a biologických kontaminantů, mohou v interakci se světlem, generovat plazmony , což značně zvýší účinnost solárních článků.
Nová technologie výroby práškového Ti vychází ze zpracování rutilového písku, který s využitím elektrolýzy přeměňují přímo na titanový prášek. Výroba titanového prášku podle této technologie snižuje jeho cenu o 75 procent. Firma Metalysis v současné době vyvíjí výrobu tantalového prášku a zamýšlejí svoji technologii využít ke zpracování celé řady dalších zajímavých kovů, včetně kovů vzácných zemin.
Existuje celá řada různých technik přípravy nanoprášků a vývoj jejich aplikací. Mechano-chemická syntéza je relativně nová technologie výroby prášků. Lze jí připravit např. keramický materiál na bázi barium stroncim titanátu (Ba 0,70 Sr 0,30 TiO 3, BST) pro feroelektrické aplikace. Pro přípravu keramického práškového materiálu BST bylo využito syntéz v kapalném stavu na bázi precipitace a sol-gel metod s případným ultrazvukovým, hydrotermálním a mechano-chemickým zpracováním pro podpoření deaglomerace a zabránění růstu zrn při slinovacích teplotách. Dle hodnocení morfologie, velikosti a aglomerace částic byly vybrány vhodné prášky, ze kterých byla připravena BST objemová keramika o definovaném fázovém složení a morfologii použitelná pro feroelektrické aplikace. Slitiny intermetalických sloučenin mohou být připraveny plazmovou a vakuovou metalurgií (speciálních slitin niklu a titanu**)** nebo procesem směrové krystalizace. Proces krystalizace kovů, jejich slitin a sloučenin významně ovlivňuje vlastnosti těchto materiálů. Řízením procesu krystalizace lze připravovat materiály s definovanou strukturou, velikosti zrna a jeho orientací.
Anorganicko-organické hybridní a práškové materiály jsou poměrně novou a rychle se rozvíjející oblastí materiálového výzkumu a vývoje, kdy kombinací jednotlivých složek až na molekulární úrovni lze dosáhnout unikátních vlastností výsledného materiálu.
Odhlédneme-li od požadavků na materiálový a metalurgický výzkum hlavním zadáním pro chemický průmysl je rozvoj výroby nano prášků s funkcionalitami požadovanými uživatelskými obory a zabezpečení jejich optimální dispergace v příslušných pojivech. ČR disponuje v těchto oborech rozvinutou vědecko-výzkumnou základnou (např. Středoevropský technologický institut v Brně), ale postupně se rozvíjející výrobní základnou např. výroba nano nulmocného železa, nano TiO_2 a nano ZnO vyžadují další inovace.
Oblast povrchového inženýrství, zkoumání povrchových úpravy s využitím různých nanomateriálů a různých funkcionalit patří mezi silné stránky VaV v ČR. Jak bylo zdůrazněno v úvodní části dispergace je kritickým a zásadním problémem k úspěšné aplikaci nano materiálů. Nejdůležitější částí ve výrobě je dispergace nanomateriálu a příprava stabilního a reprodukovatelného produktu. Použitelnost nano prášků jako plnidel matrice závisí hlavně na tvaru částic, velikosti a distribuci velikosti částic a chemické homogenitě. Výroba monodisperzních prášků je stejně nepříznivá jako materiál s širokou distribucí velikosti částic. Tyto typy prášků mají tendenci tvořit hustou geometrii obalové plochy spojené se skupinami

volně spojených zrn. Popsané jevy jsou nepříznivé např. během procesu slinování a způsobují tvorbu širokých pórů v slinutém materiálu. Kromě toho je monodisperzní prášek náchylný k vytvoření mechanicky stabilních aglomerátů. Nejmenší velikosti velikosti zrna může být dosaženo pomocí "mokrých" metod výroby částic (například sol-gel nebo srážecí metody). Metody založené na broušení materiálů umožňuje výrobu práškových materiálů s rozmanitými zrnitostmi. Tyto prášky mají tendenci k mechanickému zhutňování (lisování za tepla) a slinování. Součástí úsilí o řešení optimální dispergace nano částic je i případná povrchová úprava prášků nebo přídavek speciálních aditiv.

Zvýšení provozních vlastností různých strojů a nástrojů je klíčovým ekonomicko-technickým problémem; Řešení je přímo spojeno se zavedením nových funkčních materiálů a povlaků se zlepšenými vlastnostmi. V intersticiálních fázích jsou faktory, které vedou k jedinečným vlastnostem nanostrukturních filmů a jejich multifunkčnost, která se projevuje vysokými hodnotami tvrdosti, elastického zotavení, pevnosti, tepelné stability, tepelné odolnosti a odolnosti proti korozi. Tyto nové materiály naleznou aplikaci v ochraně povrchů vystavených současnému působení zvýšené teploty, agresivních médií a různých druhů opotřebení. Jedná se především o nástroje pro řezání a vrtání, tvářecí válce, části leteckých motorů, plynové turbíny a kompresory, kluzná ložiska a trysky pro vytlačování skla a minerálních vláken. Komplexním řešením náhrady stávajících nástrojových materiálů s obsahem CRM by se mohly v budoucnu stát nové materiály vyvíjené v ČR, které využívají zajímavých vlastností intermetalických sloučenin. Koncept spočívá ve vytvoření kompozitního materiálu s keramickou výztuží, avšak matrice není tvořena kovy nebo slitinami na bázi tuhého roztoku, ale vhodným typem intermetalické sloučeniny. Jako perspektivní se jeví intermetalická sloučenina NiTi vyztužená karbidem titanu nebo TiAl s výztuží TiC nebo Al_2O_3.Tyto materiály je nejlépe zpracovávat moderními postupy práškové metalurgie s využitím mechanického legování a slinování metodou Spark Plasma Sintering, díky čemuž dosáhnou ultrajemnozrnné struktury.

Nanoplasmonika je nový výzkumný obor, který spojuje fotonikou a nanotechnologií. Zkoumá lokalizaci interakcí světla a světla / hmoty na nanosnímku. Výzkum v této oblasti se v posledních letech urychlil obrovským tempem díky pokrokům v oblasti výpočetní techniky, nanofabricace a vývoji nových experimentálních technik pro zobrazování světelných polí o rozměrech menších, než je vlnová délka. Nanoplasmonika je na pokraji rozvoje na velmi nadějnou technologickou platformu pro aplikace příští generace v oblasti informačních technologií, energie, vysokorychlostního ukládání dat, a zajištění jejích bezpečnosti. Pomocí technologie plazmoniky vyvinout levné energetické zařízení, která převádí odpadní teplo přímo na elektřinu. Díky technologii plazmoniky s tenkým filmem se zachycuje a převádí přebytečné teplo ze zdrojů, kde přebytečná energie není využívána nebo dokonce musí být aktivně odstraňována použitím dalších procesů využívajících energii (např. chlazením nebo klimatizací). Získávání energie z plazmonu vytvoří elektřinu z okolních zdrojů tepla, jako jsou výfukové plyny automobilů, průmyslové procesy apod. Tato elektřina může být okamžitě použita nebo uložena v akumulátorech.

Další významnou aplikací různých nano prášků je oblast dentálních náhrad. Titan a jeho slitiny se široce využívají v biomedicínských aplikacích jako implantační materiál. Pomocí metody sol-gel (základem je suspenze SiO_2) je možné připravit tenké homogenní bioaktivní vrstvy na inertním kovovém podkladu. Kov zabezpečí mechanickou pevnost a bioaktivní povlak chemické propojení: implantát-kost. Antibakteriálnost vrstev se zajišťuje přídavkem stříbrných kationů. Další aplikací nanostruktur v medicině je použití kovových a polovodičových nanostruktur pro biodetekci.

Izolační materiály pro stavby s využitím nanotechnologií. Sektor budov patří mezi největší spotřebitele energií a hlavní přispěvovatele emisí skleníkových plynů. V EU se odhaduje podíl tohoto sektoru na spotřebě energií na 40 % a více než 36 % podíl na vzniku skleníkových plynů.

Proto vývoj moderních izolačních materiálů s využitím nanotechnologií je jednou z potřeb dalšího vývoje.
Mezi perspektivní materiály patří porézní materiály, aerogely ,nano pěny a speciální povrchové nátěry a barvy. U izolačních materiálů s nano povlaky je současná pozice EU slabá ve srovnání se silnou oblastí průmyslu v USA). Nicméně chemický průmysl EU má schopnost a strategický záměr rozvíjet a komercializovat takové nehořlavé materiály během 5 – 10 let.
V ČR je poměrně rozvinutý sklářský průmysl, pro který jsou zajímavé aplikace nano TiO_2 a SiO_2. Například nanočástice SiO_2 nanesené na povrch skla zabraňují srážení vody na skle, a tím zůstává stále suché a „nepotí se". Speciální vlastnost takto upraveného skla se dá využít např. pro skla automobilů, brýlí nebo u koupelnových zrcadel. Výrobci skel použili nano TiO_2 pro optimální zatmavení. Sklo je schopné odrážet dobře sluneční paprsky. V kombinaci vrstvičky SiO_2 a nano TiO_2 lze připravit „ samočistící sklo" na příklad pro pouliční osvětlení. Jiným námětem je příprava fotosenzitivních skel na bázi oxidu křemičitého a oxidu germaničitého. Důležitou vlastností těchto skel je schopnost změny indexu lomu po ozáření světlem krátké vlnové délky. Této vlastnosti se využívá ve fotonice pro tvorbu vlnovodných struktur s rozdílným indexem lomu, sloužících pro zpracování optického signálu v moderních telekomunikačnách zařízeních. V těchto sklech lze pomocí iontové výměny vytvořit planární vlnovodnou vrstvu po ozáření UV světlem a docílit nárůst defektů ve struktuře skla, které jsou předpokládanou příčinou fotosenzitivních vlastností materiálu.
Nezachycení těchto trendů může negativně ovlivnit budoucí konkurenceschopnost českého průmyslu, na druhé straně může přinést nové inovace nejenom v chemickém průmyslu, ale také ve výrobě slitin, kovů a keramiky, stejně jako ve výrobě přístrojů nebo v moderní medicině.

Prioritní výzkumná témata

- vývoj a optimalizace nových technologií přípravy vysoce čistých materiálů, speciálních kovových slitin a intermetalických sloučenin s definovanou strukturou a fyzikálními vlastnostmi pro aplikace v elektronice, medicíně, strojírenském a chemickém průmyslu
- nanokompozitní materiály a oxidová keramika se zvláštními fyzikálními vlastnostmi;
- vývoj nových hybridních materiálů pro automobilový průmysl, stavebnictví, solární energetiku a moderní zdroje světla;
- příprava TiO_2 vrstev s antibakteriálními účinky a se superhydrofilností;
- příprava fotosenzitivních germaničitokřemičitých skel pro fotoniku;
- struktura a vlastnosti slitin TM-Al a TM-Al-Si vyrobených reaktivní sintrací;
- vliv Fe a Ce na rychle ztuhlé slitiny Al-TM (slitin přechodných kovů);
- výzkum zaměřený na pochopení efektů nano-plniv s velkým specifickým povrchem na mechanické vlastnosti, degradační a hořlavostní chování polymerů;
- vývoj metod pro dispergaci nanočástic a hodnocení jejich vlastností;
- výzkumu povlakových technologií se specializací zejména na automobilový průmysl a výrobu dopravních prostředků;
- vývoj aplikací TiO_2 ve frikčních materiálech;
- vývoj progresivní technologie výroby multifunkčních částic ZnO;
- využití a modifikace dosavadních způsobů přípravy nanočástic ke zlepšení vlastností materiálů vzhledem k zamýšlené oblasti jejich využití;
- vývoj povrchových úprav se zlepšenými vlastnostmi a odolností proti různým, zejména povětrnostním vlivům;
- vývoj technologií přípravy nových typů anorganických a organických nanočástic;
- fotodegradace a hydrofilita hybridních sol-gel vrstev na bázi TiO_2;
- optimalizovaná výroba nanočástic suchou a mokrou technologií mletí;
- zvýšení koercivity magnetů na bázi Nd-Fe-B restrukturalizací hranic zrn;

- vývoj keramických materiálů pro extrémní podmínky na bázi boridů a karbidů přechodových prvků (Hf, Zr, Ta);
- příprava a vlastnosti slitin na bázi hořčíku pro vodíkové hospodářství;
- vývoj grafenového fotodetektoru využívající plazmonických efektů;
- vlastnosti nanostrukturních aluminidů na bázi Ni a Ti připravených metodou mechanického legování;
- vlastnosti implantátů ze slitin na bázi Ti připravených metodami aditivních technologií;
- vliv povrchové úpravy biokompatibilní slitiny na vlastnosti a funkčnost implantátu
- nanostrukturované Ti-6Al-4V povrchy s antimikrobiální účinností;
- příprava a charakterizace bioaktivní antibakteriální křemičité vrstvy na Ti substrátu;
- vliv tepelného zpracování na mechanické a korozní vlastnosti TiNi pro biolékařské aplikace
- vlastnosti implantátů ze slitin na bázi Ti připravených metodami aditivních technologií
- vývoj aplikací kovových a polovodičových nanostruktur pro biodetekci;
- vývoj citlivých a spolehlivých analytických metod pro detekci nanočástic v životním prostředí;

3.2.4. Lehké multifunkční materiály a kompozity

Národní RIS3 strategie stanovuje další záměr posilovat a rozvíjet mimo jiné výrobu dopravních prostředků a zařízení, strojírenství, elektroniku a elektrotechniku. To jsou obory, které kladou nejvyšší nároky a určují špičkové požadované parametry na dodávané komponenty a materiály. Konstruktéři, tlačení požadavky na nižší hmotnost a lepší parametry svých konstrukcí, stále více neváhají využít ve svých návrzích materiály, které byly dříve vyhrazeny pouze pro nejnáročnější high-tech aplikace. Vysoce výkonné zpracování multifunkčních materiálů, lehkých slitin, titanu a kompozitních materiálů, často unikátní vlastnosti požadovaných materiálů, vysoké nároky na jakosti a integritu povrchů, recyklovatelnost, ale také nákladovost jsou hlavními žádanými parametry pro další vývoj.
Nejnáročnější obory komponentů z hlediska zákazníků jsou především kosmický průmysl, energetická technika, výroba automobilů a letadel, těžká transportní technika, přístrojová technika a obranný průmysl. Další zásadní oblastí je vývoj a výzkum materiálů se zvýšeným vnitřním tlumením. Vibrace jsou jednou z největších překážek ve strojírenství a řešení pomocí zvyšování tuhosti vede ke zvyšování hmotnosti. Řízené zvyšování tlumení konstrukcí pomocí nových materiálů nebo přídavných materiálů posílí řadu zásadních inovací v oborech strojírenství. Pro sektor strojírenství, výrobu dopravních prostředků a elektroniky jsou zásadní pokroky v nanotechnologiích zaměřených na funkční povrchové vrstvy. Zásadním úkolem je řešení průmyslové zpracovatelnosti, aplikace na složité a rozměrné povrchy, zajištění procesní spolehlivosti a především trvanlivosti vlastností. Neméně důležitou jsou dále nanotechnologie zaměřené na snižování pasivních odporů a vyztužování materiálů nebo modifikaci jejich vnitřních strukturálních vlastností. Kompozitní materiály mají díky těmto vlastnostem velký potenciál pro redukce hmotnosti vozidla.
Kompozitní nanomateriály mají velmi široké použití - ukládání informací, magnetické chlazení, ferofluidy, zobrazovací metody v medicíně, různé senzory, elektromechanické a magnetomechanické měniče, antiseptická vlákna, namáhané součásti letadel a vrtulníků a další. Velký zájem je o "inteligentní materiály" - např. materiály, které budou sledovat a hlásit své vlastní „zdraví“. To vyžaduje vývoj mnoha nových senzorů, z nichž některé musí být nedílnou součástí materiálu.
Většina stávajících kompozitních materiálů je založena na termosetových pryskyřicích, které již nelze recyklovat. Vývoj nových kompozitních materiálů na bázi termoplastických pryskyřic

je nadějnější kvůli jejich snadnější recyklaci. Vedle různých vláken, keramiky a skla se zkouší využití levnějších přírodních materiálů jako například jíly nebo nanoceluloza. V praxi se v současné době nejvíc používá jako levná nano plniva montmorillonit (je dostupný, levný a lze ho používat ve spojení s PE, LDPE, HDPE, PP, nylonem, polyvinyliden chloridem).
Další příležitosti vývoje tohoto oboru jsou spatřovány ve vývoji následujících materiálů:

- Multifunkční materiály s vestavěným snímáním / ovládáním (např. standardní řídicí panel s tištěnou elektronikou)
- Materiály se schopností se samy opravit (např. nárazníky vyhovující požadavkům na recyklaci, ochraně proti UV záření nebo povrchová úprava proti poškrábání)
- Materiály s přizpůsobenými vlastnostmi tepelné nebo elektrické vodivosti (např. pro vnější povrch letadel, pro ochranu proti osvětlení, tepelná vrstva, termoelektrické materiály pro termoelektrické generátory)
- Lehké materiály pro motory (např. keramické pěny)
- Multifunkční materiály s integrovanou elektronikou (např. LED diody a Quantum Dot pro palubní desku automobilu)
- Materiály na bázi bio pro sendvičové panely (například pěny a vlákna na bázi nano celulózy)
- Nano kompozitní povlaky poskytující snížení tření nebo opotřebení pro energetický sektor (např. pístní kroužky a vložky do válců)
- Masově vyráběné nanokompozity pro rekuperaci tepla (např. pro výfukové systémy)
- Nanokompozity se zvýšenými vlastnostmi pro chemickou konverzi energie
- Materiály s nano strukturovanými povrchy (například pro snížení tření získané nanotiskem a nebo nano nanášecími technikami)
- Lehké baterie včetně jejich obalů (např. pro elektrická vozidla nebo vozidla s vysokými požadavky na skladování elektrické energie)
- Materiály s antikorozními vlastnostmi (např. nádrže pro přepravu močoviny nebo pohonných hmot)
- Požárně odolné materiály (například krycí materiál, jako je kůže a textilie, pro interiéry**)**

Je žádoucí provádět kontinuálně výzkumnou a vývojovou činnost vedoucí k novým sofistikovaným výrobkům v reakci na požadavky odběratelských odvětví, a to za účelem plnění neustále přísnějších kritérií na kvalitu, reagování na poptávky nových výrobků, inovativnosti a módnosti nabídky, například lehčího materiálu se stejnými mechanickými vlastnostmi jako u materiálu původního. Tento postup napomůže konkurovat ČR světovým firmám v oblasti kvality produktů.

Prioritní výzkumná témata

- výzkum užitných vlastností a aplikačních možností lehkých polymerních kompozitů pro stavbu karoserií;
- výzkum vlivu úpravy povrchu na zvýšení životnosti a provozní spolehlivosti exponovaných komponent vodních turbín;
- výzkum a vývoj nanokompozitních materiálů;
- vývoj multifunkčních kompozitů;
- vývoj ekonomicky schůdné metody výroby zpěněných kovů;
- studium možností přípravy kompozitních materiálů pomocí metod plastické deformace;
- výroba kompozitů s obsahem nanocelulózy a jejich aplikace;
- výzkum technologií přípravy mikro- a nanočástic a jejich aplikace v tenké vrstvě na povrch substrátů;

- výroba nanokompozitů na bázi textilií s aplikací vrstev s obsahem nanočástic se zaměřením na zvýšení vodivosti a mechanických parametrů materiálu;
- komplexní řešení problematiky distribuce částic v nátěrovém materiálu ve formě pasty, pěny nebo roztoku;
- vývoj hybridních kompozitních fotokatalyzátorů;
- příprava nových kompozitních materiálů na bázi grafenoxidu a podvojných vrstevnatých hydroxidů jako sorbentů těžkých kovů z vodných roztoků;
- výzkum podmínek přípravy nových, netradičních typů nanokompozitních materiálů na bázi montmorillonitických jílů a dalších typů anorganických nanočástic;

3.3. Ekologie, zelené průmyslové procesy

(Boj proti změně klimatu, ochrana životního prostředí, účinné využívání zdrojů a surovin)

Změna klimatu je v současnosti jedním z nejzávažnějších a nejvíce diskutovaných globálních ekologických problémů. Negativní dopady změny klimatu významně ovlivňují také socio-ekonomickou sféru, která se do značné míry podílí na příčině změny klimatu - zesilování skleníkového efektu atmosféry nadměrným zvyšováním antropogenních emisí skleníkových plynů. Základními antropogenními skleníkovými plyny jsou oxid uhličitý (CO_2), metan (CH_4), oxid dusný (N_2O), fluorované uhlovodíky (HFC, PFC), fluorid sírový (SF_6) a fluorid dusitý (NF_3). Významně přispívá ke skleníkovému efektů také vodní pára, jejíž obsah v atmosféře se s rostoucí teplotou exponenciálně zvyšuje. Každý ze skleníkových plynů má na základě tzv. potenciálu globálního ohřevu jinou schopnost klima ovlivňovat, a pro možnosti srovnání se tedy obsah skleníkových plynů uvádí v hodnotě CO_2 ekvivalentní (CO_2ekv.).
Chemické a inženýrské vědy a chemické technologie významně přispívají k udržitelnému rozvoji celé řady průmyslových oborů, v energetice, stavebnictví, dopravě, hutnictví, zdravotnictví a zemědělství. Chemický průmysl dodává nové materiály, katalyzátory a technologie, postupně připravuje realizaci strategie nízkouhlíkové ekonomiky založené na obnovitelných zdrojích energií a využití CO_2 jako základního zdroje uhlíku. Důležitý je i vývoj inovativních postupů a technologií využití biomasy pro energetické účely (výroba pohonných hmot, tepelné energie) a jako suroviny pro zpracovatelský průmysl.
Nejsou to jen fosilní paliva, jejichž zásoby na zemi jsou omezené. V zemské kůře se v omezené míře nachází řada surovin, které jsou již dnes považovány za kriticky nedostatkové. Obsahují prvky, které jsou potřebné pro ekonomiku a zajišťují životní standard 21. století. Jsou to vzácné zeminy, prvky skupiny platiny, dále pak bór, niob, indium, germanium, galium, beryllium či grafit. Z hlediska produkce kvalitních materiálů je postupné vyčerpávání ložisek chromu, antimonu, manganu, wolframu a kobaltu také docela vážné. Avšak pro udržitelný život jsou nesmírně závažné tenčící se zásoby fluoru, hořčíku a především fosforu. Úplná recyklace všech biogenních prvků (nejen koloběh uhlíku a vody, ale i fosforu, dusíku, síry, hořčíku, železa, vápníku, sodíku, draslíku) nezbytných pro reprodukci života a recyklace všech prvků těžených z přírodních zdrojů jsou nezbytné nejenom kvůli zabezpečení čistoty životního prostředí, ale i pro zabezpečení udržitelnosti v podmínkách měnícího se klimatu.
Pod pojmem trvale udržitelný rozvoj se rozumí „takový rozvoj, při němž každá současná generace bude uspokojovat své potřeby, aniž by při tom ohrozila schopnost budoucích generací uspokojovat jejich potřeby“.
Dlouhodobý cíl politiky ochrany klimatu EU je obsažen v „Plánu přechodu na konkurenceschopné nízkouhlíkové hospodářství do roku 2050“, který předpokládá snížení celkových emisí skleníkových plynů EU o 80- 95 % do roku 2050 v porovnání s rokem 1990.

V lednu 2017 byl vládou ČR schválen Národní akční plán adaptace na změnu klimatu, který mimo jiné stanovuje úkol do roku 2020 snížit roční emise CO_2 o cca 91 kt, NO_X o cca 40 kt a tuhých znečišťujících látek o cca 3 kt (tj. cca 2,5 kt PM).

Problémy a příležitosti

a) Ochrana ovzduší

Díky postupnému zavádění nízko emisních technologií, restrukturalizaci průmyslu a dalšími opatřeními se v posledních letech podařilo snížit emise oxidu siřičitého, které poklesly o téměř 30 % (nejvíce v sektoru „veřejná energetika a výroba tepla“), emise NM-VOC poklesly o téměř 28 %,(nejvíce v sektoru „silniční doprava"), emise oxidů dusíku poklesly o 29 %,(nejvíce sektory „veřejná energetika a výroba tepla“ a „silniční doprava“). Emise amoniaku poklesly o 21 % (vlivem poklesu v sektoru „chov prasat“). Aktuálně nejnovější publikovaná emisní bilance dokumentuje, že ČR se podařilo mezi roky 1990 až 2014 snížit emise skleníkových plynů o více než 36,7 %. Nařízení Evropského parlamentu a Rady (EU) č. 517/2014, o fluorovaných skleníkových plynech, má za cíl snížení emisí těchto plynů a omezení jejich výroby o 80 % do roku 2030.

Snižování zátěže a tudíž vyššího stupně ochrany životního prostředí je dosahováno i uplatněním tzv. nejlepších dostupných technik (BAT), které představují technologie nejvíce šetrné k životnímu prostředí a které jsou aplikovatelné za standardních technických a ekonomických podmínek. Část průmyslových emisí pochází z průmyslových procesů, které jsou dány podstatou výrobních procesů a závisí pouze na objemu výroby. Druhá část přímých průmyslových emisí pochází ze závodní energetiky, tj. výroby elektřiny a technologické páry využívaných ve výrobních procesech. Hlavním producentem emisí z průmyslových procesů zůstává i nadále energetika, hutnictví a výroba cementu a vápna. Existuje významný prostor pro snižování spotřeby tepla a elektřiny ve výrobních technologiích například pomocí rekuperace tepla, zavedením kombinované výroby elektřiny, tepla a chladu, řízení otáček průmyslových motorů, modernizací elektromechanických zařízení apod.

Nejvyšší míru zdravotního rizika představují expozice suspendovanými částicemi s polycyklickými aromatickými uhlovodíky vyjádřenými jako benzo(a)pyren (BaP), těžkými kovy (např. Hg,Pb a troposférickým ozónem**.** Mezinárodní agentura pro výzkum rakoviny IARC zařadila z hlediska klasifikace karcinogenity suspendované částice mezi prokázané lidské karcinogeny.

ČR je coby člen OSN a EU vázána řadou mezinárodních úmluv a nařízení, z nich pak vyplývají cíle pro další období:

- snížit emise ČR do roku 2020 alespoň o 32 Mt CO_2ekv. v porovnání s rokem 2005 (v roce 2005 byly emise 146 Mt CO_2ekv.);
- snížit emise ČR do roku 2030 alespoň o 44 Mt CO2ekv. v porovnání s rokem 2005.

Dlouhodobé indikativní cíle Politiky ochrany klimatu v ČR:

- směřovat k indikativní úrovni 70 Mt CO_2ekv. vypouštěných emisí v roce 2040;
- směřovat k indikativní úrovni 39 Mt CO_2ekv. vypouštěných emisí v roce 2050.

V lednu 2017 byl schválen Národní akční plán adaptace na změnu klimatu. I přes více jak třetinový pokles emisí skleníkových plynů od roku 1990 ČR nadále patří mezi státy s nejvyšší produkcí skleníkových plynů na obyvatele.

- snížit emise NH3 o 10 % aplikací opatření v sektoru zemědělství
- snížení expozice PM k roku 2020 na hodnotu 18 $\mu g.m^{-3}$.(Průměr v letech 2009 – 2011 26,6).

Mezi nejčastější čistící procesy ovzduší patří odstraňování pevných a kapalných částic filtrací a elektrostatickými odlučovači. Nežádoucí plynné složky jsou odstraňovány chemickými

procesy, např. odsiřováním, katalytickými procesy a nanotechnologiemi. Zásadní zlepšení je očekáváno zejména změnou struktury palivové základny.

b) Ochrana zdrojů vody

Jakost povrchových vod se v posledních 25 letech velmi podstatně zlepšila především v důsledku omezení bodových zdrojů znečištění vod, zejména uzavřením celé řady výrobních podniků, rekonstrukcí a modernizací technologických postupů v průmyslu a výstavbou, rekonstrukcí a modernizací kanalizací a čistíren odpadních vod. Daří se výrazně kontrolovat omezení bodových zdrojů znečištění, avšak nesrovnatelně obtížnější je snížit zátěž z plošného znečištění – ze zemědělského hospodaření, atmosférické depozice a erozních splachů z terénu. Klimatické změny se však negativně promítají do klesající vydatnosti podzemních zdrojů vody, velký vláhový deficit je hlavně na jižní Moravě. Zásadní otázkou udržitelnosti je hospodaření s vodou. Tato vážná situace vyžaduje řadu opatření od nastavení lepšího hospodaření s pitnou a dešťovou vodou až po opatření v průmyslu. ČR je jedna z mála zemí, ve které se používá pitná voda i v kuchyních, koupelnách, na toaletách, ale i k zalévání zahrad či napouštění bazénů. Jednou z variant, jak ušetřit, je recyklace šedých vod, tedy vod, které se v domácnosti využijí, ale neobsahují fekálie a moč, tedy vody ze sprch, myček, umyvadel. Takto vyčištěnou vodu, vodu bílou, je možné následně použít například ke splachování toalet, k úklidu nebo zalévání zahrad. K recyklaci je nutné do domu instalovat čistírnu šedých vod. Čistírny šedých vod využívají k čištění jednak aerobní biologické procesy, jednak membránovou ultrafiltraci a někdy také UV dezinfekci na výstupu. Výzkumníci pracují i na katalyzátorech pro pračky nebo pro čištění vod z domácností. Voda je tak po vyčištění zbavena virů a bakterií, hygienicky je zcela nezávadná a vedle dešťové vody je ideálním alternativním zdrojem místo vody pitné.

V průmyslu se jedná o důslednou recyklaci odpadních vod a optimalizaci chladících vod. 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. 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 čisticích operací přímo do výrobních jednotek. Typické koncentrované průmyslové odpadní vody z výrob 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. Nečistoty lze odstranit specifickými postupy v rámci vlastní výrobní jednotky. Tyto čisticí procesy jsou součástí regenerace či předčištění procesních vod, popř. izolace a dalšího zpracování anorganických chemikálií obsažených v procesních vodách. 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.

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 (CHSK< 15 g/l) a dále nemožnost zpracovávat látky toxické, baktericidní nebo pěnotvorné.

Další skupinou jsou metody mokré katalytické oxidace, probíhající za atmosférického tlaku a teploty okolí. Nejznámější z nich je ozonizace. Ta však vyžaduje řádově nižší koncentrace oxidovatelných látek proti biologickému čistění. Používá se vzduch nebo kyslík obohacený cca o 10 % ozónu, výhodou je třináctinásobně větší rozpustnost ozónu ve vodě proti kyslíku. Další

metodou je fotooxidace, tedy působení ultrafialového záření na peroxid vodíku nebo na polovodičový katalyzátor TiO_2,kdy se uvolňují hydroxylové radikály se silně oxidačním účinkem. Oxidaci organických nečistot za vzniku oligomerů a jejich následnou koagulaci podporuje systém enzymu peroxidasa a peroxid vodíku.
Zvláštní místo v tomto výčtu zaujímá tzv. mokrá katalytická oxidace nečistot ve vodách vzduchem nebo kyslíkem za zvýšeného tlaku a teploty. Tento proces se nabízí jako nejvhodnější vzhledem k možným vysokým koncentracím (CHSK ~ 20 – 200 /l) nečistot v průmyslových vodách a velké kapacitě zpracování.
Fotokatalytické nebo jinými slovy fotochemické degradační procesy nabývají stále většího významu, neboť jejich výsledkem je dokonalá mineralizace odstraňovaného materiálu za mírných tlakových a teplotních podmínek. Tyto reakce jsou charakterizovány radikálovým mechanismem, tj. účinkem volných radikálů zahájeným interakcí fotonů o příslušné energii s molekulami chemických látek přítomných v roztoku. Mohou probíhat za spolupůsobení katalyzátoru nebo i bez něho. Radikály mohou být generovány použitím UV-záření, homogenní fotochemickou degradací oxidačních činidel jako např. H_2O_2 nebo O_3. Alternativní cestou získávání volných radikálů je fotokatalytický mechanismus probíhající na povrchu polovodičů. Hlavní výhodou fotokatalytických procesů je možnost efektivního využití slunečního světla nebo blízkého UV-záření, což vede ke snížení nákladů.
Samostatnou aktuální kapitolou je čištění vod znečištěných biologicky obtížně odbouratelnými persistentními organickými látkami, pesticidy a jejich metabolity, zbytky farmaceutických výrobků apod.
Při čištění odpadních a splaškových vod pomocí mechanicko-biologických technologií nevyhnutelně vzniká čistírenský kal. Membránové separační procesy představují novou a ekonomicky výhodnou metodu, která doplňuje dosavadní klasické separační procesy. Je zde využito vlastností membrán, které jsou definovány jako fyzikální bariéra, kterou některé látky (např. voda, nízkomolekulární látky) procházejí, jiné látky (makromolekulární sloučeniny, koloidní částice) jsou zadržovány a membránou neprocházejí. Podle hnací síly procesu rozeznáváme membránové separace: tlakové (mikrofiltrace, nanofiltrace, reverzní osmóza), difuzní (dialýza) a elektrodifúzní (elektrodialýza).
Kaly produkované komunálními čistírnami odpadních vod obvykle obsahují významné množství těžkých kovů a problematických organických látek (perzistentní organické polutanty, zbytky detergentů, antibiotika, farmaceutika, syntetické steroidy, endokrinní disruptory apod.), které komplikují jejich přímou aplikaci do zemědělské či lesnické půdy a jejich recyklaci prostřednictvím kompostování. Alternativním způsobem využití je středně-teplotní pomalá pyrolýza zaměřená na produkci biocharu (pevného porézního uhlíkatého materiálu obsahujícího nutriční prvky).
Vyvíjejí se nanočástice pro bariéry k čištění průmyslových znečišťujících látek v podzemních vodách chemickými reakcemi, které odstraňují znečisťující látky. Tento proces je ekonomičtější než metody, které vyžadují čerpání vody ze země na úpravu na povrchové čistírně.
Nanotechnologie by pomohla uspokojit potřebu cenově dostupné čisté pitné vody prostřednictvím rychlého a nízkého nákladu zjišťování a úpravy nečistot ve vodě.

c) Skládkování odpadů

Společnost produkuje stále více odpadů ať již z průmyslové činnosti, tak z domácností. V souladu s principy udržitelnosti jsou legislativně determinovány podmínky pro odpadové hospodářství. Základní filosofií je prevence vzniku odpadů, jejich důsledné třídění, jejich recyklace a postupné omezení jejich skládkování.
V ČR se jedná především zákaz skládkování směsných komunálních odpadů, recyklovatelných a využitelných odpadů od roku 2024, omezení využívání odpadů jako technického zabezpečení

skládek na 20 % hmotnostních. Do roku 2020 zvýšit nejméně na 50 % hmotnosti celkovou úroveň přípravy k opětovnému použití a recyklaci alespoň u odpadů z materiálů jako je papír, plast, kov, sklo, pocházejících z domácností, a případně odpady jiného původu, pokud jsou tyto toky odpadů podobné odpadům z domácností. Snížit maximální množství biologicky rozložitelných komunálních odpadů ukládaných na skládky tak, aby podíl této složky činil v roce 2020 nejvíce 35 % hmotnostních z celkového množství biologicky rozložitelných komunálních odpadů vyprodukovaných v roce 1995. Zvýšit celkovou recyklaci obalů na úroveň 70 % do roku 2020. Zvýšit recyklaci kovových obalů na úroveň 55 % do roku 2020. To si vyžádá budování dalších spaloven odpadů s energetickým využitím odpadů, včetně technologií, které čistí zplodiny, aby se do ovzduší dostávalo jen minimum emisí. Spalování je běžným způsobem odstranění odpadů, touto metodou se likvidují i odpady, které nelze odstranit jiným způsobem (př. vybrané zdravotnické odpady, některé chemické látky).
Samostatnou problematikou je vybudování uložiště radioaktivních odpadů, což není jen předmětem zájmu jaderné energetiky.

d) Recyklace biogenních prvků

Procesy v živé přírodě neustále vracejí látky do koloběhu – recyklují. Základem recyklace je třídění odpadů nejlépe už u jeho původce.
V současné době existuje značné množství technologií na odstranění fosforu, z nichž některé jsou aplikované ve velkém průmyslovém měřítku a některé existují pouze na teoretické bázi nebo v laboratorním měřítku. Ve všech případech je ovšem fosfor převáděn do nerozpustné pevné fáze. Tato frakce může být nerozpustná anorganická sůl, biomasa aktivovaného kalu nebo biomasa umělých mokřadů. Nerozpuštěné fosforečnany jsou poté skládkovány, spalovány nebo použity jako hnojivo, jsou-li ze směsi odstraněny patogeny a toxické sloučeniny. Fosfor lze znovu získat z živočišného i městského odpadu. Hospodářský odpad, včetně kostí zvířat a nepoživatelných rostlin, lze po biologickém či přírodním kompostování recyklovat do hlavního zdroje hnojiv. Vracení městského odpadu bohatého na fosfor do půdy namísto jeho vyvážení na skládky je také dobrou metodou recyklace. Snižování eroze půd prostřednictvím zemědělství také pomáhá udržet současnou hladinu fosforu v půdě. Nejstarším a zatím nejrozšířenějším způsobem srážení fosforu na čistírnách odpadních vod je simultánní srážení dávkováním sráželedel (soli Al a Fe) přímo do aktivačních nádrží biologického stupně nebo do libovolného místa technologické linky ve více bodech.
Další recyklace se týkají některých kovů. Na příklad výroba hořčíku z Mg šrotu spotřebovává pouze 5% energie, která se používá k výrobě primárního hořčíku. Je možné odstranit oxidy a nečistoty během recyklačního procesu. Ale ne prvky jako měď a nikl (ty mají velký vliv na odolnost proti korozi). Šrot se často prodává a používá v jiných produktech, jako je ocel (legování) nebo anody. Při recyklaci hliníku se ušetří až 95% energie ve srovnání s výrobou bauxitu. Řada společností již dnes recykluje kovové odpady s cílem získat využitelný nikl a kobalt.
Smyslem recyklace spotřebního zboží je extrakce strategických prvků ze zastaralých nebo nepoužitelných spotřebních výrobků, včetně spotřební elektroniky, televizi, počítačů, fotoaparátů a mobilních telefonů, ale také z baterií, solárních článků, permanentních magnetů a dalších materiálů.
Mnoho běžných produktů obsahuje ekonomicky recyklovatelné koncentrace strategických prvků: fluorescenční světla, pevné disky, autobaterie, katalyzátory a solární panely jsou příkladem produktů, které mohou být recyklovány. 10 procent fluorescenčních žárovek se skládá z prvků vzácných zemin (dále REE) jako je europium, terbium, lanthan, cerium a yttrium.
Druh extrakce a účinnost každé metody závisí na tom, který prvek se recykluje. Platina a prvky platinové skupiny mohou být získány s relativně vysokou účinností z katalyzátorů hybridních

automobilových motorů a v menším rozsahu z chemických katalyzátorů a skla. V příštím desetiletí by mohlo být recyklováno až 99,8 % platiny z katalyzátorů vzhledem k snadnému odstranění uhlíkatých usazenin.
V současné době je získávání a recyklace mnoha strategických prvků technickým a energeticky náročným procesem. Ačkoli malé spotřební elektronické přístroje jsou jednou z největších aplikací prvků vzácných zemin, jako je neodym a dysprosium, je obtížné získat tyto prvky ekonomicky životaschopným způsobem, protože kovy jsou přítomné pouze v stopových koncentracích (méně než 1 %). Strategické prvky se navíc často používají ve formě slitin, což ztěžuje získávání prvků zájmu ve své čisté podobě. Za účelem překonání těchto otázek je prvním krokem evropského plánu Mision 2016 rozsáhlý výzkum a vývoj recyklovatelných produktů a recyklačních technik.
REE jako je yttrium, neodym, niob, dysprosium a samarium, jsou nutné pro silné magnety. Tyto malé, ale extrémně silné magnety se vyžadují u běžných spotřebičů včetně ledniček, mobilních telefonů a motorů všech typů. Slitiny akumulátorů obsahují zbytek řady lanthanidu a aktinidu, nejdůležitější je lanthan, cerium a yttrium a mnoho z těchto kovů může být získáno ze strusky poté, co byly ošetřeny elektrodami nikl-metal-hydrid (Ni-MH).
Nové technologie zjednodušují proces recyklace kritických materiálů z elektronického odpadu pomocí kombinace membrán z dutých vláken, organických rozpouštědel a neutrálních extraktantů k selektivní recyklaci prvků vzácných zemin, jako je neodym, dysprosium a praseodymium. Tyto prvky mají klíčovou funkci v permanentních magnetech používaných v automobilech, mobilních telefonech, pevných discích, počítačích a elektromotorech. Výzkum již zlepšil stávající techniky recyklace; Bioleaching se používá k extrakci drahých kovů z magnetů vzácných zemin. Nedávné vylepšení bio loužících metod používajících mikroskopické organismy vedlo v průběhu recyklačního procesu k vyšší míře jejích zotavení a adsorpci kovových iontů. Tato nová metoda separace je účinnější, protože může rychleji oddělovat kovy, čímž se rozšiřuje spodní hranice v koncentraci, ze které je ekonomické získání. Ne všechny technologie jsou dostatečně běžné nebo obsahují dostatek dostupného materiálu, aby byly životaschopnými zdroji cílových prvků.
Dalším možným zdrojem cenných materiálů jsou baterie, kterých je celá řada s velmi rozdílným chemickým složením. Zejména se jedná o autobaterie nikl-metalhydridové (Ni-MH), z nichž lze obnovit lanthan a cerium. Současné technologie nabízejí několik možností recyklace baterií. Nejedná se ale o recyklaci v plném slova smyslu. Jde vlastně o zpětné materiálové využití některých materiálových složek, které baterie obsahují. Recyklace použitých baterií může probíhat v elektrických obloukových pecích, které se používá pro baterie s nízkým obsahem rtuti; železo a mangan se přemění na železo-manganovou slitinu pro ocelářský průmysl. Zinek se znovu získává po sublimaci ve formě oxidu a dále se zpracovává. Používají se rovněž oxido-redukční pece, sublimační pece (pro baterie s vysokým obsahem rtuti a nikl-kadmiové baterie), pyrolýza pro nikl-kovové a lithiové baterie nebo se baterie přidávají do vysokých pecí. Další metodou je drcení. Po oddělení kovů, papíru a plastů vznikne tzv. "černá hmota", která obsahuje uhlík, mangan a oxidy zinku. Ta se používá pro další zpracování kyselinovou cestou (loužením) podobným postupem, jaký se používá pro zpracování manganových nebo zinkových rud.
Aktuální je i otázka likvidace lithiových baterií. Lithiové baterie se rozebírají ve speciálně uzpůsobeném prostředí, aby se zabránilo výbuchu. Obsahují velmi nebezpečné elektrolyty, které vyžadují specifické zacházení. Pro firmu Tesla Motors bude recyklovat použité lithium-iontové baterie belgická společnost Umicore na slitiny, ze kterých posléze vyrobí kobalt, nikl nebo jiné kovy. Kobalt lze pak přeměnit na oxid kobaltu, který se bude moci zpět prodat výrobcům baterií. Jedním z vedlejších produktů recyklace bude kal obsahující oxidy vápníku a lithia. Ten se zase využije k výrobě speciálního betonu.
V tuzemsku se zpracovávají jen autobaterie s obsahem olova. Dále pak tzv. knoflíkové baterie v Kovohutích Příbram. V ČR sice baterie třídíme, roztříděné baterie se pak odvážejí ke

zpracování většinou mimo území ČR. Důvodem je to, že k ekonomicky smysluplné recyklaci je zapotřebí velké množství vstupního materiálu.
Katalyzátory jsou dalšími dobrými zdroji strategických materiálů, jako jsou kovy platinové skupiny. REE tvoří 2 % katalyzátorů, což znamená, že představují 12 000 tun recyklovatelných REE.
Použité katalyzátory jsou dobrými potenciálními zdroji pro strategické materiály, protože existuje velmi vysoká míra sběru (téměř 100 procent). Katalyzátory jsou již recyklovány pro obnovu prvků skupiny platiny. V budoucnu by recyklační zařízení měly regenerovat také vzácné zeminy z katalyzátorů.
Magnetický šrot by také mohl být efektivně recyklován pro strategické prvky. Existuje několik možných způsobů obnovy těchto kovů. Je ekonomicky možné použít selektivní extrakční činidla pro selektivní obnovu prvků vyšší hodnoty. Například Dy_2O_3 se může získat tímto způsobem v rozsahu 99% a výtěžnost regenerace Nd_2O_3 je více než 82 % při použití srážení podvojné soli Na_2SO_4 a sekundárního srážení oxalátu. Jiné možné metody zahrnují elektrolytickou redukci pomocí extrakce P_5O_7 s velmi slibnými výsledky testů.
Jaderné palivo může být také znovu zpracováno pro získání uranu, plutonia a dalších štěpných materiálů. Asi 96 % jaderného paliva je uran, z toho asi 0,5 % je použitelný U^{235} a 0,8 % je plutonium; Zbytek je jaderný odpad. Oba mohou být recyklovány jako čerstvé palivo, což ušetří až 30 % přírodního uranu. Přestože většina separovaného uranu v současné době zůstává v úložišti místo toho, aby byla používána v rozsáhlých programech recyklace, existují závody ve Velké Británii a Rusku, které se zavázaly k recyklaci těchto vysoce hodnotných odpadů.
Potravinový systém má velký vliv na životní prostředí emisemi skleníkových plynů, využíváním vody a půdy a užíváním chemických hnojiv a pesticidů. Evropská komise odhaduje, že jen v EU se každoročně vyplýtvá 90 milionů tun potravin, což je asi 173 kg na osobu. Cílem Evropské komise je snížení potravinového odpadu do roku 2020 o 50%. K tomuto cíli může přispět využití procesu anaerobního rozkladu potravin, které jsou shromažďovány z domácností, supermarketů, restaurací a od výrobců. Vedle získané zelené energie odpadá z procesu kapalina bohatá na dusík, draslík, fosfát a další stopové prvky, které mohou být skladovány na místě až do doby vrácení do půdy jako na živiny bohaté bio hnojivo.

Hlavní úkoly chemického průmyslu
Chemický sektor jako průmysl, který přidává hodnotu surovinám, může přispět k rozvoji udržitelné oběhové ekonomiky tím, že bude co nejlépe využívat suroviny ve svých vlastních procesech a ve spolupráci s dalšími průmyslovými subjekty. Vývoj technologií by měl probíhat v následujících oblastech:

a) Využití alternativní suroviny - cílem je integrovat udržitelnější alternativní zdroje surovin. Například druhotné suroviny, lignocelulózovou biomasu, odpad nebo CO_2 z průmyslových spalin by mohly být použity jako alternativní uhlíkové zdroje pro výrobu udržitelnějších materiálů, chemikálií a pohonných hmot.

b) Návrh materiálů umožňujících ekologický návrh "výrobků" – vyvíjené nové chemické látky a materiály by měly umožnit řešení velmi náročných požadavků spotřebitelů na výkon v následných aplikacích včetně lepší recyklace.

c) Zlepšená účinnost výrobních procesů - cílem je maximalizovat využití všech zdrojů, které vstupují do systému, včetně primárních a sekundární suroviny, vody a energii prostřednictvím:

- zlepšení reakce a procesu výroby (např. zlepšené katalyzátory včetně biokatalyzátory, zintenzivnění procesů, IT a modelování)
- uzavírat recyklaci zdrojů na výrobních místech

- zvýšená účinnost zdrojů a energie mezi různými výrobními místy / sektory prostřednictvím průmyslové symbiózy

Průmyslová symbióza umožňuje tradičně odděleným odvětvím podporovat nové kolektivní přístupy zahrnující fyzickou výměnu vody, energií, materiálů, vedlejších produktů nebo odpadů, který se stávají vstupy v jiných procesech a neztrácejí je tak jako odpad.
To vyžaduje vývoj a nasazení technologií pro průmyslovou symbiózu, jsou obvykle spojeny se separací nebo technikami čištění; mohou také souviset s přenosem proudů obsahujících energii a mohou zahrnovat výměníky tepla, tepelná čerpadla, termoelektrické zařízení a membrány pro separaci.
V budoucnu bude i nadále růst význam propojování jednotlivých složek životního prostředí, včetně jejich vzájemných interakcí, stejně jako potřeba vyrovnávat se s dopady klimatických změn.

Potřeby v oblasti výzkumu a očekávané výstupy

Potřeby výzkumu, vývoje a inovací katalyzátorů pro čištění ovzduší, výfukových plynů a vod jsou komentovány v kap. 5.2.4.
Inženýrský VaV stojí před základním úkolem udržitelnosti a realizace nízkouhlíkového hospodářství. Jedná se vyřešení efektivní metody jímání CO_2 z různých zdrojů, jeho dopravu a skladování, tzv. CCS (carbon capture and storage). V zásadě se může jednat o následující technologie:

a.) Spalování paliva se vzduchem a následná separace CO_2 ze spalin („post combustion capture“). Technologické zařízení CCS zachycuje CO_2 po spálení paliva v systému zpracování spalin. Jedná se o „první generaci“ technologie CCS. Nevýhodou tohoto technického řešení je, že CO_2 má ve spalinách poměrně nízkou koncentraci (cca 15 %) a zařízení musí zpracovávat velké množství spalin, včetně oxidů dusíku (NOx).

b.) Spalování paliva s čistým kyslíkem a následná separace CO_2 ze spalin („Oxy-Fuel“) Jedná se o „druhou generaci“ technologie CCS. Tímto způsobem vzniká menší množství zpracovávaného plynu a odpadá potřeba zpracování oxidů dusíku. Zvýšená výsledná koncentrace CO_2 ve spalinách dosahuje až 98 %.

c.) Zplynování paliva před spálením, konverze CO z plynu na CO_2, separace CO_2 a vodíku a následné spalování čistého vodíku („pre combustion capture“ resp. IGCC - Integrated Gasification Combined Cycle). Technologie IGCC jsou v současné době nejpropracovanější technická řešení, která lze využít pro zachycování a separaci CO_2. Tyto technologie byly v minulosti primárně vyvíjeny za účelem zplyňování uhlí v chemickém průmyslu a až následně se začaly modifikovat i pro technologie CCS. Proto je IGCC prakticky neslučitelná s fungováním již vybudovaných fosilních elektráren, lze ji uplatnit pouze u nově budovaných zařízení.

Energetické nároky technologií CCS rozhodně nejsou zanedbatelné. Celkově to znamená výrazné zvýšení vlastní spotřeby elektrárny, vysoké investiční výdaje a další spotřebu energie na technologie přepravy a ukládání CO_2. CO_2 se uskladňuje hluboko pod zemí za vysokého tlaku. Existuje celá řada mechanismů na zajištění oxidu uhličitého pod zemí a záleží hlavně na geologickém podkladu v místě uskladnění. Existují bezpečnostní rizika takových uložišť. Zvýšení tlaku v úložišti může způsobit mikrozemětřesení s rizikem narušení nadložních vrstev a náhlého a nepředvídatelného masového úniku CO_2.
Vědci zkoumají uhlíkové nanotrubičkové "pračky" a membrány, aby oddělily oxid uhličitý od výfukových plynů elektrárny, zachycování CO_2 v aminech nebo procesem karbonové smyčky. Proces využití karbonátové smyčky v sobě zahrnuje dvě chemické reakce současně probíhající v propojených reaktorech s fluidním ložem. V jednom z reaktorů, absorbéru, probíhá sorpce. Zde reaguje pálené vápno (CaO) s oxidem uhličitým obsaženým ve spalinách za vzniku uhličitanu vápenatého ($CaCO_3$). V druhém regeneračním reaktoru dochází za působení vysoké

teploty (vyšší než 700 °C) k rozkladu uhličitanu vápenatého zpět na pálené vápno a oxid uhličitý. Účinnost zachycení CO_2 pomocí karbonátové smyčky přesahuje 90 %.
I v ČR byla studována možnost podzemního ukládáním uhlíkových emisí na Břeclavsku a dále jsou řešeny projekty výzkum vysokoteplotní absorpce CO_2 ze spalin s využitím karbonátové smyčky, studie pilotních technologií CCS pro uhelné zdroje v ČR.
Další velkou skupinou požadavků na výzkum je efektivní recyklace biogenních prvků. Vysoké koncentrace fosforu ve všech typech kejd předurčují tyto odpadní vody k recyklaci fosforu při nalezení ekonomicky zajímavé technologie. Co se týká technologií, tak nejčastěji se provádí vysrážení do formy fosforečnanu vápenatého anebo struvitu, ale lze se setkat i s technologiemi, jež využívají pro flokulaci pevného podílu kejd kationaktivní polymery v kombinaci s chloridem železitým nebo síranem hlinitým nebo transformují kejdy do formy popílku. Z potenciálních technologií recyklace fosforu se jeví nejslibněji recyklace ve formě struvitu $MgNH_4PO_4.6\ H_2O$, protože má excelentní hnojící vlastnosti a je pomalu se rozkládající hnojivo. Po celém světě je již celá řada aplikací, kdy se struvit povětšinou recykluje z kalové vody na čistírnách odpadních vod. Mezi moderní technologie patří bakteriální srážení fosforečnanů, využití hydratovaných oxidů železa jako zbytků z důlní těžby na srážení nebo adsorpci fosforečnanů, aplikace nanotechnologií a další.
V České republice zatím není výraznějším trendem recyklovat fosfor, zatímco v zahraničí je již např. znovuvyužití fosforu z moči jako hnojiva poměrně rozšířeno.
Tenčící se zásoby fosforu v zemské kůře iniciovaly financování mezinárodního projektu „PhosPharm“, řešeného v rámci 7. Rámcového programu EU. Cílem projektu byla izolace fosforu z odpadů zemědělské výroby enzymatickým mineralizačním procesem a jeho přeměna na fosforečnan hořečnato-amonný, který lze v podobě hnojiva recyklovat zpět do půdy.
Recyklací kovového šrotu lze získat cenné suroviny pro výrobu např. hliníku, hořčíku a dalších pro ekonomiku 21. století potřebných materiálů.
Aktuální je otázka recyklace starých fotovoltaických článků. Vzhledem k tomu, že solární panely obvykle mají životnost do 20 let, bude brzo k dispozici mnoho recyklovatelných solárních panelů. Recyklace solárních panelů je v současnosti velmi nákladná a neúčinná. Současné metody zahrnují drcení a separaci kovů, které mohou ušetřit až 90 % skla a 95 % polovodičových kovů, které obsahují kadmium a telur. S nárůstem ceny prvků vzácných zemin a dalším výzkumem by se však mohlo stát ekonomicky životaschopným recyklování prvků REE v solárních panelech. Situace pro recyklaci větrných turbín je podobná situaci solárních panelů. Prvky, které lze takto získat, jsou neodym a dysprosium. Až 350 kg REE lze získat ze 1,5 MW větrné turbíny.
Sleduje se i otázka získání některých vzácných prvků jako ytria z popele ze spalování uhlí.
Neustále se zpřísňující požadavky na ochranu ovzduší, vod a půdy spolu s rozvinutou vědeckou základnou pro nanotechnologie v ČR vytváří prostor pro vývoj nových multifunkčních nanomateriálů pro ochranu životního prostředí a lidského zdraví, včetně dalšího rozvoje aplikací nanosloučenin Fe pro čištění odpadních vod a kontaminovaných území, aplikace železanů alkalických kovů a kovů alkalických zemin pro pokročilé oxidační technologie čištění vody a kontaminovaných půdních prostředí. Žádoucí je i vývoj sorpční nanomateriálů, nanomateriálů na přírodní bázi připravené technologiemi šetrnými k životnímu prostředí, reaktivních sorbentů pro degradaci pesticidů a vysoce toxických látek včetně bojových chemických látek, nanomateriálů pro eliminaci radioaktivní kontaminace, modifikovaných nanovláken, nových antimikrobiálních filtrů, membrán a dalších. Naše vědeckotechnická základna úzce spolupracuje při řešení konkrétních problémů výrobních podniků a při zavádění výrob nových nanomateriálů zejména v menších inovativních organizacích jako jsou například různé aplikace nanovláken.
Pokračuje se v řešení odstraňování těžkých kovů zejména Pb, Hg a Cd v souladu s mezinárodními závazky ČR v této oblasti.

Specifickým úkolem je vývoj membrán oxidů graphenu pro čištění vody a ekologických paliv. Kromě toho jsou tyto membrány na rozdíl od polymerních membrán chemicky více inertní, což znamená, že mají delší životnost. Vysoká selektivita spojená s nízkou cenou a dlouhou provozní životností je důvodem, proč existuje tak velký zájem o pokročilou technologii membránových technologií oxidu grafenu.
Perspektivní je vývoj nano-biologických, nano-magnetických, nano-membránových a další kombinovaných technologií pro čištění nebo aplikace pokročilých elektrochemických systémů na čištění specifických odpadních vod s vysokou koncentrací amoniakálního dusíku.
Nanotechnologie i biotechnologie představují progresivní metody čištění vod využívající souběžných účinků biotických a abiotických redukčních činidel (například nanočástice kovového železa + biosurfaktanty) za účelem čištění podzemních vod kontaminovaných chlorovanými uhlovodíky.
Nanotechnologické senzory jsou nyní schopny detekovat a identifikovat chemické nebo biologické látky ve vzduchu a půdě s mnohem vyšší citlivostí než kdykoli předtím. Vědci zkoumají částice, jako jsou samouspořádané monovrstvy na mezoporézních nosičích, dendriméry a uhlíkové nanotrubice, aby určily, jak aplikovat své jedinečné chemické a fyzikální vlastnosti pro různé druhy sanace toxický zamořených míst.
S novými poznatky a lákavými perspektivami nanotechnologií a nanomateriálů se aktuálně vynořují otázky jejich charakterizace a posuzování jejich bezpečnosti. Lepší poznání vlivu nanomateriálů přispěje k úspěšnější komercionalizaci těchto materiálů.
V ČR působí výzkumná infrastruktura NanoEnviCz (Nanomateriály a nanotechnologie pro ochranu životního prostředí a udržitelnou budoucnost), která integruje infrastrukturní kapacity několika výzkumných organizací ČR v oblasti komplexního interdisciplinárního výzkumu širokého spektra nanomateriálů a nanotechnologií. Centrum NANOBIOWAT spojuje kapacity tří akademických a šesti průmyslových subjektů za účelem vývoje a implementace ekologicky šetrných nanotechnologií a biotechnologií použitelných pro čištění a úpravu širokého spektra vod včetně podzemních, pitných, odpadních a povrchových, s možností odstranění organického, anorganického znečištění těžkými kovy, radioaktivními látkami, endokrinními disruptory, pesticidy či mikrobiálního znečištění.

Prioritní výzkumná témata

- aplikace nanosloučenin Fe pro čištění odpadních vod a kontaminovaných území;
- aplikace železanů alkalických kovů a kovů alkalických zemin pro pokročilé oxidační technologie čištění vody a kontaminovaných půdních prostředí;
- studium toxicity nanočástic ve vztahu k člověku a životnímu prostředí;
- recyklace odpadů;
- aplikace pokročilých elektrochemických systémů na čištění specifických odpadních vod s vysokou koncentrací amoniakálního dusíku;
- studium problematiky rozkladu kyanidů s využitím pokročilých oxidačních metod;
- zpětné získávání TiO_2 z odpadních vod z výroby titanové běloby;
- získávání fosforu ze zemědělských odpadů a odpadních vod;
- návrh a syntéza nových multifunkčních nanomateriálů pro ochranu životního prostředí a lidského zdraví;
- vývoj membrán oxidů graphenu pro čištění vody a ekologických paliv
- vývoj poloprovozního zařízení pro snížení emisí Hg z velkých energetických zařízení;
- pokročilé biotechnologie pro odstraňování endokrinně aktivních a persistentních aromatických polutantů z vody a půdy;
- nano- a bio-modifikované filtry a membrány pro čištění vod;

- nano-biologické, nano-magnetické, nano-membránové a další kombinované technologie čištění;
- optimalizace analytických metod pro stanovení organopolutantů, ekotoxicity a monitorování nanočástic v životním prostředí;
- technologické a biologické postupy ke snížení obsahu fosforu ve vodách a potlačení masového rozvoje sinic;
- výzkum vysokoteplotní absorpce CO_2 ze spalin s využitím karbonátové smyčky;
- redistribuce yttria a vybraných kovů vzácných zemin při spalování uhlí;
- biodegradabilní plasty pro obaly;

Prioritní témata pro podporu výzkumu, vývoje a inovací katalyzátorů pro čištění ovzduší, vod a výfukových plynů jsou komentovány v kap. 5.2.4.

3.3.1. Materiály pro konverzi a skladování energií

Evropská rada schválila cíl snížení emisí skleníkových plynů alespoň o 40 % do roku 2030 ve srovnání s rokem 1990, stanovila cíl výroby alespoň 27 % energie z obnovitelných zdrojů a také orientační cíl úspor energie do roku 2030. Hlavním cílem výzkumu a vývoje realizovaného v ČR a v Evropě v oblasti energetiky je zabezpečení udržitelné, bezpečné, konkurenceschopné a cenově dostupné energie.
Struktura primárních energetických zdrojů v ČR je tvořena z 37,2 % uhlím, 18,3 % zemním plynem, 20,8 % ropou a ropnými produkty, 18,6 % jaderným palivem, 8,7 % obnovitelnými zdroji, 0,7 % ostatními palivy. Struktura konečné spotřeby energie je založena ze 7,7 % na uhlí, 23,8 % na zemním plynu, 29,7 % na ropě a ropných produktech, 18,1 % na elektřině, 10,1 % na teplu a 10,6 % na ostatních palivech. Téměř 50 % primárních energetických zdrojů je využíváno pro výrobu elektřiny (49 % z uhlí, 5 % ze zemního plynu, 34 % z jaderných zdrojů, 5 % z biopaliv, 3 % z hydroelektráren, 1 % z větrné energie, 2 % z fotovoltaiky a 1 % z ostatních zdrojů).
Výše uvedené cíle do roku 2030 představují pro ČR veliké výzvy v oblasti snížení energetické náročnosti a zvýšení odolnosti elektrické rozvodné sítě, efektivní transformace energie a její využití v průmyslu a v dopravě, přenos energie a její skladování, palivové články a vodík, zachycování uhlíku a technologie jeho skladování s cílem redukce emisí skleníkových plynů z fosilních paliv a biopaliv.
Technologie na zachycování slunečního záření a zvyšování účinnosti solárních panelů se neustále vyvíjejí, doposud však zůstává jeden zásadní problém – jak energii skladovat. Energie musí být uložena tak, aby bylo možno uložit nadbytečnou energii a dodat ji do sítě až v případě potřeby. Inteligentní sítě používají pro splnění tohoto cíle kombinaci různých zařízení a regulačních nástrojů, které vyžadují vytvoření hierarchie řešení pro ukládání dat, která bude nezbytně záviset na kapacitě a době skladování energie. Inteligentní sítě jsou klíčovým prvkem v budoucí energetické infrastruktuře a budou tvořit páteř budoucího nízkouhlíkového energetického systému.
Obrovskou výhodou fosilních paliv, která jsou jistou formou skladování sluneční energie, je jejich velká energetická hustota. Konverzí elektrické energie na chemickou energii umožňuje flexibilnější využívání energie v různých aplikacích (doprava, obytné budovy, průmysl atd.). 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 fotovoltaické panely vyrábět až desetinu celosvětové spotřeby energie.
Vývoj zařízení na přeměnu a ukládání energie je v popředí výzkumu zaměřeného na udržitelnou budoucnost. Existuje však mnoho problémů, které brání rozsáhlému využívání těchto

technologií, včetně nákladů, výkonu a trvanlivosti. Tato omezení mohou být přímo spojena s použitými materiály. Konkrétně se očekává, že návrh a výroba nanostrukturovaných hybridních materiálů poskytne průlom pro rozvoj těchto technologií. Příkladem takových nových materiálů mohou být blokové kopolymerové nanostruktury pro fotovoltaiku, baterie a palivové články,nano strukturní keramika, keramicko-uhlíkové kompozity, keramicko-uhlík-kovové kompozity a kovy s morfologií od šestiúhelně uspořádaných válců po trojrozměrné dvojitě spojité krychlové sítě, komponentní a hierarchické multifunkční hybridní materiály s různými nano-architekturami. Vzhledem k mimořádnému zájmu o obnovitelné zdroje, VaV na celém světě vyhledává technologie pro ukládání velkých množství energie. Vzhledem k vnitřním vlastnostem, jako je vysoká povrchová plocha a vysoká vodivost, jsou grafeny a nano kompozitní hybridy považovány za vynikající kandidáty na zlepšení výkonu elektrodových materiálů v zařízeních pro ukládání a konverzi energie. Grafen má jedinečné vlastnosti pro použití v bateriích a superkapacitorech, včetně vysokého speciálního povrchu (2630 m^2/g), dobré chemické stability a vynikající elektrické vodivosti. A proto je mu předvídána mimořádná budoucnost pro skladování energie Řada společností vyvíjí aplikace grafenu jako potencionální náhradu grafitových elektrod v bateriích, superkondenzátorech a palivových článcích.
Je třeba věnovat pozornost budoucí likvidaci modulů, jejichž články obsahují sloučeniny kovů kadmia, telluru nebo selenu, případně dalších. Při výrobě solárních komponentů z těchto kovových sloučenin se používá také fluorid dusitý (NF_3), který je 17 000 krát účinnější při oteplování atmosféry než CO_2 se stejnou hmotností. V posledních letech se ročně jeho množství v atmosféře zvyšuje o 11 procent.

a) Fotovoltaické články

Fotovoltaický článek je velkoplošná polovodičová dioda schopná přeměňovat světlo na elektrickou energii. V současné době se technologií tlustých vrstev z křemíkových plátků vyrábí více než 85% solárních článků na trhu. Vyvíjí se i technologie tenkých vrstev. Ve stadiu výzkumu jsou i nekřemíkové technologie. Vzhledem k uvažovanému masovému využití fotovoltaických článků, je žádoucí snížit jejich cenu, proto probíhá také výzkum fotovoltaických článků pracující s jinými fotocitlivými materiály než je křemík. Jednou z možností jsou vodivé polymery, kde se na rozdíl od předešlých dvou pro konverzi světla na elektrickou energii nepoužívá tradiční P-N polovodičový přechod. Používají se různé organické sloučeniny, polymery a podobně.
U průmyslově vyráběných článků se prakticky dosahuje účinnosti asi patnáct procent. U experimentálních laboratorně vyráběných článků se dosahuje účinnosti až třicet procent. Stávající solární články vedle nízké účinnosti přeměny energie mají omezenou životnost. Každý solární panel podléhá tzv. degradaci, což je proces snížení výkonu v průběhu času. Existuje celá řada dalších materiálů, které se zkoumají pro využití ve fotovoltaických článcích. Jsou to polovodiče typu chalkogenidů (tj, sloučeniny síry, selenu či teluru) prvků druhé skupiny periodické tabulky (kadmium) nebo kombinace prvků prvé (měď) a třetí skupiny (indium, galium). Nejznámějším takovým materiálem je CdTe nebo $CuInSe_2$. Starší systém fotovoltaického článku n-typ CdS / p-typ CdTe je z důvodu toxicity kadmia nahrazován v současnosti nejperspektivnějším systémem $CuInSe_2$, s případným dalším přidáním galia a síry. Existuje množství alternativních materiálů, ať již anorganických či organických, zatím probádaných jen velmi málo. Technologie založené na velmi čistých polovodičích realizované na investičně nákladných zařízeních nemusí představovat jedinou alternativu pro výrobu slunečních článků. Byly již navrženy, a v budoucnu bude navrženo i mnoho způsobů výroby článků založených na levných technologiích a materiálech.
Vzhledem k tomu, že do roku 2020 se EU jako celek zavázala vyrábět z obnovitelných zdrojů 20 % energie (v České Republice se v současné době vyrábí z obnovitelných zdrojů asi 8 %, toto číslo má do roku 2020 vzrůst na 13 %), bude množství energie vyrobené z obnovitelných

zdrojů i nadále stoupat. Prakticky všechny zdroje obnovitelné energie jsou svou podstatou zdroji s nestabilním výkonem, špatnou predikcí vývoje vyráběného výkonu a neexistencí modelového chování v mezních situacích. Důsledky jsou od lokálního přetěžování sítě a změnu toku energie, přes nestabilitu systému až po úplný rozpad sítě (tzv. blackout) se všemi katastrofickými důsledky. Možné řešení tohoto stavu je akumulovat vyrobenou elektrickou energii do jiné formy energie. To je důvodem pro výzkum a vývoj elektrochemických akumulačních systémů, jako krátko a střednědobého úložiště elektrické energie, stejně jako systémů elektrochemických zdrojů pro mobilní pohony a další aplikace.
Zásadní nevýhodou stávajících fotovoltaických článků je jejich vysoká cena, vysoká energetická náročnost jejich výroby a nízká účinnost přeměny sluneční energie. Z toho se odvíjí zadání základních cílů budoucího VaV :

- vyrábět ze slunečního záření energii za srovnatelné náklady s konvenčními elektrárnami
- snížit výrobní náklady na instalaci fotovoltaických článků, zvýšit účinnost přeměny energie
- zvýšit účinnost přeměny energie u komerčních fotovoltaických článků o 10 % a uplatnit nové nanomateriály jako impuls pro dynamický rozvoj elektrotechniky v ČR

Práce na zvyšování účinnosti solárních panelů běží v mnoha laboratořích a firmách po celém světě. Daří se to použitím a kombinacemi nových materiálů, jako je například z nedávné doby solární modul s nanotyčkami perovskitu, koncentrační fotovoltaika budoucí generace fotovoltaické architektury, která bude využívat nanotechnologie a další pokročilé technologie, např. nanodrátky nebo polovodičové kvantové tečky.
Vzhledem k rostoucí poptávce po zdrojích čisté energie se pozornost odborného světa začíná věnovat právě organickým FV článkům s využitím TiO_2 a metalo-organického senzitizéra. Výrobní náklady na tyto články jsou asi třikrát nižší ve srovnání s křemíkovými. Slabinou TiO_2 článků je dosud menší citlivost na světelné záření než u křemíku a nižší životnost. Organické a polymerní solární články představují v budoucnu zajímavý směr zelené energie. Další nadějnou cestou jsou nanovlákna. 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.
Akceptory fullerenového elektronu byly široce používány v organických / polymerních solárních článcích, stejně jako v perovskitových solárních článcích. Fotovoltaická účinnost může být ovlivněna fullerenovým stereomerem pokud byl nový derivát fullerenu navržen jako elektronový akceptor.
V ČR společnost AUO Solar v Brně od roku 2012 vyrábí špičkové solární panely, pod značkami BenQ Solar/AUO Solar, které jsou preferovány zákazníky po celé Evropě zejména na střešních instalacích. V současnosti se jedná o největší výrobní závod svého druhu u nás, kde se ročně vyrobí téměř 800 000 fotovoltaických panelů s kapacitou cca 200 MW.

b) Baterie

Elektrická baterie je zdroj elektrické energie, realizovaný jako sada sériově spojených elektrických článků. Elektromotorické napětí na galvanickém článku vzniká z rozdílu potenciálů na elektrodách, elektrické potenciály jsou důsledkem chemických reakcí mezi elektrodami a elektrolytem.
Vhodnými a nejčastěji používanými látkami pro zápornou elektrodu jsou zinek, lithium, kadmium a hydridy různých kovů, pro kladnou elektrodu oxid manganičitý (MnO_2, burel), oxid-hydroxid niklitý ($NiO(OH)$) a oxid stříbrný (Ag_2O). Jako elektrolyt se používají vodné roztoky alkalických hydroxidů (nejčastěji hydroxid draselný), silných kyselin nebo jejich solí. Kromě toho se používají také bezvodé elektrolyty, které obsahují vhodnou sůl rozpuštěnou v organickém rozpouštědle. Případné další látky v galvanických článcích mají za úkol regulovat

chemické reakce tak, aby se např. prodloužila životnost článku, snížila možnost úniku nebezpečných látek, ap.
Baterie změní způsoby užívaní i řízení energií, zejména při řízení odběrů elektřiny ze sítě. Budou se nabíjet v době, kdy je v síti dostatek výkonu a ceny elektřiny jsou nízké. Při vysoké poptávce na elektřinu nebude ze sítě odebírána, ale spotřebuje se energie nashromážděná v baterii. Rozšíření možností může sloužit i kombinování se solární elektrárnou, tepelným čerpadlem a dalšími způsoby pro nabíjení baterií přes den i v průběhu noci. Baterie bude zároveň sloužit i jako záložní zdroj v případě výpadku napájení, nebo při globálním zkolabování dodávky energie, tzv. blackoutu. V oblasti elektrických sítí postupně přichází doba s reálným potenciálem pro způsoby skladování energie.
Problémem zatím je cenová dostupnost vhodného řešení skladování elektřiny i v kontextu průběžného či neustálého zvyšování výkonu alternativních zdrojů energií. Energetická regulace a optimalizace pomocí skladování energie ve velkokapacitních bateriích a systémů pro ukládání energií je písní budoucnosti.
V současnosti hledá mnoho výzkumných týmů možnosti efektivnějšího získávání i následného skladování energie., které jsou šetrné k životnímu prostředí. Mnoho úsilí je věnováno zvýšení výkonu lithiových baterií snížením difuzních vzdáleností lithia-iontů, ale výstupy zůstávají daleko pod úrovní elektrochemických kondenzátorů a pod úrovní požadovanou pro mnoho aplikací. Nadějná řešení jsou hledána v alternativním přístupu založeném na redoxních reakcích funkčních skupin na povrchu uhlíkových nanotrubic. Techniky vrstvy po vrstvě se používají k sestavení elektrody, která se skládá z aditiv-free, hustě zabalených a funkcionalizovaných multivrstev uhlíkových nanotrubic. Elektroda, která je o tloušťce několika mikrometrů, dokáže uchovávat lithium až do reverzibilní gravimetrické kapacity ~ 200 mA/kg elektrody a současně dodává výkon 100 kW/kg elektrody a poskytuje životnost přesahující tisíce cyklů. Zařízení s elektrodou s nanotrubkami jako s kladnou elektrodou a s oxidem lithným a titanem jako zápornou elektrodou vykazuje gravimetrickou energii asi 5krát vyšší než konvenční elektrochemické kondenzátory a 10krát vyšší výkon než běžné lithium-iontové baterie.
Očekává se, že s rozvojem elektromobility naroste spotřeba lithiových baterií do roku 2025 přes 20%. Grafenové nano destičky mohou zvýšit účinnost lithium-iontových baterií, když se použijí k výrobě elektrod, což umožní mnohem kratší doby dobíjení. Největší prioritou pro rozšíření elektromobilů ale není kapacita, ale cena za kapacitu jednotky uložení energie.
Problémy s přehříváním, samovznícením nebo s vybuchováním baterií má mnoho světových technologických firem.
Existuje celá řada dalších vyvíjených baterií jako např. NiCd baterie, Flow batterie, self-healable baterie, vanadové redoxové baterie, snadno recyklovatelné“cukrové baterie“ a další. Světový VaV nabízí další „převratné“ alternativy baterií jako např. železo-vzduchová baterie, výzkumníci spojili uhlíkové nanotrubice a nanoporézní celulózu, aby vyrobili lithium-iontové baterie a superkondenzátory, které jsou lehčí a pružnější než stávající zařízení. Zejména nanomateriály poskytují jedinečné vlastnosti nebo kombinace vlastností pro elektrody a elektrolyty v řadě energetických zařízení. Začíná se rozvíjet i technologie výroby baterií 3D tiskem.
V ČR je vývoji a aplikaci Li baterií věnována velká pozornost i s ohledem na tuzemský zdroj lithia a význam automobilového průmyslu pro českou ekonomiku. V Ostravě byla vloni zahájena výroba iont- lithiových baterií původně americkou firmou A123 Systems, kterou však převzala čínská firma ze skupiny Wanxiang Group. Kapacita min 800 000 autobaterií /rok.
Česká společnost HE3DA zahájila v Praze-Letňanech v druhé polovině prosince 2016 pilotní výrobu svých revolučních 3D baterií a plánuje společně s dalším čínským investorem vybudovat výrobnu tzv. nano iont- lithiových baterií s celkovou roční kapacitou 30 MWh v Horní Suché v Moravskoslezském kraji. Zatímco typické lithium-iontové baterie používají

velmi dlouhý plát fólie s naneseným aktivním materiálem, který se postupně skládá, výroba nové 3D baterie probíhá jednoduše lisováním v průmyslových lisech.
Je otázkou zda by se čeští chemici neměli zajímat o vývoj ekonomicky schůdných technologií zpracování zásob Li v oblasti Cínovce a Slavkovského lesa, kde se podle hrubých odhadů nachází 1,2-1,4 mil tun Li (cca 6 % světových zásob lithia).

c) Superkondenzátory
Dalším představitelem elektrochemických řešení ukládání energie v pevné fázi jsou superkondenzátory nazývané také elektrochemické kondenzátory. Superkondenzátory uchovávají energii buď pomocí iontové adsorpce (elektrochemické kondenzátory s dvojitou vrstvou) nebo pomocí rychlých redoxních reakcí (pseudokonzervátory). Mohou doplňovat nebo nahrazovat baterie v aplikacích pro skladování a odběr elektrické energie, pokud je potřeba vysoký výkon nebo příjem.
Komerčně prodávané superkondenzátory mají kapacitu až několik tisíc faradů a nabíjecí/vybíjecí proud v rozmezí od jednotek ampér až po stovky ampér. Svými energetickými vlastnostmi vyplňují prázdné místo mezi bateriemi a klasickými kondenzátory.
V dnešní době se dosti hovoří o využití v hybridních a elektrických vozidlech, kde superkondenzátory dodávají energii při rozjezdu a ukládají energii získanou rekuperací při brzdění.
Pozoruhodné zlepšení výkonnosti bylo dosaženo nedávným pokrokem v porozumění mechanismu ukládání nábojů a vývoji pokročilých nanostrukturních materiálů. Objev, že iontová desolvace se vyskytuje v pórech menších než solvatované ionty, vedla k vyšší kapacitě pro elektrochemické dvojvrstvé kondenzátory používající uhlíkové elektrody se subnanometrovými póry a otevřela dveře pro navrhování zařízení s vysokou hustotou energie s použitím různých elektrolytů. Kombinace nanostrukturovaných lithiových elektrod umožnila zvýšit hustotu energie elektrochemických kondenzátorů blíž k hustotě baterií.
Dalšího pokroku bylo dosaženo nahrazením grafitové elektrody grafenovou elektrodou. Ta byla navržena tak, aby se superkondenzátor nabíjel a uvolňoval energii mnohem rychleji než běžné baterie. Superkondenzátory byly kombinovány se solárními systémy, ale jejich širší využití jako skladovacího řešení je omezeno z důvodu jejich omezené kapacity.
Většina současných výzkumů se soustřeďuje na polovodičové kvantové tečky, jelikož vykazují zřetelné "efekty kvantové velikosti". Vyzařované světlo může být naladěno na požadovanou vlnovou délku změnou velikosti částic přes pečlivou kontrolu kroků růstu.
Za pomoci využití nanotechnologií se podařilo sestrojit superkondenzátor složený z 10 miliard miniaturních kondenzátorů na centimetr čtvereční, každý o velikosti zhruba 50 nm. Všechny jsou vzájemně propojené, a tak fungují jako jeden celek. Hlavním výzkumným cílem bylo vyrobit hybridní baterio-kondenzátorový systém pro elektromobily
Pro realizaci superkondenzátorů jako zdrojů elektrické energie s velmi vysokými hodnotami měrné energie a výkonu je potřeba zkoumat nové materiály, fyzikální a chemické procesy probíhající v okolí a na povrchu elektrod. Je zapotřebí plně porozumět mechanismům uchovávání náboje a navrhnout nové druhy elektrodových materiálů. Je nezbytné zkoumat nové druhy elektrolytů, které budou mít vysokou vodivost společně s elektrochemickou, chemickou a tepelnou stabilitou.
Výhodou superkapacitorů je poměrně vysoká účinnost akumulace (až 95 %). Nevýhodou je závislost napětí na uloženém náboji, což lze minimalizovat použitím napěťových měničů. Rovněž cena je zatím poměrně vysoká, ale s objemem zavedení v průmyslu a s nárůstem sériovosti výroby lze předpokládat její pokles.
Superkonndenzátory je vhodné požívat v oblasti fotovoltaiky, především jako vyrovnávací akumulátory elektrické energie pro menší systémy spojené se sítí, kde mohou kompenzovat krátkodobé výkyvy výkonu.

V ČR se problematikou superkondenzátorů zabývá např. Ústav elektrotechnologie VUT Brno.

d) Palivové články

Palivový článek je elektrochemické zařízení přeměňující přímo chemickou energii paliva a okysličovadla na energii elektrickou za vzniku menšího množství tepla. Kontinuálně musí být přiváděno palivo i okysličovadlo k elektrodám a odváděny spaliny. Palivové články získávají elektrickou energii přímo z chemické formy, a proto by měly být účinnější, jednodušší a spolehlivější. Zatím však jejich využití částečně brání technické překážky. Výhodou palivového článku je skutečnost, že elektrody nevstupují do chemické reakce, tudíž nedochází provozem článku ke strukturálním změnám elektrod a článek má teoreticky nekonečnou životnost. Aktivní látky jsou k elektrodám přiváděny z vnějšku a doba činnosti závisí pouze na přivádění reaktantů.

Nejjednodušší a nejpropracovanější jsou palivové články založené na slučování vodíku s kyslíkem. Porézní elektrody jsou odděleny elektrolytem, v oblasti pórů vzniká třífázové rozhraní, kde dochází k elektrochemické oxidaci paliva a k redukci okysličovadla. Pórovitá elektroda umožňuje elektrolytu vzlínat do pórů, ale tlak plynu za elektrodou nedovoluje kapalině póry pronikat. Elektrody bývají z ušlechtilých materiálů (např. platiny) a fungují i jako katalyzátory chemických reakcí.

V současnosti se nejvíce nadějí vkládá do kyslíko-vodíkového palivového článku v rámci vodíkového pohonu automobilů. Potřebný vodík může být získán například pomocí elektrolýzy vody, potřebný kyslík pro palivový článek, je možno získávat z atmosféry. Komerčně úspěšný je nízkoteplotní PEM palivový článek (Proton Exchange). Úspěšnost tohoto sytému je dána pokrokem ve výzkumu a vývoji membrány (doposud jediná komerčně úspěšná membrána NAFION), katalyzátoru, struktury článku, atd. Tyto PEM palivové články vodík-vzduch jsou v hledáčku mnoha výzkumných týmů s cílem dosáhnout potřebných technologických parametrů s cenou pod 500 USD/kW pro stacionární aplikace.

Existují palivové články různých konstrukcí, rozměrů a maximálních výkonů. Podle konstrukce a typu mohou pracovat při teplotách od 60 do 1 000 °C, jako palivo mohou používat kromě vodíku např. metan (CH_4), metanol (CH_3OH), hydrazin (N_2H_4) apod., elektrolytem může být např. roztok kyseliny fosforečné (H_3PO_4), hydroxidu draselného (KOH), tavenina alkalických uhličitanů či pevný oxidický elektrolyt (Y_2O_3). Napětí jednoho palivového článku bývá přibližně U » 1 V, články se rovněž mohou skládat sériově do baterií. Zajímavým využitím palivových článků je vodíkový elektromobil, který nemá spalovací motor s přímým vstřikováním, ale palivové články a elektromotor.

Vývoj a výzkum se zaměřuje především na palivové články s tavenými uhličitany (Molten Carbonate Fuel Cell) a s pevnými oxidy (Solid Oxide Fuel Cell), které pracují s teplotami 500-1000°C, což jim umožňuje přímé využívání např. zemního plynu.

V současné době všechny velké automobilové společnosti vyvíjí či testují prototypy nebo vývojové série vodíkových vozidel. Obecně je lze rozdělit dle způsobu využití vodíku na ty, které vsadily na upravené spalovací motory nebo na membránové palivové články. Významného aplikačního úspěchu s vysokoteplotními membránovými palivovými články dosáhla německá firma Siemens v pohonu německých ponorek. Produkované teplo z palivových článků je využito k ohřevu hydridů, který posléze uvolňuje vodík, čímž je zvýšena účinnost celého procesu až na 72 % při plném zatížení.

Hlavní výhodou superkondenzátorů proti bateriím je jejich schopnost ultra-rychlého nabití a vybití a delší životnost, k tomu i nízká hmotnost. Nevýhodou je nízká kapacita. To se ale postupně mění díky technologii grafenových superkondenzátorů. Už dnes se tyto superkondenzátory SkelCap, SkelMod a SkelRack využívají v mnoha různých typech aplikací od hybridních nákladních aut, autobusů, větrných turbín přes vesmírné satelity až po UPS či řízení rozvodné sítě. Nejdůležitějším faktorem výkonu takového superkondenzátoru je

grafenová elektroda, ve které se ukládá energie. Ve srovnání se současnou konkurencí nabízejí až pětinásobnou hustotu výkonu a dvojnásobnou energetickou hustotu (specifický výkon 45 kW/kg, energická hustota 57 kW/l). Nabíjení elektromobilů by díky těchto výkonným superkondenzátorům mohlo trvat sekundy a ne minuty až hodiny.
Zajímavou oblastí využití palivových článků jsou přenosná elektronická zařízení, jako jsou notebooky, mobilní telefony nebo videokamery. Zde se dá očekávat větší využití metanolu místo vodíku, s ohledem na vyšší hustotu energie kapalných látek. Velká pozornost je nyní věnována možnosti využití etanolu.

e) Skladování obnovitelné energie ve formě chemické energie
Jedná se o procesní technologie, jako jsou vodíkové a CO_2 nosiče energie, tj. technologie pro dodávku energie z plynu a energie z kapaliny a skladování tepelné energie (prostřednictvím materiálů s fázovou změnou nebo reverzibilních termochemických reakcí). Obecně tedy je elektrická energie přeměňována na chemickou v plynné fázi, jako je metan, který lze skladovat ve stávajícím distribuční síti plynu, nebo vodík), nebo do kapalné fáze jako je metanol, etanol a další.
Převedení elektrické energie na chemickou energii výrobou vhodných energetických vektorů umožňuje flexibilnější využívání energie v různých aplikacích (doprava, obytné budovy, průmysl atd.). Vhodné energetické vektory mohou být také použity jako základní suroviny pro chemický průmysl, kterému nabízejí novou nízkouhlíkovou ekonomiku. Energie musí být uložena tak, aby odpovídala poptávce. Mezi nejvýznamnější patří především vodík, dále metan, metanol, etanol a další.
Významným iniciátorem takového vývoje je především automobilový průmysl, ale také energetika a chemický průmysl. Vývoj procesů pro výrobu obnovitelného vodíku s nižšími náklady bude klíčem pro některé procesy přeměny CO2 a může přispět k zavádění udržitelného cyklického hospodářství. Podstatou je využití určitého druhu energie k výrobě vodíku a poté jeho jímání a skladování pro pozdější použití. Takto akumulovaná energie může být později přeměněna oxidací vodíku na jiný druh energie, např. elektrickou, mechanickou či tepelnou.
V současnosti je energeticky nejúčinnějším způsobem výroby vodíku přímá přeměna fosilních paliv parciální oxidací zemního plynu a odpadních uhlovodíkových frakcí, parní reforming í s účinností kolem 70 %. Jako další možnost se nabízí elektrolýza vody s hlavním vstupem v podobě elektrické energie a s účinností 60 – 70 %. Využití elektřiny pro získání vodíku je výhodné ve spolupráci s jadernou elektrárnou v době energetického sedla, kdy je přebytek nabídky energie. Další technologií výroby vodíku je elektrolýza vody. Zatím velkou část elektřiny produkují uhelné elektrárny, jejichž celková účinnost se pohybuje kolem 40 % a někdy i podstatně níže. Účinnost samotného palivového článku je obecně v rozmezí 40 – 60 %, takže účinnost přeměny (elektřina → vodík → elektřina) dosahuje jen asi 30 – 40 %. Celková účinnost přeměny (uhlí → elektřina → vodík → elektřina) pak vychází přibližně 12 – 16 %. Pro srovnání lze uvést například vznětový motor s účinností přeměny (nafta → mechanická práce) kolem 40 % a lithium-iontový akumulátor s účinností přeměny (elektřina → chemická energie → elektřina) 80 – 90 %. Je tedy zřejmé, že pro dosažení dobré účinnosti celého řetězce je potřeba minimalizovat počet přeměn. K výrobě 1 kg vodíku elektrolýzou vody je třeba energie asi 38 kWh při účinnosti elektrolyzérů 90 % a ke zkapalnění 1 kg vodíku ještě dalších 10 kWh.
Probíhá výzkum různých typů elektrolyzérů, včetně vysokoteplotních technologií. Velký technologický pokrok byl v posledních dvou desetiletích uskutečněn v oblasti PEM (Polymer Electrolyte Membrane) elektrolyzérů, které jsou nyní komerčně k dispozici při tlacích vodíku vhodných k dalšímu skladování.
Pravděpodobným trendem do budoucna je výroba speciálních zařízení nazývaných generátor slunečního vodíku, kde dochází k rozkladu vody přímo slunečním zářením ve speciálně

upravených solárních článcích. Obecně lze přímý rozklad realizovat pomocí solárních článků, filmových solárních článků z mikrokrystalických silikonových fólií nebo pomocí fotoelekrochemických solárních článků.
Další vyvíjené technologie jsou založeny na fotobiologickém principu (některé řasy a bakterie mohou produkovat vodík za vhodných podmínek) nebo vysokoteplotním termochemickém principu.
Množství vodíku vzniklé dělením vody je zásadně omezeno pomalejší polovinou reakce – tvorbou kyslíku. Řada výzkumných prací je proto zaměřena na vývoj účinného kyslíkového katalyzátoru, který by měl být vysoce průhledný pro maximalizaci propuštěného slunečního záření do solárního článku, dlouhodobě stabilní a využíval levné materiály. V současné době nejvýkonnější kyslíkové katalyzátory jsou většinou vyrobeny z vzácných prvků, jako je iridium a ruthenium. Jedno z řešení nabízí vývoj křemíkové soustavy mikrodrátků jako fotokatodové materiály pro výrobu slunečního vodíku. Otázky špatné kinetiky a degradace materiálu byly řešeny potažením křemíku tenkými vrstvami CoS_2 nebo $CoSe_2$, které působí jako kokatalyzátor a pasivační vrstva. Důležitým aspektem patentované technologie HyperSolars jsou integrované struktury polí s vysokou hustotou nanočásticových solárních článků. Generátor je tak tvořen miliardami nanočástic na čtverečním centimetru. Tyto nanočástice jsou potaženy samostatným patentovaným ochranným povlakem, který zabraňuje korozi během prodloužených období výroby vodíku. Cílem těchto nanočástic je vysoká účinnost konverze a nízké náklady. Každá částice je kompletním vodíkovým generátorem, který obsahuje nový vysokonapěťový solární článek spojený s chemickými katalyzátory vlastním enkapsulačním povlakem.
Dalším možným kyslíkovým katalyzátorem jsou velmi tenké vrstvičky amorfních chalkogenidů, např. kobaltu. Povlak tenkých vrstev disulfidu kobaltu a kobaltového diselenidu působí jako kokatalyzátory a pasivační vrstvy, aby zlepšily výkonnost a stabilitu fotokatod křemíkových mikrovláken.
Existuje řada prací a patentů řešících možnosti optimalizovat podmínky pro rozklad vody. Významné výzkumné úsilí v posledním desetiletí se zaměřilo na konstrukci heterogenního systému kov-oxid, která umožňují přenos díry při energiích blíže k redoxnímu potenciálu, který vyvíjí kyslík (H_2O / O_2). Např. se jedná o tzv. "lone-pair active metal-oxide nanodrátky z vanadium pentaxidové bronze" dopované lone-pair aktivním iontem Pb^{2+}, který může transportovat fotogenerované díry ke kyslíkovému katalyzátoru.
Rozsáhlé použití vodíku jako pohonné hmoty závisí kriticky na schopnosti skladovat vodík při vysokých objemových a gravimetrických hustotách, stejně jako na schopnost ukládat je dostatečně rychle. Problematika skladování vodíku je determinována jeho fyzikálními a chemickými vlastnostmi – velmi nízká kritická teplota (-240,18 °C), výbušnost, chemická reaktivita, objemová a gravimetrická hustota vodíku v skladovacím materiálu. Schopnost jednoduše skladovat sluneční energii ve formě paliva (např. kyslík a vodík) je velmi atraktivní, zvláště ve srovnání s komplikovanějšími konfiguracemi, které jsou založeny na solárních článcích a lithium-iontových bateriích. Vzhledem k tomu, že současné metody skladování založené na fyzikálních prostředcích - vysokotlakém plynu nebo (kryogenickém) zkapalňování - pravděpodobně neuspokojují cíle týkající se výkonu a nákladů, globální výzkum se zaměřuje na vývoj chemických prostředků pro skladování vodíku v kondenzovaných fázích. V současné době žádný známý materiál nevykazuje kombinaci vlastností, které by umožnily velké objemy automobilových aplikací, ale vývoj nových materiálů přináší významný pokrok.
Určitou variantou je skladování vodíku v metalhydridových materiálech, v hydroxidech lehkých kovů, v boranech nebo adsorpční skladování adsorbentů s vysokou povrchovou plochou. Nejnověji v nanouhlíkatých materiálech, jako např. uhlíkové nanotrubičky, kdy se vodík interkalací zabudovává do struktury základního materiálu.
Dalšími alternativními palivy a tedy zásobníky obnovitelné energie může být metan, metanol, etanol a další chemické látky, které lze snadno skladovat a dopravovat.

Obnovitelný vodík může snadno reagovat s oxidem uhličitým za vzniku uhlíkově neutrálního a obnovitelného metanu, což je v podstatě varianta zemního plynu. Přeměnou CO_2 na metanol, metan, oxid uhelnatý nebo dimetyléter s využitím obnovitelných energií lze získat díky vysokému energetickému obsahu a snadnosti skladování a přepravy vysoce hodnotná paliva a chemikálie. Metanol, Dimetyl eter (DME) a oxymetylen etery (OMEs) OME se považují za předtavitele nové energetické chemie, protože jejich výroba a použití vykazují jedinečné rysy flexibility, což je jedna z hlavních požadavků pro budoucí scénář energetické chemie. Metanol může být používán jako chemický a surovinový materiál pro velkoobjemové chemické látky nebo jako palivo. DME a OME se v budoucnu považují za důležité čisté palivo.

Témata pro další vývoj a výzkum

- lithium-iontové akumulátory nové generace
- vysokoteplotní elektrolýza jako efektivní výroba vodíku v návaznosti na budoucí jaderné reaktory nové generace
- vývoj grafenové baterie a grafenové katody pro superkondenzátory
- vývoj ekonomicky úspornějších palivových článků
- vývoj elektrolytické výroby vodíku pomocí fotovoltaiky
- fotovoltaika integrovaná do budov
- získání komplexních znalostí umožňujících cílený návrh nanostrukturních materiálů typu nanokompozitů π-konjugovaných polymerů a oxidů kovů 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
- nanotechnologie a pokročilé materiály pro nízkouhlíkové technologie v energetice a vyšší energetickou účinnost
- velkokapacitní zásobníky energie založené na nano strukturách nitridů kovů;
- vývoj hybridních nanomateriálů, které budou schopny s využitím slunečního záření rozkládat vodu na vodík a kyslík
- chemické materiály pro konverzi a skladování energií
- příprava nanomateriálů pro výrobu baterií a akumulátorů
- vývoj technologie elektrolýzy pro přeměnu obnovitelné elektřiny na vodík založené na levných a dostupných katalytických kovech
- vývoj zařízení s účinností generování solárního vodíku cca o 20 % vyšší než je účinnost fotovoltaické technologie
- katalytické technologie k ukládání obnovitelné elektřiny nebo obnovitelného vodíku v kapalných palivech
- recyklace starých fotovoltaických článků a baterií

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 vícevrstvých 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

3.3.2. Moderní katalyzátory

Společnost je významně ovlivňována pokročilými materiály a technologiemi. Materiály pomohly zvýšit naši životní úroveň, ale stále se objevují nové výzvy a vyžadují se nové materiály a vlastnosti, které představují klíčový prvek úspěchu zítřejších průmyslových výrobků a konkurenceschopnosti českého chemického průmyslu. V tomto ohledu je katalýza jednou z nejrozsáhlejších a nejdůležitějších disciplín v chemickém průmyslu. Katalytické materiály mají zásadní význam pro snížení dnešních a budoucích zátěží v oblasti životního prostředí a mohou přispět k ekologičtějšímu a udržitelnějšímu vývoji produktů, ke snížení emisí CO_2 nebo k řešení budoucích energetických problémů. Klíčovou charakteristikou katalýzy jako vědní disciplíny je její interdisciplinární charakter. Úspěšná realizace nových katalytických řešení a technologií vyžaduje integraci odborných znalostí z chemie, fyziky, biologie, matematiky do chemického a materiálového inženýrství a aplikované průmyslové chemie. Integrace teoretického modelování in situ k pochopení reakčních mechanismů, vědy o přípravě katalyzátoru na úrovni nanometrů, pokročilé mikrokinetiky a modelování reaktorů jsou příklady současných trendů v katalýze. Dalším úkolem je dosáhnout jednotného přístupu pro homogenní, heterogenní a biokatalýzu.

Všechny tyto aspekty jsou prvky generické výzvy "Katalyzátory podle návrhu", která je obsahem materiálu „Science and Technology Roadmap on Catalysis for Europe“ publikovaného v říjnu 2016 Evropským klastrem pro katalýzu. Katalýza je jednou z klíčových technologií pro většinu ze sedmi společenských výzev v programu Horizont 2020.

V současné době se obor katalýzy vyvíjí od popisu k predikci. Důležitými prvky takového přístupu jsou výpočetní modelování katalytických procesů a pokročilé syntetické přístupy zaměřené na přípravu materiálů s vylepšeným katalytickým výkonem. Reprezentativním příkladem této koncepce jsou nanomateriály na bázi uhlíku dopované lehkými hetero prvky, které představují třídu katalytických systémů bez kovů, s potenciálem katalyzovat řadu klíčových chemických reakcí v rámci environmentálních technologií. Přestože heterogenní katalýza bude pravděpodobně stále dominovat budoucímu průmyslovému využití katalýzy, je zřejmé, že mnohé nové výzvy, kterým katalýza čelí, od využití sluneční energie až po zpracování biomasy, vyžadují integraci homogenních, heterogenních a bio-katalýz.

Katalýza a katalytické procesy představují přímo nebo nepřímo asi 20 – 30 % světového HDP. Výroba katalyzátorů v Evropě má velký ekonomický dopad, který činí zhruba 3 – 4 miliardy EUR. Technická zlepšení katalyzátorů a výrobních procesů by mohly do roku 2050 snížit energetickou náročnost výrobků o 20 % až 40 %. V absolutních číslech by zlepšení mohlo ušetřit ročně až 13 EJ (exajouly) a 1 Gt ekvivalentu oxidu uhličitého (CO_2 ekv.) Katalýza je proto zásadní pro snížení tohoto zatížení životního prostředí. Více než 85 % všech současných chemických produktů se vyrábí pomocí katalytických procesů a katalytické procesy umožňují moderní rafinování paliv. Katalýza neovlivňuje jen chemický průmysl a ropné rafinérie. Má rozhodující úlohu při umožnění udržitelného využívání energie, například v palivových článcích a bateriích, při výrobě biopaliv, jakož i při ochraně životního prostředí a klimatu. Neustále roste význam nanomateriálů v katalýze. Nanomateriály na základě vlastností závislých na velikosti a povrchu částic nacházejí stále širší uplatnění v chemickém průmyslu, energetice, automobilovém a leteckém průmyslu, v obnově životního prostředí atd. To však vyžaduje věnovat mimořádnou pozornost hodnocení jejich bezpečnosti v rámci celého životného cyklu.

Významné výzkumné záměry jsou zaměřeny na hledání nových teoretických přístupů k přípravě katalyzátorů pomocí efektivního modelování. Je třeba získat další znalosti o molekulárních mechanismech heterogenní katalýzy a aktivace / deaktivace katalyzátorů v nano rozměrech. V cyklické ekonomice je CO_2 stále častěji vnímán chemickým průmyslem jako stavební kamen spíše než výroba chemických odpadů. Pokračuje úsilí o reakci CO_2 s olefiny, dieny a alkyny za vzniku karboxylátů, karbonátů a karbamátů. Mnohé z těchto procesů jsou

katalytické. Některé procesy jsou endergonické a tedy je lze obtížnější realizovat. Zpravidla se mnoho chemických procesů spoléhá na syntézní plyn ($CO + H_2$), např. Fischer-Tropschova syntéza, hydroformylace a karbonylace. Je třeba zkoumat možnosti rozvoje chemie založené na $CO_2 + H_2$ namísto $CO + H_2$ jako vhodného způsobu funkcionalizace uhlovodíků. Příprava uhličitanů a polykarbonátů z CO_2 nabízí přímý přístup na rozsáhlé trhy v chemickém a plastikářském sektoru. Nedávno došlo v oblasti katalýzy k významnému pokroku. Katalytická karboxylace nabízí nové způsoby výroby karboxylových kyselin. Elektrokatalytická konverze CO_2 představuje další velmi elegantní způsob použití oxidu uhličitého. Nedávný pokrok ukázal nejen schopnost snižovat CO_2 v životním prostředí, ale také vytvářet vazby C-C během konverze, což je například otevření nových cest syntézy kyseliny octové.
V krátkodobém až střednědobém horizontu bude pokračovat rozvoj využití CO_2 , zejména v oblastech, které jsou technologicky pokročilejší (např. polymery obsahující CO_2, hydrogenace CO_2). Konverze CO_2 bude mít také rostoucí úlohu při využívání obnovitelných zdrojů energie nebo při snižování nestability na síti (související s diskontinuální výrobou energie z obnovitelných zdrojů, tedy s chemickou konverzí jako způsobem skladování a distribuce energie).
Z dlouhodobého hlediska bude využívání CO_2 klíčovým prvkem udržitelného nízkouhlíkového hospodářství v chemických a energetických společnostech. Očekávaná změna surovinové základny při vyčerpávání zdrojů fosilního uhlíku vyvolává potřebu postupné evoluce struktury chemického průmyslu.
ČR má významnou fundovanou vědeckou základnu pro procesní inženýrství a vývoj katalyzátorů, včetně fotokatalyzátorů. Výrobní základna je však menší.

3.3.2.1. Katalyzátory pro udržitelné energie

Problémy a příležitosti
Výrobní procesy založené na fosilních palivech je třeba dále zdokonalovat, což vyžaduje významné úsilí v oblasti VaV s cílem udržet vysokou úroveň inovací a zajistit konkurenceschopnost. S ohledem na obrovské objemy spalovaných materiálů bude mít i drobné zlepšení podstatný dopad na životní prostředí a hospodářství. Spolu s novými katalyzátory pro aktivaci metanu a dalších zdrojů uhlíku C1, včetně CO_2, jsou zapotřebí pružnější a robustnější katalyzátory a procesy pro přeměnu a vyčištění např. frakcí těžkého rafinérského oleje.
V roce 2010 byl celosvětově spotřebovávaný elektrický výkon 13,6 TW. Někteří odborníci odhadují, že pokud udržíme současný ekonomický růst, budeme v roce 2050 potřebovat 30 TW. Zatím je většina energie kryta z fosilních (neobnovitelných) zdrojů, jako jsou uhlí, ropa nebo zemní plyn. Lepší využívání fosilních paliv a účinné využívání biomasy vyžadují lepší pochopení deaktivace katalyzátoru. Vývoj nových procesů nabízí také možnosti nahradit kritické suroviny, jako jsou drahé a kritické kovy levnějšími materiály.
Pokročilá katalytická řešení výroby obnovitelného vodíku z vody (photo-splitting např. pomocí fotokatalýzy), z odpadních vod obsahujících sacharidy, alkoholy a krátké karboxylové kyseliny (foto-reformování) nebo z odpadních organických zdrojů (buď foto, bio nebo heterogenní katalýza) prostřednictvím fotokatalytických procesů při přímém ozáření slunečním zářením se ukazuje jako cenné a zajímavé řešení obnovitelné energie a je jednou z priorit umožňující konverzi oxidu uhličitého na solární paliva nebo chemikálie. Nicméně zdaleka není tato cesta optimalizována a účinnost těchto procesů zatím omezuje jejich technologické uplatnění.
Konverze oxidu uhličitého na solární paliva nebo solární chemikálie přináší vlastní výzvy k vývoji účinné konverze založené na nejrůznějších formách obnovitelné energie. Solární paliva a solární chemická výroba jsou potenciální strategií pro snížení negativního dopadu zvyšování atmosférického CO_2 a rovněž přispívá k ukládání přebytečných obnovitelných zdrojů energie.
Z krátkodobého hlediska je kritickým faktorem snížení nákladů na výrobu vodíku díky lepšímu designu katalyzátoru v elektrolyzérech, avšak v dlouhodobém horizontu by měla být využívána

bezprostředně obnovitelné energie bez meziproduktu vodíku ke konverzi CO_2 na solární paliva a chemikálie. To mimo jiné vyžaduje další vývoj elektrokatalýzy, která může pracovat v synergii s fotoaktivními materiály a katalyzátory. Takové procesy umožní chemickému průmyslu vyrábět více uhlíkové chemikálie v příštích desetiletích.
Vyvinout nové katalyzátory pro stabilizaci a modernizaci katalytického krakování pyrolýzních olejů, které jsou odolnější vůči různým formám deaktivace. Tento výzkum společného procesu fluidního krakování by měl být rozšířen na všechny hlavní procesy konvenčních rafinérií. Při přechodu na nová paliva je reálnou alternativou k biopalivům první generace výroba hybridních biopaliv a fosilních paliv tím, že se společně rafinuje pyrolýzní olej s biomasou v konvenční rafinérii minerálních olejů s cílem splnit cíle v podílu obnovitelných energii do roku 2020.
Budoucí scénář vychází z postupné náhrady produktů získaných z fosilních paliv pro chemický průmysl a energetiku na biomasu. To má svá omezení spojená s náklady a náročností její přeměny, což pravděpodobně omezí rozsáhlé využívání jako biopaliva pouze na několik produktů odvozených z biomasy. I když existují různé názory na přechod k udržitelnější a nízkouhlíkové budoucnosti, bude pravděpodobně postupně docházet k omezenému využívání energetických zdrojů z fosilních paliv, k růstu podílu biopaliv, uplatnění solárních paliv a postupnému zavádění paliv třetí generace odvozených např. ze zpracování řas. Podíl biopaliv na celkové poptávce po energiích však nepřesáhne 20 % a bude zahrnovat spíše jednoduší výrobní procesy.
Pochopení nano-architektury a její úlohy při řízení funkčních výkonů zůstává hlavní výzvou pro katalytické nanomateriály. Příkladem je vývoj pokročilých elektrod. Existují klíčové technologické oblasti energetického odvětví, které vyžadují lepší elektrodovou nanostrukturu, aby překonaly běžné hranice a zvýšily svůj výkon.
Klíčovou otázkou přípravy solárního paliva je dostupnost obnovitelného vodíku. Uvažují se různé cesty jako bioprocesy založené na enzymech nebo bakteriích, sluneční tepelná energie nebo použití polovodičů absorbujících fotony, pokročilá elektrolýza spojenou s obnovitelnou elektrickou energií, katalytické systémy buď v plynné, nebo kapalné fázi s využitím odpadu nebo vedlejších produktů z transformace biomasy a mikrobiální elektrolýzy.
Nové vědecké pokroky v homogenních i heterogenních katalyzátorech a také v bio-katalyzátorech oživily vědecký i průmyslový zájem o využití metanolu, dimetyleteru a oxymetylen eteru a to zejména proto, že jejich výroba a použití vykazují jedinečné rysy flexibility. Metanol může být používán jako surovina jak pro velkotonážní chemické látky, ale také jako palivo. Dimetylether (DME) a oxymetylen-ethery (OME) se v budoucnu považují za důležité čisté palivo.
V souladu se současným zájmem průmyslu by měly být vyvinuty nové katalytické systémy pro selektivní částečnou oxidaci metanu, které by měly být odolné vůči ukládání uhlíku na povrchu katalyzátoru a vykazovat vysokou konverzi metanu při nízké teplotě a vysokou selektivitu vůči vodíku. Takové cíle lze řešit vhodnými volbami nosiče a použitím aktivního katalytického kovu, zejména niklu, a případně přidáním vhodných dopantů.

Potřeby v oblasti výzkumu a očekávané výstupy
Z dlouhodobého hlediska se VaV soustředí na vysoce integrovaná řešení, která umožní produkci energie bez emisí uhlíku ve všech oblastech, včetně mobility a chemikálií. K dosažení tohoto požadovaného cíle je třeba vyřešit technologii, která dokáže zachytit CO_2 z atmosféry. To může být vyřešeno pomocí „umělých listů“, ve kterých je CO_2 ze vzduchu fotokatalyticky přeměněn na užitečné produkty nebo meziprodukty, nebo přístupy, při kterých je zachycování CO_2 provedeno kondenzací, buď elektrochemicky nebo znovu obnovitelným H_2. Biomimetika i geneticky modifikované organismy mohou být také volbou. V takovém scénáři, kde lidé již nejsou závislí na fosilních zdrojích energie, by se tyto zdroje (včetně biomasy) mohly stát výchozími chemikáliemi pro výrobu spotřebních výrobků. CO_2 by již nebyl odpadním

produktem, ale byl by považován za primární stavební prvek. Je třeba vyvinout nové katalytické postupy, které by umožnily efektivní využívání CO_2 jako monomerní jednotky při výrobě paliv a chemikálií.
V dlouhodobém horizontu jsou očekávány velké přínosy z vývoje třetí generace fotovoltaických článků a nanostrukturovaných termoelektrických zařízení.
Podle prognózy očekávaných výsledků VaV v příštích dvou desetiletích se předpokládá vyřešení:

- technologie elektrolýzy založené na levných a dostupných katalytických kovech, které přeměňují obnovitelnou elektřinu na vodík;
- generátorů vodíku s účinností generování solárního na vodík o 20 % vyšší než je účinnost fotovoltaické technologie;
- katalytické technologie pro skladování obnovitelné elektřiny nebo obnovitelného vodíku v kapalných palivech;
- integrace solární energie a využívání CO_2 do výroby chemických látek a paliv.

Existuje řada výzkumných průnikových témat společných pro technologické platformy pro energetiku, udržitelnou chemii, plasty a biosložky, která mohou být základem pro další spolupráci těchto technologických platforem. Jedná se na příklad o problematiku výroby metanu nebo metanolu ze syntézního plynu, zplyňování biomasy a další.
Tato strategie vyžaduje vybudování celosvětového systému pro obchodování se solárními palivy a chemickými látkami, a tím souvisejícími obnovitelnými zdroji energie.

Prioritní výzkumná témata

- katalytické procesy pro efektivní využití uhlíkatých energetických surovin;
- elektrokatalytický vývoj vodíku na Ni katodě aktivované redukovaným grafenoxidem;
- vývoj neplatinových katalyzátorů pro alkalickou elektrolýzu vody;
- příprava katalyzátorů pro palivové články typu PEM;
- přímá dekompozice metanu;
- katalyzátory pro použití při zapalování reaktorů pro reformování benzinu a nafty, které jsou velmi robustní a odolné vůči katalytickým jedům a koksování;
- výzkum a vývoj katalyzátoru na bázi oxidu zirkoničitého a jeho aplikace pro izomeraci C5 a C6 uhlovodíkové frakce;
- zlepšení elektrokatalyzátorů s cílem snížit spotřebu energie;
- rozšíření používání technologií na širší spektrum procesů, které vyžadují vyvíjení inovativních a vysoce produktivních elektrod (např. 3D-typ), které mohou zefektivnit procesy a snížit náklady;
- vývoj termických a netermických katalyzátorů (elektro- a fotokatalyzátorů) pro selektivní konverzi nízko kvalitní suroviny (např. biomasy, glycerín glycerol atd.) na chemikálie s vysokou přidanou hodnotou.
- vývoj elektrokatalyzátorů s redukcí kyslíku pro aplikace v palivových článcích;
- vývoj bifunkčních (oxidačně / redukčních) elektrokatalyzátorů pro aplikace na přeměnu a ukládání energie (např. baterie kov-vzduch);
- vývoj aplikací molekulární katalýzy v energetických procesech;
- zlepšení katalytických procesů, jako je hydrogenace, zplyňování odolné proti síře a metody selektivní konverze aromátů z uhelného dehtu.

3.3.2.2. Strukturované katalyzátory pro procesy intenzifikace

Problémy a příležitosti

Procesy intenzifikace můžeme definovat jako "jakákoliv aplikace poznatků chemického inženýrství, která vede k podstatně menší, čistší, bezpečnější a energeticky účinnější

technologii". Jejich cílem je tedy výrazné zvýšení efektivnosti využívání zdrojů z hlediska spotřeby materiálu a energií, což má zajistit další ekonomickou udržitelnost chemických procesů do budoucna. Potřeba účinnějších procesů, včetně dalších flexibilních konstrukčních návrhů a současně zvýšení bezpečnosti a snížení environmentálního dopadu těchto procesů, vyvolává požadavky na nový výzkum v této oblasti. Zlepšení transportních procesů v chemických reaktorech může hrát klíčovou úlohu při intenzifikaci procesů, povede rovněž ke kompaktnějším a efektivnějším zařízením a umožní lepší integraci procesů, což zase vede ke snížení počtu procesních kroků (např. multifunkční reaktory). Intenzifikace procesů katalýzou a integrace katalýzy s jinými technologiemi (např. membránovými technologiemi) povede rovněž ke snížení počtu kroků procesu.

Strukturované katalyzátory a reaktory poskytují velkou příležitost pro implementaci těchto strategií do průmyslové praxe. Několik studií jednoznačně prokázalo potenciál výrazně zvýšit přenos tepla a hmoty na mezifázovém rozhraní (plyn / pevná látka a plyn / kapalina / pevná látka) při současném zachování omezených poklesů tlaku, stejně jako celkový přenos tepla v reaktoru. Nové příležitosti pro budoucí aplikace strukturovaných katalyzátorů mohou vyplývat z kombinace pokročilého modelování pravidelné geometrie reaktoru, schopného poskytnout přesný popis všech relevantních chemických a fyzikálních jevů na různých stupních s novými technologiemi výroby aditiv, která umožní realizaci komplexních a vysoce specializovaných geometrií zařízení. Příkladem je monolitický, membránový, mikro kanálkový a hierarchický návrh nebo 3D tisk. Taková kombinace modelové optimalizace s přizpůsobenou výrobou by vedla k technologickému procesu se zvýšenou výkonností, které lze aplikovat jak na výrobní procesy velkotonážních chemických produktů, tak na výrobu chemických specialit, jakož i na vysoce inovativní energetické a environmentální technologie zahrnující chemickou transformaci.

Stále se objevují nové trendy a zdůrazňuje se potřeba vyvinout a vylepšit nové katalytické materiály, zařízení a procesy. V některých oblastech se jedná o zlepšení stávajících katalyzátorů nebo jejich přizpůsobení novým surovinám, jako je přechod z ropy na biologické suroviny. V jiných sektorech na příklad při přímé konverzi metanu nebo při výrobě solárních paliv, je potřebný vývoj nových katalyzátorů. Jedním z příkladů je fixace dusíku. Výroba amoniaku je jedním ze světově nejvíce energeticky náročných procesů s více než 2,5 TJ energetické spotřeby a produkcí 350 Mt CO_2 ekv. emisí/rok. Výrazné snížení spotřeby energie při výrobě amoniaku se uskutečnilo před rokem 1930, ale další vylepšení bylo v posledních pěti desetiletích pouze pozvolné a nedávno téměř nulové. Výroba NH_3 za mírných podmínek, například elektrokatalýzou nebo fotokatalýzou za použití obnovitelných zdrojů energie pro řízení reakce, by mohla zcela změnit dopady výroby amoniaku na životní prostředí a současně poskytnout nový základ pro konkurenceschopnost chemického průmyslu.

Existuje řada dalších příkladů nových trendů ve vývoji katalýzy:

- fotochemické nebo fotochemické katalytické výroby obnovitelného vodíku;
- nové katalyzátory pro přímou konverzi metanu
- nové syntetické katalytické strategie pro chemii, například fotokarboxylaci nebo integraci chemo- nebo elektro-katalytických kroků (například při regeneraci kofaktorů v enzymatických katalytických cyklech)

Intenzifikace výrobních procesů katalýzou a integrace katalýzy s jinými technologiemi (např. membránovými technologiemi) vede ke snížení počtu operací a ke snížení spotřeby energií. V současné době sice existují průmyslové technologie, s jejichž pomocí lze z metanu vyrobit zajímavé produkty, obvykle ale fungují za vysokých teplot a tlaků, a bývají komplikované. Metan zpracovávají na finální produkty jenom s malou účinností a vyplatí se jedině při produkci ve velmi velkém měřítku. V současné době je ale přitom poptávka po ekonomicky výhodných technologiích zpracování metanu na zajímavé uhlovodíky ze zdrojů, které jsou malé, jen dočasné, anebo obtížně dostupné. Jediný známý katalyzátor, ať už jde o průmyslové nebo

biologické procesy, který umožňuje přeměnu metanu na metanol za pokojových podmínek a se slušnou účinností, je enzym metan-monooxygenáza (MMO).
Moderní katalyzátory a integrace katalýzy s ostatními technologiemi (např. membránovými technologiemi) významně přispívají ke zvýšení efektivnosti výrobních procesů, snižování spotřeby energie a snižování počtu výrobních operací. Za efektivní katalytické procesy jsou považovány: vysoce selektivní katalýza, nízkoenergetické operace, komplexní a variabilní vstupní suroviny, multifunkční "inteligentní" katalýza, zvyšování a postupné zasahování enzymatické katalytické / syntetické biologie do oblastí tradičně patřících k heterogenní katalýze.
Samostatnou kapitolou jsou fotokatalyzátory. Tyto materiály mají díky fotokatalýze schopnost rozkládat organické látky v přímém kontaktu s aktivovaným povrchem, mají samočisticí vlastnosti, rozkládají znečisťující látky z ovzduší: NO_x, SO_x, NH_3, CO, aromatické uhlovodíky, aldehydy, organické chloridy a jiné. Aplikace nano forem TiO_2 se neustále rozšiřují a vedle již delší dobu zavedených aplikací vznikají stále nové náměty. Významná část těchto aplikací využívá fotokatalytického efektu povrchu TiO_2 pokud je osvětlen světlem nebo vysoké absorpční schopnosti vůči UV záření. Mezi rychle se rozvíjející aplikace nano 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 % nano TiO_2 je používáno pro výrobu katalyzátorů. Velmi čistý nano oxid titaničitý je vhodným prekurzorem pro výrobu $DeNO_x$ katalyzátorů, katalyzátorů pro Clausův proces odsíření ropy a zemního plynu, pro oxidaci SO_2 na SO_3, katalyzátorů pro epoxidaci olefinů, pro Fisher-Tropshovy syntézy, konverzi o-xylenu na ftalanhydrid, konverzi toluenu na benzaldehyd, pro parciální oxidaci CH_4 na formaldehyd nebo hydrodesulfurizaci.

Potřeby v oblasti výzkumu a očekávané výstupy
Aplikace dostupných přechodových a hlavních skupin kovů v zeolitech (Zn, Cu, Ga atd.) otevírá nové zajímavé možnosti pro nové transformace plynů a kapalných fází, např. metanolu, olefinů apod. Nové procesy konverze metanu založené na homogenních nebo bio-katalyzátorech ukazují zajímavé vyhlídky, ekonomika těchto procesů však vyžaduje zlepšení. Kombinace s pevnými (foto) katalyzátory vede ke zvýšení rychlosti reakce nebo cyklizaci, což je další vznikající oblast vývoje.
Vzhledem k nízkým reaktivním nebo dokonce inertním molekulám, jako je oxid uhličitý, dusík nebo alkany, počet účinných katalytických postupů pro jejich použití jako suroviny téměř neexistuje. V nejlepším případě vyžadují velmi drsné podmínky. Bližší pohled na dosavadní vývoj katalýzy ukazuje, že právě ty substráty, které vykazují nepotřebnou chemickou inertnost jako CO_2, N_2 nebo C_nH_{2n+2}, nebyly zkoumány extenzivně. Zatímco položky jako "hydrogenace a katalýza" vykazují v literatuře mnohem větší dopad v souladu s vodíkem za přítomnosti vhodných katalyzátorů. Jeden budoucí směr v této oblasti by tedy měl směřovat k modifikaci inertních molekul, jako je oxid uhličitý, dusík nebo alkány, které mohou být efektivně přeměněny na komoditní nebo speciální chemikálie.
Katalyzátory metalocenového typu umožňují za přítomnosti kokatalyzátoru polymeraci i kopolymeraci etylenu a vyšších olefinů, polymeraci norbornenu, kopolymeraci 1,5-hexadienů, polymeraci vinyleterů a isobutylenu a v neposlední řadě styrenu na vysoce stereoregulární syndiotaktický polystyren. CGC katalyzátoru (ansa- cyklopentadienylamido sloučeniny kovu ze 4. skupiny přechodové řady prvků) je vhodný pro kopolymeraci etylenu se styrenem a monocyklopentadienylové sloučeniny titanu pro polymeraci styrenu na syndiotaktický polystyren. Katalyzátory na bázi metalocenů vykazují velmi specifické charakteristiky. Kokatalyzátory (např. methylaluminiumoxid) jsou obecně používané při polymeraci. Pátou generaci katalyzátorů pro výrobu polyetylenu lze kombinovat s Ziegler-Nattovými katalyzátory, což vede k četným novým možnostem.

Prioritní výzkumná témata

- další rozvoj heterogenní a homogenní katalýzy
- vývoj deoxygenačních katalyzátorů pro výrobu motorových paliv a surovin pro petrochemii a průmysl na bázi obnovitelných surovin
- katalyzátory páté generace pro výrobu polypropylenu
- konverze vysokovroucích zbytků z rafinérských a dalších procesů na produkty s vyšší přidanou hodnotou
- vývoj výroby aplikací metalocenových katalyzátorů
- vývoj heterogenní katalýzy na bázi Raney Ni a Co, katalyzátorů na bázi Cu a Cr
- rozvoj homogenní katalýzy - katalyzátory Wilkinsonova typu, na bázi Ir a Rh, komplexní sloučeniny přechodových kovů, binukleární katalyzátory

3.3.2.3. Katalýza za čistší a udržitelnou budoucnost

Problémy a příležitosti

Katalýza sehrává nezastupitelnou úlohu v ochraně životního prostředí a zdraví lidí nejenom v chemickém průmyslu, ale také v energetice, automobilovém průmyslu a v řadě dalších odvětví. Katalýza je tedy klíčovou technologií, která umožňuje čistou a udržitelnou budoucnost, a proto je nutné v těchto oblastech intenzivně provádět výzkum. Byly identifikovány následující hlavní směry:

a) Katalýza environmentálních technologií. Tato oblast zahrnuje například: environmentální heterogenní katalýzu, katalytické spalování, oxidaci VOC a Cl-VOC, odstraňování organochlorovaných sloučenin a snižování emisí ze spalování. Dále vývoj nových fotokatalyzátorů a fotokatalytických technologií pro čištění vody a vzduchu a pro sterilizaci ve zdravotnictví a hygieně.
b) Katalýza ke zlepšení udržitelnosti chemických procesů a zlepšení výrobních procesů hlavních meziproduktů a chemických produktů. To zahrnuje snahu o posun směrem ke 100%ní selektivitě katalyzátorů při navrhování nového procesu pro efektivitu zdrojů a energie.
c) Nové katalytické procesy k snížení ekologického dopadu nebo rizika výroby speciálních chemických látek (včetně katalyzátorů pro asymetrické syntézy, organokatalýzy a enzymatického procesu, tandemového procesu)

Některé z těchto "konvenčních" oblastí, v nichž je potřeba podporovat další výzkum a vývoj, jsou následující:

- čistší paliva při rafinaci;
- ekologická katalýza: odstranění hlavních znečišťujících látek na nízké úrovně, jako jsou NOx, CO, uhlovodíky, SOx , prachové částice a aerosoly;
- přeměna uhlovodíkových surovin na komoditní chemikálie a materiály s vyšší selekcí pro snížení emisí CO_2;
- nové katalytické a ekologičtější procesy pro speciální chemikálie; návrh a sestavení robustních chemo-, regio- a stereoselektivních heterogenních katalyzátorů.

Pro ochranu životního prostředí, zejména v oblasti vodního hospodářství, jsou významné pokročilé oxidační procesy, které mohou odstranit biologicky obtížně odbouratelné persistentní organické látky. Rozvoj membránových separací, fotokatalytického čištění ovzduší jsou další významné směry současného vývoje. Dalším budoucím trendem v této oblasti je modifikace inertních molekul jako je oxid uhličitý, dusík nebo alkany, které mohou být efektivně přeměněny na komoditní nebo speciální chemikálie.

Vylepšená prediktivní schopnost výpočetního modelování a rostoucí využívání modelování k předvídání skutečných vlastností katalyzátorů jsou hnacím motorem racionálního návrhu katalyzátoru, jejich charakterizace a testování. Úkolem je integrovat výpočty „Density

functional theory (DFT)“, simulace molekulární dynamiky a modelování reaktorů v různých měřítcích.

Potřeby v oblasti výzkumu a očekávané výstupy
Vzhledem k rozmanitosti chemických technologií a výrobků můžeme souhrnně potřeby výzkumu v této oblasti popsat klíčovými slovy následovně:

- homogenní a heterogenní katalýza, fotokatalyzátory, asymetrická katalýza, chemokatalýza, enzymatická katalýza, biokatalýza, chirální katalyzátory, hybridní materiály, nízkoteplotní katalýza, micelární katalýza, hydrodehalogenace, organo katalýza, inteligentní katalyzátory, automobilové katalyzátory, aplikace syntetických zeolitů, katalyticky aktivované povrchy, tandemová katalýza, redox aktivní katalyzátory a celá řada katalyzátorů pro polymerace.
- zavedení nových reaktorových technologií, jako jsou mikrostrukturní reaktory, nano reaktory, využití membránových separací a aplikací modelování.
- nahradit používání anorganických solí a stechiometrických korespondujících látek a omezit těžkopádné separační nebo purifikační postupy nahrazením ekologicky nevhodných oxidantů (na bázi stechiometrických solí kovů nebo aktivního chlóru) procesy založenými na udržitelných druzích oxidace (H_2O_2, ozon, kyslík, vzduch) aktivované heterogenními katalyzátory.
- ačkoli některé z těchto technologií jsou již zavedeny v praxi, nové oblasti, zejména pro katalytické čištění pitné vody a odpadních vod, a rostoucí požadavky na nižší úroveň emisí vyžadují další VaV.
- vylepšená prediktivní síla výpočetního modelování a rostoucí využívání modelování k předvídání skutečných katalyzátorů jsou hnacím motorem racionálního návrhu katalyzátoru, charakterizace a testování.
- organokovové komplexy, imobilizované organokovové katalyzátory nebo molekulové katalyzátory.
- syntéza pokročilých a hybridních katalytických systémů s přizpůsobenou reaktivitou.
- katalýza pro materiály se specifickými vlastnostmi (elektronické, fotonické, magnetické).
- syntéza pokročilých a hybridních katalytických systémů s přizpůsobenou reaktivitou.
- funkční nano-architektury a nanočástice (také polymetalické a nano klastry) v katalyzátorech, struktury jádra-pláště, duté kuličky, tandemová katalýza.
- vývoj nových organických a anorganických hybridních katalyzátorů.

3.3.2.4. Katalytická úprava vody a čištění odpadních vod

Současná technologie úpravy vody a odpadních vod musí být vylepšena, aby byly splněny rostoucí požadavky budoucnosti, a to i z pohledu katalyzátorů. Pesticidy a jejich metabolity, halogenované nebo halogenové uhlovodíky, jako je metyl-terc.-butyleter (MTBE), dusičnany a farmaceuticky nebo endokrinně aktivní látky ve vodách dramaticky vzrůstají. Fotokatalýza je potenciální velice čistá technologie, ale existují různá omezení, zejména nízká intenzita slunečního světla. Rozvoj reálných průmyslových aplikací se proto musí řešit vývojem nových katalyzátorů s vysokou aktivitou ve viditelné oblasti spektra, bez produkce odpadů a toxicity a snadné recyklovatelnosti.
Rozšiřování biologických procesů také zvyšuje potřebu efektivních technologií pro čištění vody, protože dopad biotechnologií na vodní systém je mnohem větší než z výrob využívající fosilní suroviny. Například odpadní voda, která ještě obsahuje organickou látku, může být

použita jako surovina (zálivky se stimulátory růstu). Typickým příkladem je použití odpadní vody obsahující těkavé mastné kyseliny (VFA). Tyto VFA mohou být převedeny mikroorganismy na polyhydroxyalkanoáty (PHAs). PHA jako takové mohou být použity jako odbouratelné polymery, i když je třeba jejich vlastnosti zlepšit. Alternativně mohou být použity jako suroviny pro výrobu chemikálií pomocí chemokatalytických procesů. Použití odpadních vod z biotechnologie v procesu výroby vodíku pomocí reformování vodní fáze je další možností.

Prioritní výzkumná témata

- zvyšování selektivity a dlouhodobé stability katalyzátorů za účelem snížení obsahu dusičnanů v podzemních a odpadních vodách;
- optimalizace katalyzátorů pro hydro-dechloraci chlorovaných uhlovodíků;
- vývoj katalyzátorů pro oxidaci amoniaku na dusík za mírných reakčních podmínek;
- rozšíření rozsahu oxidačních katalyzátorů na bázi železa, např. začleněním do syntetických zeolitů;
- zavedení nových reaktorových technologií, jako jsou mikrostrukturní reaktory, které mohou nabízet vyšší účinnost, kontinuální režim, bezpečný provoz s možností snížit náklady;
- heterogenní fotokatalýzy řešit pro redukce CO_2;
- fotokatalytický rozklad N_2O, NH_4OH, NO_x na katalyzátorech na bázi TiO_2 připravených konvenčním i nekonvenčním typem přípravy;
- redox aktivní katalyzátory, jako jsou metaloporfiny, imobilizované na vhodných koordinačních nerozpustných nosičích pro sanaci průmyslových odpadních vod;
- vývoj koloidních činidel a katalyzátorů, které jsou vhodné pro in situ aplikace v kontaminovaných podzemních vodách - nanokatalýza, stejně jako nanokompozity.
- aplikace pokročilých oxidačních procesů pro odstraňování biologicky obtížně odbouratelných persistentních organických látek;
- využití membránových separací v ochraně životního prostředí;
- strukturované katalyzátory s aktivní oxidovou vrstvou pro odstraňování plynných polutantů;
- vývoj katalytického čištění odpadní vody v domácnostech.

3.3.2.5. Katalýza pro hygienu a biologickou bezpečnost

Katalýza a fotokatalýza mohou mít určitou roli při řízení biologických rizik například v nemocnicích nebo komerčních provozech prostřednictvím technologií pro sterilizaci povrchů nebo klimatizačních systémů. S rostoucím množstvím bakterií rezistentních vůči lékům může být stále důležitější vytvořit hygienické prostředí v zdravotnických zařízeních, v komerčních budovách a školách nebo ve veřejné dopravě. Katalyticky aktivované povrchy nebo povrchové úpravy, antibakteriální přípravky na bázi nanomateriálů stejně jako sterilizace vody a vzduchu mohou poskytnout řešení v těchto oblastech.

Prioritní výzkumná témata:

- Katalyticky a fotokatalyticky aktivovaná činidla pro sterilizaci povrchů a vody, včetně kondenzovaných proudů vzduchu z klimatizace
- vývoj katalytických samočisticích povrchů pro vnitřní stěny budov
- sterilizace parami peroxidu vodíku (VHP postup)

3.3.2.6. Zpracování průmyslových plynů

Úprava průmyslových plynů je další velkou příležitostí pro katalýzu v oblasti ekologických technologií. Pomocí katalyzátorů pro čištění vzduchu je řada různých emisí snižována řadu let. Dnes je ve většině případů cílem dosáhnout nebo překračovat zákonné limity emisí par organických rozpouštědel, oxidů dusíku, SO_2, dioxinů nebo oxidu uhelnatého. V poslední době je pozornost věnována snižování emisí skleníkových plynů, včetně CO_2. Metan a oxid dusný (N_2O), i když jsou vypouštěny v poměrně nízkých koncentracích, mají skleníkový efekt vztažený na molekulu několikanásobně vyšší než oxid uhličitý. Moderní vývoj katalyzátoru nabízí zde významný potenciál také pro udržitelné snížení emisí skleníkových plynů.
Jedním z úspěšných příkladů je použití katalyzátorů na snížení oxidu dusného z výroby kyseliny dusičné, což je aplikace, která již dnes představuje úsporu přibližně 10 milionů tun CO_2 ekvivalentů ročně**.**
Je třeba řešit problematiku heterogenních fotokatalytických reakcí jako fotokatalytické redukce CO_2, fotokatalytický rozklad emisí N_2O, NH_3, NO_x na katalyzátorech na bázi TiO_2 připravených konvenčním i nekonvenčním typem přípravy.

Prioritní výzkumná témata

- Katalytický rozklad N_2O ve strukturovaných katalyzátorech a reaktorech
- Využití membránových separací v ochraně životního prostředí
- Adsorpce oxidu uhličitého na zeolitech v závislosti na teplotě
- Vývoj aplikace fotokatalyzátoru oxidu titaničitého ve formě tenkých povlaků pro odbourávání NO a těkavých rozpouštědel (hexan, toluen) ze vzduchu
- strukturované heterogenní katalyzátory pro totální oxidaci organických látek
- Vývoj fotokatalyzátorů pro odstranění NO_x a VOC z plynů
- Světlem aktivované samočistící materiály s kompositními fotokatalyzátory na bázi TiO_2

3.3.2.7. Následné zpracování výfukových plynů ze spalovacích motorů

Asi 50 % znečištění ovzduší pochází z mobilních zdrojů (tj. dopravních vozidel) spalováním fosilních paliv. Pro zpracování výfukových plynů byly v nedávné historii používány různé typy katalyzátorů. Dnes se pro motory, které pracují v oblasti $\lambda \approx 1$ (zážehové motory) používají nejčastěji třícestné řízené katalyzátory. Motory spalující chudou směs, kde $\lambda > 1$ (vznětové, ale i moderní zážehové) vyžadují navíc použití tzv. akumulačního katalyzátoru NO_x. Snížení obsahu NO_X u nákladních vozidel se dosahuje vstřikováním kapaliny obchodního názvu AdBlue (vodní roztok syntetické močoviny) do výfuku, čímž se většina NO_X za přítomnosti chemického katalyzátoru a dostatečné teploty redukuje na vodu a dusík.
Znečištění životního prostředí způsobené lidskou činností je regulováno vládními agenturami s cílem zlepšit kvalitu ovzduší zejména v městském prostředí (viz normy EURO VI pro kontrolu emisí). Přísnější legislativní omezení (EURO VI) vyžadují přidání katalyzátorů typu De-NOx k oxidačním katalyzátorům (DOC) a katalytický filtr sazí (CSF nebo DPF). Ačkoli bylo provedeno několik výzkumů katalyzátorů pro spalování sazí a byly vyvinuty a studovány katalyzátory pro skladování NOx a současné odstraňování sazí a NOx, některé problémy však stále přetrvávají.
Mezi nimi jsou příliš vysoká teplota spalování sazí a relativně nízká skladovací kapacita NOx (NSC). Takže jak současně odstraňovat saze a NOx v oblasti s nízkou a stejnou teplotou, například 200 – 400 °C, je stále náročnou úlohou. Navíc s účinnějšími motory jsou vyžadovány buď efektivnější katalyzátory při nižších teplotách, nebo alternativně katalyzátory pracují v pre-turbo podmínkách za zvýšeného tlaku. Důležitým aspektem pro vývoj je také snížení složitosti katalytických systémů v budoucnu.

Jako nosiče katalyzátorů se nejčastěji používají keramické a kovové monolity, které potřebují nosnou vrstvu z Al_2O_3 (wash – coat). Ta výrazně zvyšuje účinky povrchu katalyzátoru. Na tuto vrstvu nanesená účinná katalytická vrstva sestává u oxidačních katalyzátorů ze vzácných kovů platiny a palladia, u třícestných katalyzátorů ještě navíc z rhodia. Platina a palladium urychlují oxidaci nespálených uhlovodíků a oxidu uhelnatého, rhodium urychluje redukci oxidů dusíku. Hmotnost vzácných kovů obsažených v jednom katalyzátoru činí podle obsahu motoru cca 1 až 3 gramy. Ke katalytickým vrstvám z platiny, palladia a rhodia jsou většinou na stejné nosiče navíc přidány speciální příměsi, které jsou schopny akumulovat oxidy dusíku. Typickými akumulačními materiály jsou např. oxidy draslíku, vápníku, stroncia, zirkonia, lanthanu nebo barya.

Zvýšená účinnost budoucích motorů přirozeně povede k nižším teplotám výfukových plynů, proto je třeba intenzivní vývoj nízkoteplotní katalýzy. Pro zpracování výfukových plynů z naftových motorů budou vyžadovány katalyzátory s téměř 100%ní konverzí při teplotách pod 100 °C. V současnosti lze tohoto cíle dosáhnout jen s nadměrnými koncentracemi drahých kovů. Proto existuje potřeba nových konceptů, které umožňují získávat nízkoteplotní činnost s malým množstvím drahých kovů.

Snižování emisí motorů s CNG palivem (CH_4). Jedním ze způsobů, jak snížit emise CO_2, je zvýšené využití CH_4 jako přepravního paliva. Hlavním úkolem pro zavedení motorů poháněných CH_4 je snížení emisí CH_4. Z tohoto důvodu jsou vyžadovány nové technologie pro katalytickou aktivaci CH_4 při nízkých teplotách za výfukových podmínek. Nejvíce úsporným provozním režimem by bylo chudé spalování CH_4. Aktivace CH_4 za přísných podmínek je však ještě náročnější než ve stechiometrických podmínkách, takže je zapotřebí nových nápadů, které by tuto výzvu překonaly.

Velkou výzvou pro výzkum katalýzy výfukových plynů je řešení rozkladu NO v přebytku kyslíku. V průběhu provozu automobilu je povrch katalyzátoru chemicky a fyzikálně namáhán, čímž dochází k nežádoucímu uvolňování vzácných kovů do životního prostředí. Průměrně během 100 000 kilometrů se z katalyzátoru vytratí 35 % drahých kovů. Nově navržený katalyzátor se zvýšenou aktivní plochou mikroskopických čistících kanálků ztratí pouze 4 % drahých kovů, současně se výrazně sníží potřeba vzácných prvků.

V ČR byl vyvinut nový materiál v podobě vlákenného sorbentu z oxidu křemičitého s velkým měrným povrchem technologií odstředivého zvlákňování, který dokáže excelentně ochránit proti vlhkosti jakýkoliv materiál a zároveň dokáže velmi dobře zachytit různé nežádoucí látky ze vzduchu a bude jej možné použít jako nosič pro katalytické nanočástice, což umožní konstrukci unikátních katalytických filtrů pro spalovací motory.

Prioritní výzkumná témata

- snížení počtu syntézních stupňů použitím multifunkčních katalyzátorů;
- snížení obsahu drahých kovů v katalyzátorech zlepšením znalostí o slinování;
- vývoj aplikací nano TiO_2 v katalýze výfukových plynů;
- nové koncepce technologického inženýrství pro recyklační katalyzátory;
- zvýšení účinnosti stávajících automobilových katalytických filtrů k odstraňování velmi malých částic;
- zlepšení výkonu katalyzátoru díky lepší kontrole mezo a mikroporozity;
- nové strategie syntézy mezo- a mikroporézních nanomateriálů se zvýšenou teplotní stabilitou;
- zvýšit dlouhodobou stabilitu automobilových katalyzátorů s vysokou aktivitou katalyzátoru, zejména v kontaktu s jedovatými látkami;
- vývoj robustních katalyzátorů pro spalování metanu za nízkých teplot, mj. pro následnou úpravu výfukových plynů na vozidlech poháněných zkapalněným zemním plynem;
    - nahradit kovy ze skupiny platiny pro konverzi metanu pro automobily používající zemní plyn k pohonu.

3.3.2.8. Katalytické spalování

Katalytické spalování je chemický proces, který využívá katalyzátor ke zrychlení požadovaných oxidačních reakcí paliva, a tím snižuje tvorbu nežádoucích produktů, zejména znečišťujících oxidů dusíku (NO_x), než které lze dosáhnout bez katalyzátorů. Katalyzátory mohou být použity pro řízení reakcí spalování buď úpravou paliva (například krakováním), oxidace paliva pro uvolnění tepelné energie nebo pro likvidací znečišťujících plynů ze spalin nebo v odplynu chemických a energetických zařízení.
Katalytické spalovací procesy přinášejí nejen racionalizovaný a nízkoemisní prostředek pro konverzi energie do hořáků, plynových turbín, reformátorů a palivových článků, ale mohou být také použity pro následné zpracování výfukových plynů v stacionárních a mobilních systémech. Katalytické spalování nabízí důležité výhody oproti spalování plamene ve vztahu ke sníženým hladinám znečišťujících látek a vyšší stupeň účinnosti.
Známé jsou aplikace v plynových turbínách (katalyzátory umožňují spalování chudých plynných směsí, snižují emise NO_x, snižují množství nespáleného paliva a snižují tepelné ztráty v důsledku nízké teploty spalování, spalování nízkokalorických plynů, katalyzátory umožňují neutralizaci organických sloučenin v odpadních plynech jejich oxidací a využitím tepelné energie. Dalšími příklady využití katalytického spalování je automobilový průmysl, katalytické odstraňování SO_2 z odplynů ve výrobnách kyseliny sírové nebo selektivní katalytické snižování NO. Katalytické spalování je další známá oblast, která však stále potřebuje určitý vývoj.
Jednou z dosud otevřených otázek je potřeba nahradit katalyzátory na bázi vzácných kovů.(Pt, Ir, Au a další). Hledání levnějších alternativních katalyzátorových materiálů ukázalo, že relativně dobré katalytické aktivity lze dosáhnout také s oxidy a smíšenými oxidy, avšak další zlepšení je žádoucí. Jedním z úkolů je udržení vysokých specifických povrchů stabilních i při vysokých teplotách (plynové turbíny). Současné výzvy ve vývoji katalytických hořáků zahrnují zlepšení v oblasti výkonnosti, zlepšení dlouhodobé stability a snížení nákladů.
Náročným technickým úkolem je vývoj katalytických systémů pro katalytické spalování za lokálních podmínek s nízkých podílem vzduchu pro výrobu vodíku a syntézního plynu (CO, H_2) pro plynové turbiny a pomocné napájecí jednotky ve vozidlech. Rozdíly v chemickém složení paliv, nestabilní provozní podmínky (změny zatížení, změna poměru vzduch / palivo) a recirkulace výfukových plynů znamenají zvláštní požadavky na katalyzátory. Významné aplikace pro katalytické spalování představuje čištění průmyslových výfukových plynů s nízkým znečištěním a následné zpracování výfukových plynů ze spalovacích motorů. Ovšem provozní podmínky týkající se paliva, koncentrace a teploty jsou zde výrazně odlišné od systémů čisté konverze energie. Zejména použití nebo příměs zemního plynu nebo paliv vyrobených z biomasy má za následek složení výfukových plynů a teploty, pro které dosud nejsou k dispozici dostatečné katalytické systémy.

Prioritní výzkumná témata

- vývoj katalyzátorů bez drahých kovů nebo katalyzátorů vyžadujících pouze velmi nízký obsah drahých kovů;
- vývoj katalyzátorů a nosných materiálů, které nabízejí vysoké specifické povrchy při teplotách aplikace nad 1100 ° C po dlouhou dobu;
- stabilizace disperzí aktivních center nebo potlačení aglomeračních a slinovacích procesů aktívních složek na povrchu katalyzátoru;
- vývoj robustních katalyzátorů pro spalování metanu při nízkých teplotách, mimo jiné pro následné zpracování výfukových plynů na vozidlech poháněných zemním plynem.;
- katalyzátory pro použití v iniciačních reaktorech pro reformování benzinu a nafty, které jsou velmi robustní a odolné vůči katalytickým jedům a koksování;

3.3.2.9. Solárně řízená chemie (SOLAR-DRIVEN CHEMISTRY)

Problémy a příležitosti

Termín "chemie založená na slunečním záření" se týká budoucího scénáře výroby chemikálií založeného na nahrazení fosilních materiálů jako zdroje energie a surovin. Pojem "solární chemie" se tak neomezuje na přímé použití fotonů, ale spíše se týká přímých a nepřímých způsobů, jakými se obnovitelná energie může přeměnit na chemickou energii.

Jeho význam se týká skladování přebytečných obnovitelných zdrojů energie, u nichž se očekává, že v příštím desetiletí bude docházet k překročení bodu zvratu. Proto jsou součástí této koncepce elektrokatalytické cesty, kdy obnovitelná energie přichází ve formě elektronů (solární panely). Lze také zvážit plazmové cesty pro výrobu chemikálií, když jsou poháněny využitím obnovitelné energie. Lze předpokládat různé způsoby získávání vodíku: bioprocesy na bázi enzymů nebo bakterií, sluneční tepelná energie nebo použití polovodičů absorbujících fotony, pokročilá elektrolýza spojená s obnovitelnou elektrickou energií, katalytické systémy v plynné nebo kapalné fázi s využitím odpadu nebo vedlejších produktů transformace biomasy a mikrobiální elektrolýzy.

Klíčovým aspektem koncepce "Solární chemie" je vytvoření krátkého cyklu využití obnovitelných zdrojů energie pro výrobu chemických látek a energetických vektorů. Toto zintenzivnění při přeměně ze sluneční energie na chemickou energii je klíčovým prvkem udržitelnosti. Změnou paradigmatu v chemické (a energetické) výrobě se jedná o posun od selektivity "uhlíkových atomů" s ohledem na výchozí surovinu na vysokou energetickou účinnost při ukládání obnovitelné energie v chemických vazbách.

V současné době se však energie převážně vyrábí z fosilních paliv, přichází nový zdroj ve formě břidlicového plynu, stávající fotovoltaické články jsou málo účinné, mají omezenou životnost a jsou relativně drahé, takže řada států musí obnovitelné energie dotovat. Probíhá však velmi intenzivní vývoj solárních článků, ale i přímých generátorů vodíku z vody s využitím solární energie, ale bude třeba vynaložit ještě mnoho úsilí ve vývoji a zejména na uplatnění poznatků VaV v průmyslovém měřítku. Katalýza v oblasti solární chemie a vývoj nových materiálů včetně katalyzátorů jsou klíčem k úspěchu. Porozumění nano-architektuře a její roli při řízení funkčních výkonů zůstává hlavním problémem katalytických nanomateriálů. Základním předpokladem nové koncepce chemického průmyslu je levná energie (v přebytku) a tedy levný vodík a CO_2 jako obnovitelný zdroj uhlíku pro celý výrobkový řetězec chemického průmyslu.

Metanol, dimethylether (DME) a oxymethylen-ethery (OME) se nacházejí na křižovatce nové energetické chemie, protože jejich výroba a použití vykazují jedinečné rysy flexibility, což je jednen z hlavních požadavků pro budoucí scénář energetické chemie. Metanol může být používán jako chemický a surovinový materiál pro velkoobjemové chemické látky a nebo jako palivo. Metanol nebo dimethylether (DME) mohou být převedeny na olefiny, metanol na propylen nebo aromáty na katalyzátorech na bázi zeolitu. Chemické látky (kyselina octová, formaldehyd a další), olefiny a aromáty pocházející z rafinérských frakcí budou postupně nahrazovány těmito alternativními surovinami.

Dostupnost alkoholů při nízkých nákladech z procesů fermentace biomasy stimuluje jejich použití jako suroviny pro výrobu jiných chemikálií (zejména etylenu odvozeného z etanolu). Kromě toho CO_2 z biopaliv a jiných procesů (např. výroby bioplynu) a tedy 100% bez fosilních paliv, je vynikajícím zdrojem uhlíku k výrobě surovin pro chemii (olefiny, zejména konverzí na methanol nebo dimethylether – DME).

Heterogenní katalýza hraje důležitou roli, protože mnoho procesů přeměny metanu, má katalytickou povahu. Významné úsilí je nutno vynaložit na vývoj nových katalyzátorů pro přímé cesty přeměny metanu na základní chemické produkty (nejdůležitější jsou etylen, benzen, metanol). Přímá valorizace metanu (tj. bez přechodu z energeticky náročného meziproduktu syntézního plynu) na kapalné palivo efektivní přeměnou na metanol nebo uhlovodíky je strategickým cílem. Snížení spotřeby energie a nákladů na výrobu syntézního plynu, například

zaváděním nových schémat procesů založených na integraci membrán, je kritickým cílem zejména pro aplikace malého a středního rozsahu.
Dalšími procesy souvisejícími s využitím metanu je výroba syntézního plynu reformováním a katalytickou parciální oxidací. Průmyslová aplikace v současné době privileguje reformační procesy díky lépe zavedené technologii, a to navzdory vysoké endotermičnosti zúčastněných reakcí, které dělají procesy docela energeticky náročné, pokud se nerealizuje intenzivní využití energie (vyžadují se velmi velká zařízení).
Katalytická parciální oxidace metanu představuje možnou alternativu k reformačním procesům, a to díky exotermičnosti reakce a také výrobě syntézního plynu s poměrem H_2:CO 2:1, vhodným pro výrobu metanolu a Fischer Tropsch syntézy. Vzhledem k současnému zájmu průmyslu by měly být vyvinuty nové katalytické systémy pro selektivní parciální oxidaci metanu, které by měly být odolné vůči ukládání uhlíku na povrchu a vykazovat vysokou konverzi metanu při nízké teplotě a vysoké selektivitě vodíku. Takové cíle lze řešit vhodnou volbou nosiče a aktivního katalytického kovu, zejména niklu, případně dalších dopantů.
Růst výroby břidlicového plynu jako suroviny vytváří nové investiční příležitosti pro přeměnu metanu na metanol, etanu na etylen a propanu na propylen (a případně butanu na C4 olefiny / diolefiny), Je však třeba zvýšit účinnost těchto konverzí. Existuje příležitost pro lepší dehydrogenaci nebo oxydehydrogenaci pro C2-C4 alkány a investiční příležitosti pro metanol a olefiny. Všechny oxidační konverze uhlovodíků, jako je oxidační vazba nebo oxidační dehydrogenace, trpí snižující se selektivitou s rostoucí konverzí suroviny. Takové problémy však nelze vyřešit samotným vývojem katalyzátoru. Tyto reakce jsou typickými příklady problémů, které lze řešit pouze společným interdisciplinárním úsilím s ohledem na všechny jevy od molekulární až po úroveň procesu.
Použití přechodných a hlavních skupin kovů v zeolitech (Zn, Cu, Ga atd.) otevírá nové zajímavé možnosti pro plyny a kapalné fáze, transformace metanu na produkty jako metanol, olefiny atd.
Nové procesy konverze metanu založené na homogenní nebo biokatalyze ukazují zajímavé vyhlídky, přestože procesní ekonomika je stále problémem. Kombinace s pevnými (foto) katalyzátory ke zvýšení rychlosti reakce anebo uzavření reakčního cyklu je další sledovanou oblastí.
Lze také zvážit plazmové cesty pro výrobu chemikálií, když jsou poháněny využitím obnovitelné energie. Je zapotřebí vytvořit nový koncepční návrh katalýzy pro práci v synergii s plazmou. Aktuální katalyzátory nejsou vhodné pro efektivní práci s radikálovými a vibračně excitovanými prvky přítomnými v plazmě.

Potřeby v oblasti výzkumu a očekávané výstupy
Navrhování nových katalyzátorů a katalytických elektrod pro práci se zdroji obnovitelné energie a přesun z laboratoře do průmyslového měřítka (například návrh 3D elektrod pro zintenzivnění výroby) je výzvou. Také by mělo být řešena otázka ekonomiky z rozsahu, protože obnovitelná energie se bude stále více vyrábět na úrovni domácností, avšak pro skladování obnovitelné energie v chemických látkách (např. Sabatierova reakce) vyžaduje velké reaktory.
Téměř neexistují účinné katalytické procesy pro využití nízko reaktivních nebo dokonce inertních látek jako jsou oxid uhličitý, dusík nebo alkány pro jejich použití jako surovin, v nejlepším případě vyžadují velmi drsné reakční podmínky. Navíc tyto látky nebyly doposud v této souvislosti podrobně studovány. Proto jako jeden budoucí směr v této oblasti by měl směřovat k modifikaci inertních molekul, které mohou být efektivně přeměněny na komoditní nebo speciální chemikálie.
Existuje mnoho dalších případů nových směrů katalýzy, a to jak fotochemické nebo fotoelektrické katalytické výroby obnovitelného H_2, tak nových zařízení k distribuované výrobě chemických látek nebo paliv, ale také vývoj nových katalyzátorů pro přímou konverzi metanu.
Nové syntetické katalytické strategie pro chemii se týkají například fotokarboxylaci nebo

integraci chemo nebo elektro katalytických kroků (například při regeneraci kofaktorů v enzymatických katalytických cyklech).
Některé ze zvýrazněných oblastí mají za následek zlepšení stávajících katalyzátorů nebo jejich přizpůsobení novým surovinám, jako je přechod z ropy na biologické suroviny. Některé oblasti, například při přímé konverzi metanu nebo při výrobě paliv, se však v katalýze znovu objevují. Existuje řada dalších příkladů nových směrů katalýzy, a to jak fotoelektrické nebo fotochemické katalytické výroby obnovitelné H_2, nebo nových katalyzátorů pro přímou konverzi metanu, tak nové syntetické katalytické strategie pro chemii, například fotokarboxylace nebo integrace chemo- nebo elektro-katalytických kroků.
Biokatalyzátory umožňují nové chemické reakce, pracují za mírných reakčních podmínek a snižující riziko vzniku vedlejších produktů Operační stupně se obvykle zjednodušují. Biokatalýza je bezesporu považována za důležitý nástroj průmyslových syntéz některých základních chemikálií, nicméně počet a diverzita aplikací jsou zatím omezené, zřejmě z důvodů omezené dostupnosti vhodných biokatalyzátorů. Aplikace biokatalýzy je v současnosti v různém stupni vývoje, ale nejvíce se uplatňuje v organické chemii, léčivech, výrobě čistých chemikálií a čisticích prostředků.
Zdá se, že nejlepší využití biokatylýzy bude v budoucnu v kombinaci s chemickou katalýzou. Je snaha o integraci homogenní, heterogenní a bio-katalýzy.
Je zapotřebí vytvořit nový koncepční návrh katalýzy pro práci v synergii s plazmou. Aktuální katalyzátory nejsou vhodné pro efektivní práci s radikálovými a vibračně excitovanými prvky přítomnými v plazmě.

Prioritní výzkumná témata

- nové katalytické systémy pro selektivní parciální oxidaci metanu;
- příprava a charakterizace nanostrukturovaných vrstev oxidů titanu a železa pro fotoanody;
- příprava nanotrubic TiO_2 a Fe_2O_3 pro fotoelektrochemický rozklad vody;
- světlem aktivované nano strukturované materiály pro solární produkci vodíku;
- vyvinout biokatalyzátory, které jsou lepší, účinnější a lacinější než běžné chemické katalyzátory a zvýšit jejich teplotní stabilitu, aktivitu a kompatibilitu k rozpouštědlům;
- vývoj nových nanoporézních adsorbentů a katalyzátorů;
- vývoj průmyslové výroby nanostrukturních materiálů pro katalytické, elektro katalytické a sorpční aplikace;
- vývoj vložení katalytického centra do nanovláken a uhlíkových nanotrubic (různé modifikace povrchu vláken, templátování);

3.4. Procesy a zařízení

Intenzifikace procesů – účinný nástroj pro udržení konkurenceschopnosti chemických výrob

Intenzifikace chemických procesů je obecně vnímána z pohledu bezpečného provozu, čistoty produkce, zmenšení zařízení, které je konkurence schopné v porovnání se současným stavem techniky. Intenzifikace procesů tak poskytuje efektivní a životaschopné řešení, které jen netransformuje neefektivní redukci spotřeby energie. Koncepce intensifikace procesů byla nastartována v 70. letech za účelem snížení investičních a provozních nákladů.
Jednou z možností je intensifikace procesů, vyvolaná kavitačními jevy v různých typech reaktorů. Kavitační efekty lze vyvolat přidanou intenzivní energií na podporu toku reakčních médií reakčním prostorem nebo výhodně také ultrazvukem.

V principu se intenzifikace procesů může soustředit jak na jednotlivé prvky zařízení (reaktory, zařízení pro nereaktivní operace zahrnující fyzikální transformace hmoty), tak na aplikace různých metod:

- Multifunkční reaktory (s obsahem katalyzátoru a více interagujících fází)
- Hybridní separace (reaktivní destilace, extrakce, krystalizace apod.)
- Aplikace alternativních energetických zdrojů (intenzifikace sdílení hmoty, tepla a hybnosti ve vícefázových soustavách s použitím ultrazvuku, UV záření, mikrovlnné energie apod.)
- Jakékoliv další metody

Intensifikace procesů se stává důležitou oblastí kvůli svému potenciálu získat inovativní a více udržitelné alternativy návrhu procesu. Ve fázi vývoje intenzifikace procesu typicky zahrnuje snížení počtu zařízení (typicky jednotkových operací), které zlepší reakční kinetiku, zvýší lepší energetickou účinnost, sníží investiční náklady a zlepší bezpečnost procesu. Významné je také hledisko inherentní bezpečnosti chemických procesů v souvislosti s jejich udržitelností. Je evidentní, že procesy, prováděné v menším měřítku jsou nepochybně bezpečnější. Velkokapacitní jednotky, zpracovávající nebezpečné látky byly v minulém století hlavními příčinami nejvážnějších chemických havarií. Intenzifikace procesů umožňuje dramaticky snížit velikost výrobní jednotky, zlepšit reaktor, resp. výtěžek, snížit nástřik surovin apod. Současně se dosáhne vyšší bezpečnosti produkce, která není bezpečná kvůli vysoké reakční rychlosti, nebezpečně exotermní reakci, resp. když reaktanty jsou příliš toxicky nebezpečné. Dalším důležitým benefitem intenzifikace chemického procesu lze očekávat ve zlepšení dopadu provozu na životní prostředí, spotřebu energie a také zlepšení firemní image ve veřejnosti inovací výroby, přívětivé z pohledu ochrany životního prostředí.

Principy intenzifikace procesů:

- Maximalizace účinnosti intramolekulárních a mezimolekulárních přeměn a interakcí. Jedná se o lepší řízení frekvence kolizí, vzájemnou orientaci molekul při jejich kolizích a jejich vlastní energie.
- Optimalizace hnacích sil přenosových jevů v každém měřítku reakčního systému a maximalizace specifických mezifázových povrchů, na které hnací síly působí.
- Přísun, resp. odvod energie z místa transformace vazeb molekul surovin na produkty.
- Maximalizovat synergické efekty dílčích kroků procesu s využitím multifunkčnosti zařízení.

Intenzifikace procesů s využitím modifikace zařízení může být realizována několika variantami:

- s použitím multifunkčních zařízení
- zvýšením reakčních rychlostí s použitím sofistikovanější konfigurace reaktoru
- aplikací netradičního energetického zdroje

Následující vybrané příklady ilustrují způsoby neinvestiční intenzifikace procesu jednoduchou úpravou reaktorového uzlu výrobní jednotky, nebo netradičním řešením uspořádání reaktoru. Úprava tvaru, resp. velikosti částic katalyzátoru a jeho orientované nasypání do lože etážového reaktoru.

Reaktivní destilace

Integrace katalytické přeměny a separace reakční směsi umístěním lože katalyzátoru do reaktivně destilační kolony výrazně snižuje počet aparátů v konvenčním procesu při spojení reaktoru a uzlu pro zpracování reakční směsi se separací reakčních produktů. Reaktivní destilace představuje moderní proces syntézy řady produktů, vznikajících rovnovážnou reakcí, k jeho výhodám patří:

- dosažení vyšší konverze reakce než odpovídá chemické rovnováze,

- jednoduchost technologie s menším počtem separačních stupňů,
- integrace chemické reakce se separací produktů v multifunkčním aparátu,
- aplikace heterogenního katalyzátoru s dlouhodobou aktivitou,
- pro exotermní reakce lze reakční teplo využít v loži katalyzátoru pro destilaci reakční směsi.

Alkylacetáty představují důležitou skupinu technických rozpouštědel, přívětivých k životnímu prostředí (např. extrakční činidla, nátěrové hmoty). Jejich syntéza esterifikací vychází z kyseliny octové a příslušného alkoholu, katalyzovaných silnou kyselinou, nebo výhodně kyselým iontoměničem. V případě rovnovážných esterifikací lze překonat chemickou rovnováhu a dosáhnout vysoké konverze reakce způsobem oddělování jednoho z reakčních produktů, vody nebo esteru z reakčního prostoru. Elegantní řešení představuje umístění lože heterogenního katalyzátoru do kontinuálně provozované rektifikační kolony. Reakční zóna kolony je nejčastěji tvořena orientovanou výplní s drátěnou strukturou naplněnou částicemi katalyzátoru. Orientovaná struktura v koloně kombinuje přítomnost katalyzátoru nezbytného pro chemickou reakci s účinnou rektifikační separací reaktantů a produktů.

Rotační diskový reaktor

Reaktor s rotujícím diskem (spinning disc reactor) byl navržen coby nekonvenční průtočný promíchávaný reaktor za účelem intenzifikace procesů s velmi rychlými a silně exotermními reakcemi mezi dvěma kapalinami jako jsou nitrace, sulfonace, polymerace. Jedná se o případy reakcí, které jsou silně limitované sdílením hmoty a tepla, přičemž viskozita reakční směsi obvykle narůstá až o několik řádů s rostoucí konverzí reakce. Tento efekt značně komplikuje dokonalé promíchávání reakční směsi. V případech polymeračních reakcí dochází pak k možnosti tvorby horkých zón v reakční směsi, které významně snižují kvalitu produktu. Tuto nevýhodu může odstranit aplikace rotačního diskového reaktoru, který je konstruován tak, že horizontálně rotující temperovaný disk unáší reakční komponenty na vnitřní, temperovanou stěnu reaktoru a tím se vytváří na ní tenký stékající film reakční směsi.

Monolitický reaktor

Tento typ reaktoru je často používán pro katalytické reakce, probíhající v plynné fázi. Je vybaven strukturovanými paralelními kanálky, na jejichž stěnách je zakotven příslušný katalyzátor. Nalezly široké uplatnění nejen v automobilovém průmyslu pro proces čištění spalin zážehových i vznětových motorů, ale mohou být nasazeny i pro vícefázové reakční systémy kvůli jejich velmi nízké tlakové ztrátě, o jeden až dva řády nižší, než vykazují konvenční reaktory s nasypaným ložem katalyzátoru. Dále vykazují 1,5 až 4 násobnou styčnou plochu katalyzátoru, vztaženou na jednotkový objem reaktoru. Kvůli velice nízké difuzní dráze reakčních složek v tenké katalytické vrstvě katalyzátoru v kanálcích je možné v řadě případů dosáhnout podstatně vyšších hodnot selektivit procesu, kterou jinak snižuje odpor ke sdílení hmoty difuzí v tabletovaných, nebo extrudovaných částicích katalyzátorů. Monolitický reaktor může být atraktivní náhradou za reaktory se zkrápěnou vrstvou katalyzátoru pro hydrogenační a hydrorafinační procesy.

Reaktor se statickými mixery

Aplikace statických mixerů do konvenčních trubkových reaktorů se stacionárním ložem katalyzátoru představuje inovativní myšlenku pro zvýšení účinnosti procesu. Jejich role spočívá v úpravě/modulaci charakteru proudění reakční směsi ložem s cílem dosáhnout zlepšení jejího radiálního promíchávání při současném zvýšení rychlostí sdílení hmoty a tepla v reaktoru. Rovnoměrnější tok reakční směsi na průřezu a podél reaktoru současně minimalizuje riziko tvorby horkých zón ve vrstvě katalyzátoru, které mohou iniciovat vážné havárie procesu. Kvůli lepšímu řízení teploty a turbulentnímu toku na lokální úrovni v loži katalyzátoru poskytuje toto uspořádání solidní účinnost a vyšší selektivitu procesu, což má eminentní význam při syntézách

farmaceutik. V současné době jsou na trhu různé varianty statických mixerů od řady výrobců v čele s firmou Sulzer ChemTech.

Mikroreaktory
Mikroreaktorové systémy obsahují sub-milimetrové komponenty, ve kterých kontinuálně proudící směs podléhá reakční přeměně. Mikroreaktory jsou inherentně vysoce bezpečné, neboť mohou pracovat i s malými objemy agresivních látek, přičemž vysoké rychlosti sdílení hmoty a tepla v tomto případě zaručují vysoký výtěžek. Změnu měřítka mikroreaktoru lze dosáhnout samozřejmě zvětšením, nebo snížením počtu kanálků ve voštinové struktuře katalyzátoru. Hlavní výhodou těchto inovativních systémů nových reaktorů spočívají v rychlém a účinném promíchání reagentů, efektivnější sdílení tepla vzhledem ke konvenčním chemickým reaktorům, krátké reakční době, malém množství komponent pro syntézy, což je důležité pro optimalizaci reakčních podmínek (rychlost nástřiku, reakční doba, tlak, teplota) a bezpečné i přesné měření. Na příklad pro nitrace se konvenčně používá přebytek kyselin dusičné a sírové. Tato reakce je velmi exotermní a tak je obtížné řídit teplotu, pokud je syntéza provozována ve velkém objemu. Použití mikroreaktoru s uniformní teplotou při reakci pak představuje atraktivní řešení tohoto problému.

Rotující lože katalyzátoru: Zvýšení rychlosti sdílení hmoty v heterogenních reagujících soustavách může být iniciováno zrychlením na principu centrifugy. Rotující lože katalyzátoru v reaktoru představuje další inovační alternativu pro intenzifikaci procesů, jako jsou čištění plynů, destilace, nebo aplikační syntézy nano-materiálů. Toto neobvyklé uspořádání, které je charakteristické náhradou obvyklé gravitace za odstředivou sílu cirkulačního pohybu, je slibné relativně nízkými investičními náklady. Slibnou variantou je na příklad nejen desulfurizační proces v rafineriích, ale obecně separační procesy absorpce, destilace, stripování, extrakce atd.

Kavitační jevy pro intenzifikaci procesu – příklady aplikací
Extrakce, emulzifikace a krystalizace podporované ultrazvukem (ultrasonic extraction, emulsification). Kavitační kolaps prázdného prostoru, vytvořeného energetickým tokem lokální změnou rychlosti proudění tekutiny, nebo ultrazvukem může ovlivnit fyzikálně chemické transformace v různých systémech. Vytvořené kavity obvykle obsahují páru kapalného média nebo rozpuštěných těkavých složek nebo plynu. V průběhu kolapsu jsou tyto páry vystaveny extrémním podmínkám – teplotě a tlaku, způsobujících fragmentaci molekul či tvorbu radikálů, které mohou následně reagovat již v kavitách, či následně v objemu kapaliny. Náhlý kolaps bublin vyvolává následně střižné síly v jejich okolí, takže dochází buď k destrukci materiálu, dispergovaného v kapalině, nebo rovněž k porušení mezní vrstvy u fázových rozhraní, které významným způsobem usnadní transport hmoty a tepla v daném místě. Klíčovými parametry pro kavitační proces jsou výběr rozpouštědla a operační teplota. Při zvýšeném tlaku par rozpouštědla se snižuje maximální teplota a tlak pro kolaps bublin. Tedy, pokud kavitační kolaps je primární podmínkou aktivace molekul, je doporučeníhodná nízká operační teplota a to zvláště při použití nízkovroucího rozpouštědla. Avšak, je-li reakční rychlost omezována pouze přenosovými jevy, pak srovnatelného efektu lze dosáhnout mechanickým mícháním s vysokou frekvencí otáček míchadla vhodného typu. Kavitační aktivace v heterogenní soustavě kapalina-tuhá látka přináší vedle kolapsu bublin také strukturální a mechanické defekty u povrchu tuhé fáze. Kolaps na tuhém povrchu zvláště v případě prášků rezultuje v jejich fragmentaci. Operace s ultrazvukem přispívá tak k vyššímu mezifázovému povrchu pro reakci, podporuje jeho aktivaci a současně zvyšuje intensitu promíchávání reakčního prostoru a přenos hmoty. Současně je třeba upozornit, že i přítomné rozpouštědlo může podléhat energetické aktivaci a tudíž nemusí být za reálných podmínek úplně inertní.

V soustavách omezeně mísitelných kapalin kavitační kolaps způsobí vedle intensivního míchání rovněž rozrušení mezifázového povrchu. Výsledkem pak je tvorba velmi jemných, stabilních emulzí, což následně zvýší mezifázový povrch a to může příznivě urychlit reakci mezi oběma fázemi. K vytvoření stabilních emulzí tak není v některých případech nutné dodávat do soustavy surfaktanty. Toto je zvláště výhodné v případech použití katalyzátorů přenosu fází ve dvoufázových reakčních soustavách.
Použití chemických aparátů s ultrazvukovým generátorem představuje lukrativní přístup k intenzifikaci procesu při různých chemických i fyzikálních operacích. Ultrazvukem asistované chemické operace souvisejí také s koncepcí „zelené“ chemie v následujících parametrech:

- Zvýšení rychlosti a selektivity procesu
- Aplikace méně problémových rozpouštědel
- Nižší energetické náklady
- Snížení operační doby
- Zpracování obnovitelných surovinových zdrojů
- Hlubší využití surovin a katalyzátorů

3.5. Zpracování ropy

Úvod
Podnikání v rafinérském/petrochemickém průmyslu představuje aktivitu zásadní pro život každého člověka v globalizovaném světě. Transformuje energetické suroviny do velmi kvalifikovaných produktů, které zásadním způsobem přispívají k mobilitě (motorová paliva) a zvyšování životní úrovně obyvatel (suroviny pro petrochemický průmysl). Tvoří významný článek logistického toku energie z ložisek ke spotřebitelům a dokázalo reagovat na zásadní požadavky týkající se dopadů rafinérského/petrochemického podnikání na životní prostředí (zelená chemie, uhlíková stopa, čistá paliva, zakomponování biopaliv do rafinérských/petrochemických produktů). Rafinérsko/petrochemické podnikání se rozvíjí již mnoho desítek let a nezdá se pravděpodobné, že by v nejbližší budoucnosti mohlo být nahrazeno jiným řešením.
I v tomto případě již řadu let chemické a inženýrské vědy a chemické technologie významně přispívají k udržitelnému rozvoji tohoto průmyslového oboru při vývoji inovativních postupů a technologií využití biomasy pro energetické účely (tepelné aj. energie), pro dopravu (výroba pohonných hmot s přídavkem biosložek) a jako suroviny pro zpracovatelský průmysl.
Důvodem je dlouhodobá vyčerpatelnost surovin pro výrobu fosilních paliv, jejichž zásoby na Zemi jsou omezené (stejně jako alternativního zdroje: zemního plynu). Materiálové toky pro výrobu motorových paliv a surovin pro navazující petrochemický průmysl (těžby, přeprava, výroba, spotřeba a příp. recyklace: tzv. koncept „well-to-wheel“) by měly být posuzovány zejména podle energetické bilance a úplné analýzy životního cyklu (LCA). Úspora energie v oblasti spotřeby proto znamená nejen nižší obsah energie ve výrobku, ale také uplatnění spalovacích motorů s vyšší účinností.
Pod pojmem trvale udržitelný rozvoj se rozumí „takový rozvoj, při němž každá současná generace bude uspokojovat své potřeby, aniž by při tom ohrozila schopnost budoucích generací uspokojovat jejich potřeby“. Dnes je zřejmé, že Země má omezené schopnosti odolávat všem účinkům exponenciálního růstu. Dlouhodobý cíl politiky ochrany klimatu EU je obsažen v „Plánu přechodu na konkurenceschopné nízkouhlíkové hospodářství do roku 2050“, který předpokládá snížení celkových emisí skleníkových plynů EU o 80 – 95 % do roku 2050 v porovnání s rokem 1990.

Přechod na „uhlíkovou neutralitu“ před nás staví významné výzvy z pohledu využití alternativních (obnovitelných) zdrojů energie, investice do nových výrobních zařízení, které naváží na rozsáhlé výzkumné a vývojové programy cílené k zlepšení technologických postupů.

Problémy a příležitosti

Hlavní úkoly rafinérsko/petrochemického průmyslu

Rafinérsko/petrochemické podnikání je zajímavé v tom, že relativně malý počet rafinerií zajišťuje potřeby velkého počtu zákazníků. V případě Evropy lze například konstatovat, že každá zpracovaná tuna suroviny zajišťuje potřeby každého jednotlivého obyvatele palivy a petrochemickými produkty na rok.

Podle očekávání se na růstu odvětví v posledních 10 letech nejvíce podílejí Čína (40 %) a Indie (29 %), které v horizontu dalších 10 let zcela určitě převezmou vedoucí úlohu v oblasti rafinérsko/petrochemického podnikání. Na druhou stranu došlo v posledním desetiletí ke snížení využití světové rafinérské výrobní kapacity o 2 mil b/den. EU se na tomto snížení podílelo 58 %. Celosvětové průměrné využití rafinérské kapacity se v současné době pohybuje kolem 80 – 85 %.

Výstavba nových rafinerií a navazujících petrochemických jednotek je investičně mimořádně náročná, a proto existuje jen omezená skupina potenciálních investorů. Nyní probíhá zejména v průmyslově se rozvíjejících zemích Asie, Afriky a Jižní Ameriky. V Evropě a USA nové rafinérie a petrochemické výrobny vznikat nebudou. Pozornost se zde soustředí na modernizaci („best available technologies“, odpovídající standardy jsou definovány), konsolidaci (odstavení menších kapacit) a snižování nákladů. Rafinerie a petrochemické jednotky v hospodářsky vyspělých zemích budou ale zastarávat a tedy zaostávat a část produkce tak může být nahrazena importem hotových produktů místo ropy.

Z více důvodů bude pokračovat restrukturalizace vlastníků rafinerií a navazujících petrochemických technologií, přičemž tradiční velké ropné společnosti budou rafinérie prodávat a reinvestovat získané prostředky do těžby ropy nebo alternativních surovin. V Evropě tyto vlastnické změny nyní intenzivně probíhají.

V hospodářsky vyspělých zemích bude spotřeba minerálních motorových paliv v dopravě z více důvodů klesat a bude se také měnit struktura spotřeby. Významnou úlohu v tomto směru bude hrát daňová politika státu, protože zdanění ropných uhlovodíků již nyní významně přesahuje jejich hodnotu a představuje významný zdroj státních příjmů. Základní úlohou státu by mělo být zdanit jednotlivá paliva dle jejich skutečného příspěvku k emisím CO_2, nikoliv podle lobbystických zájmů. Míra zdanění by ale měla současně garantovat určitou mobilitu obyvatel jako atributu demokracie. Vzhledem k poklesu spotřeby motorových paliv bude pro další provozování rafinerií v hospodářsky vyspělých zemích důležitá jejich role jako dodavatele surovin pro petrochemický průmysl.

Rafinérsko/petrochemický sektor jako průmysl, který přidává hodnotu k fosilním surovinám, může přispět k rozvoji udržitelné oběhové ekonomiky tím, že bude co nejlépe využívat suroviny ve svých vlastních procesech a ve spolupráci s dalšími průmyslovými subjekty.

Vývoj technologií by měl probíhat v následujících oblastech:

a) Využití alternativní suroviny

Cílem je integrovat udržitelnější alternativní zdroje surovin. Například zemědělské suroviny (pěstované ne na úkor potravinových zdrojů), druhotné zemědělské suroviny (ligno-celulózovou biomasu, jako je dřevní štěpka a sláma z různých zemědělských plodin), biotechnologie (zaměřené zejména na využití bakteriálních efektů, využití řas apod. pro syntézu

různých uhlovodíků) výhledově i komunální odpad nebo CO_2 z průmyslových spalin, které by mohly být použity jako alternativní uhlíkové zdroje pro výrobu pohonných hmot

b) Zlepšená účinnost výrobních procesů
Cílem je maximalizovat využití všech zdrojů, které vstupují do systému, včetně primárních a sekundárních surovin, vody a energii prostřednictvím:

- zlepšení účinnosti procesu zpracování ropných frakcí (např. zlepšené katalyzátory včetně biokatalyzátorů, zintenzivnění procesů, IT a modelování)
- uzavírat recyklaci zdrojů na výrobních místech
- zvýšená účinnost zdrojů a energie mezi různými výrobními místy / sektory prostřednictvím průmyslové symbiózy

Potřeby v oblasti výzkumu a očekávané výstupy

Suroviny pro rafinérsko/petrochemický průmysl
Nedostatek ropy do roku 2050 nehrozí. Prokázané světové těžitelné zásoby ropy v množství cca 200 mld. t. by měly stačit zhruba na dalších 50 let. Otázkou však zůstává, jak se bude vyvíjet její cena, která by ale v zásadě spotřebu ropy měla moderovat. Pokud se týká skladby nabízených rop, lze očekávat, že na trhu se bude zvyšovat podíl rop s větším obsahem těžkých frakcí, síry a dalších nečistot.
Zvyšovat se bude produkce uhlovodíků z extra těžkých rop, ropných písků a kerogenních hornin (olejových břidlic). Světové zásoby uhlovodíků obsažených v extra těžkých ropách a ropných píscích jsou cca 800 mld. t, ovšem těžitelné zásoby jsou menší, závisí na koeficientu vytěžitelnosti a činí cca 500 mld. t.
Současně lze očekávat, že část klasické ropy bude postupně nahrazena syntetickou ropou vyrobenou petrochemicky Fischer-Tropsch (FT) syntézou, nejprve především na bázi zemního plynu (technologie GTL) a poté i uhlí (CTL). Odhaduje se, že realizace technologie GTL bude ekonomicky ekvivalentní objevu několika desítek miliard tun nové ropy. Projekty tak umožní využívat zemní plyn jako surovinu v rafinérsko-petrochemickém průmyslu ve významně větší míře, než tomu bylo dosud.
Bio-etanol a FAME budou nadále uplatňovány v horizontu nadcházejících 10 let v objemu 5 – 10 % e.e. a to současně s postupným omezováním biopaliv 1. generace. Podíl biopaliv (zejména při postupném uplatnění biopaliv 2. generace) na zajištění nárůstu poptávky po kapalných motorových palivech do roku 2050 by mohl dosáhnout 30 %. Přitom poroste podíl nepotravinářských surovin pro výrobu biopaliv. Novou surovinu pro výrobu paliv a petrochemii bude představovat pyrolýzní olej, příp. plynné produkty z rozkladu odpadní biomasy, realizovaného v menších lokálních pyrolýzních jednotkách.

Rafinérské a petrochemické technologie
Během dlouhé historie rafinérského podnikání bylo vyvinuto široké portfolio rafinérských technologií, založených na nejrůznějších fyzikálně-chemických principech. Existuje proto řada možností, jak koncipovat moderní rafinerii, hodně záleží na lokálních požadavcích. Významnou vlastností moderních rafinérských technologií je modularita (konečný produkt vzniká použitím více technologií v řadě) a šetrnost k životnímu prostředí (nulové emise, nízká vlastní spotřeba energií).
Pro svoji schopnost odstraňovat nežádoucí komponenty a zásadně měnit strukturu a případně i frakční složení suroviny, jsou za perspektivní rafinérské technologie považovány především hydro-krakování a hydrogenační rafinace. Tyto technologie naleznou uplatnění jak v nových, tak i modernizovaných rafineriích. Využity budou pro hydrogenační konverzi ropných zbytků, výrobu „bez-sirných“ motorových paliv a v neposlední řadě i pro konverzi biomasy na

komponenty do motorových paliv, resp. pro její společné zpracování („*coprocessing*“) s ropnými frakcemi na motorová paliva. S ohledem na pokroky technologické i pokroky ve vývoji hydro-rafinačních katalyzátorů bude u konverzních procesů výhodnější rafinovat surovinu než produkty získané její konverzí a rozšířit si tak zdroje surovin. Vodík pro hydrogenační technologie v rafinerii a petrochemii bude místo z katalytického reformování stále více získáván parním reformováním lehkých uhlovodíků (alternativní uplatnění např. pro benzinové uhlovodíky) nebo elektrolýzou s využitím jaderné energetiky (jako pro dopravu).
I přes klesající spotřebu automobilového benzínu si FCC v rafineriích zachová svůj význam. Důvodem je koncept kontinuální regenerace katalyzátoru, který velmi dobře odpovídá prodlužování provozního cyklu rafinérií, možnost složením katalyzátoru flexibilně ovlivňovat výtěžek produktů a minimalizovat dopady provozování této technologie na životní prostředí a nízká spotřeba vodíku (pouze na rafinaci produktů). Při provozování této technologie bude s ohledem na vývoj trhu motorových paliv místo režimu maximální výroby benzínu upřednostněn petrochemický režim (maximalizace výroby propylénu a nenasycených C4 uhlovodíků) nebo středních destilátů ve výrazně vyšším výtěžku (těžký FCC benzín a LCO).
Katalytické reformování představuje stále jeden z klíčových procesů pro výrobu automobilových benzinů. V horizontu 20 let není pravděpodobné, že by rafinérie vyráběly automobilový benzin bez využití této technologie. Vedle lehkých alkanů (butan a iso-pentan), alkylátu a etherů je reformát nejvýznamnější složkou benzinového „poolu“ jejíž OČMM je větší než 85 jednotek, jak požaduje EN 590 pro automobilový benzin (OČMM minimálně 85). Další využití katalytického reformování bude ale omezeno klesající spotřebou automobilového benzínu a environmentálně zdůvodněným požadavkem na snižování obsahu aromátů v něm. Tyto faktory a rostoucí spotřeba vodíku určují současný i budoucí technologický trend reformování, kterým je jednoznačně katalytické reformování s kontinuální regenerací katalyzátoru.
Vzhledem k mandatornímu mísení bio-etanolu (přímo, nebo ve formě ETBE) bude se postupně v rafinériích ztrácet uplatnění izomerace lehkého benzinu. Naopak petrochemickou syntézu ETBE (v Evropě) a alkylaci lze považovat za velmi perspektivní technologie. Výhodou alkylátu, této středněvroucí, vysokooktanové, nearomatické komponenty do automobilových benzinů, je velmi malá citlivost k oktanovému číslu.
S ohledem na limitované vlastní zásoby zemního plynu a rozvinutou infrastrukturu jeho využití v Evropě přímo jako paliva není pravděpodobné, že by zde došlo k výstavbě technologických komplexů GTL. Tyto komplexy jsou stavěny výhradně v lokalitách s velkými zásobami zemního plynu a to i v lokalitách odlehlých, kde je jeho cena pochopitelně nejnižší. Podobný závěr platí i pro technologii CTL.

Rafinérsko/petrochemická zařízení
V důsledku zvyšujících se požadavků na nepřerušovaný provoz v rafinérsko/petrochemických komplexech, z důvodu rovnoměrného zásobení trhu a optimalizace nákladů na údržbu, se bude dále prodlužovat v současnosti běžný čtyřletý cyklus zarážek pro vybraná zařízení. Porostou tedy nároky na spolehlivost a odolnost výrobních zařízení. V souvislosti s rozvojem hydrogenačních a hydro-krakovacích kapacit se bude dále zvyšovat provozní tlak v zařízeních, což si vyžádá zvýšené nároky na konstrukční materiály.
Z hlediska aparátů se pozornost soustřeďuje především na vývoj reaktorů. V důsledku požadavků na čistá paliva se zásadně zvětšil jejich objem a kontrola tepelných efektů v reaktorech integrací různých chladících proudů. Z důvodu prodlužování plánovacího cyklu zarážek a zvyšující se ostrosti reakčních podmínek budou preferovány reaktory s pohyblivým katalytickým ložem, jak je tomu nyní u procesů FCC, CCR u hydro-konverze ropných zbytků a nebo FT syntézy. Intenzivním vývojem prošly především reaktory používané pro dva

posledně jmenované procesy. Uplatňovat se bude i katalytická destilace, např. při syntéze etherů a hydrogenační rafinaci benzinu z FCC.

Katalyzátory, katalytická aditiva

V souvislosti s požadavky na výrobní marži, flexibilitu produkce, kvalitu produktů i některé nové produkty, spotřeba katalyzátorů v rafinériích a petrochemických jednotkách dále významně poroste.

Výjimečné postavení v rafinériích zaujímá katalyzátor FCC. Jeho spotřeba řádově překračuje spotřebu dalších katalyzátorů v navazujících procesech. U žádného jiného katalytického systému není možné tak výrazně měnit jeho vlastnosti, jako u FCC, přídavkem různých aditiv za účelem zvýšení výtěžku benzinu, resp. oktanového čísla a minimalizace dopadů na životní prostředí. Tento koncept se bude dále rozvíjet a výrobci budou nabízet katalyzátor připravený na požadavky konkrétní výrobní jednotky.

U katalytického reformování s kontinuální regenerací katalyzátoru se dává v současnosti přednost katalyzátorům Pt/Sn před katalyzátory Pt/Re. Pt/Sn katalyzátory sice mají ve srovnání s katalyzátory Pt/Re menší stabilitu, ale umožňují dosáhnout podstatně větších výtěžků vodíku a tedy i vyššího oktanového výnosu i výtěžku reformátu.

U alkylace existuje výrazná snaha nahradit klasické katalyzátory, kyselinu sírovou a kyselinu fluorovodíkovou a odstranit tak konstrukční, technologické a ekologické problémy, které jejich použití přináší. Testovány jsou kyseliny Lewisova typu adsorbované na nosiči – SbF_3, $AlCl_3$, BF_3 a ZrO_2-SO_4.

Nový katalyzátor na bázi platinových kovů vyžaduje i hluboká dearomatizace středních ropných destilátů, která bude následovat po současné hydrogenační rafinaci.

Vývoj lze zaznamenat i u demetalizačních katalyzátorů používaných při hydro-konverzi ropných zbytků, kdy jejich klíčovými vlastnostmi jsou retenční kapacita a distribuce pórů.

Intenzivní pozornost je věnována katalyzátorům pro FT syntézu, především katalyzátorům na bázi Fe a Co, pro dnes upřednostňovanou variantu nízkoteplotní FT syntézy.

Alternativní produkty

Kromě rozšíření portfolia surovin pro rafinérie a petrochemii bude docházet, na rozhraní mezi rafinacemi a petrochemickými procesy, i k významnému vývoji alternativních produktů k ropným uhlovodíkům, který lze shrnout následovně:

- kombinace ropných uhlovodíku a biosložek ve standardních motorových palivech je perspektivní pro určité synergie obou bází. Je nezbytné zdůraznit, že to jsou ropné uhlovodíky a s nimi spojený logistický koncept, který umožnil relativně rychlou a bezproblémovou implementaci biosložek do motorových paliv. Výhodou je i možnost použití těchto směsí ve standardních automobilech. Podíl biosložek ve standardních palivech bude více záviset na legislativním vývoji a představách automobilového průmyslu, než na schopnosti průmyslu taková paliva vyrábět. Podíl biosložek ve standardních palivech však nepřekročí 15 % e.o.
- vysoce koncentrovaná biopaliva, zejména na bázi FAME (100 %) a etanolu (E85 – zážehové motory a E95 – vznětové motory) je možné spalovat jen v pro tento účel vyrobených automobilech. S ohledem na specifické vlastnosti vysoce koncentrovaných biopaliv taková vozidla budou dražší a obměnu autoparku není proto reálné realizovat v krátkém období. Tato paliva by mohla najít uplatnění především ve specializovaných flotilách vozidel, resp. ve vybraných odvětvích (např. městské autobusy, vozidla pošty, taxislužby a vozidla vládních institucí a státních podniků, apod.). Z hlediska čistých biosložek je možné předvídat i jejich rostoucí uplatnění jako suroviny pro petrochemický průmysl (hydro-krakované rostlinné oleje), včetně renesance některých minulých technologií (např. výroba butadienu z etanolu).

- CNG pro pohon automobilů má ve srovnání s motorovými palivy na ropné bázi nevýhodu především v pomalu se rozšiřující síti a ve výrazně menším dojezdu vozidel. Pokud by byla motorová paliva zdaněna na základě emisí CO_2 do ovzduší, zemní plyn by jako motorové palivo nemohl ropným uhlovodíkům konkurovat.
- vodík pro pohon automobilů v kombinaci s palivovými články bude nutně navázán na použití vodíku získaného elektrolýzou vody při využití elektrického proudu z jaderných elektráren. Diskuse kolem budoucnosti jaderné energetiky, neexistující infrastruktura, zatím užší nabídka vozidel představují hlavní bariery pro uplatnění vodíku jako motorového paliva.
- elektrická energie používána přímo pro pohon elektromobilů je přímočařejší, účinnější a bezpečnější způsob využití elektrické energie k pohonu vozidel, oproti jejímu využití pro výrobu vodíku. Další rozvoj elektromobilů není možný bez využití elektrické energie z jaderných elektráren a dostupností spolehlivých akumulátorů s velkou kapacitou. Tento směr, opět nikoliv zcela nový, je považován za velmi perspektivní, a proto je podporován i automobilovým průmyslem. Ovšem náhrada všech motorových paliv za elektrický proud by jen pro ČR znamenala vybudování dalších jaderných bloků velikosti JE Temelín.

Životní prostředí

Rafinérsko/petrochemické podnikání bohužel negativně ovlivňuje životní prostředí a to nevratným využíváním přírodních zdrojů, charakterem a kvalitou vyráběných produktů, provozováním samotných výrobních technologií, systémem distribuce i způsobem spotřeby. Budou se ale dále rozvíjet aktivity, které negativní dopad rafinérsko/petrochemického podnikání na životní prostředí významně zmírní.

Z hlediska dopadů využívání rafinérských a petrochemických produktů na životní prostředí je nejvýznamnější aktivita odehrávající se mimo chemicko/rafinérské podnikání – omezení emisí z nově vyráběných automobilů a snížení maximální rychlosti, tj. zejména snížení spotřeby. V nedávné minulosti byl zaveden v celém systému zpracování a distribuce motorových paliv systém rekuperace uhlovodíkových par. Budou se zdokonalovat i metody prevence a včasné identifikace úniků uhlovodíku z dopravních systémů.

S ohledem vlivu na životní prostředí, rafinérský průmysl opouští některé tradiční výroby, např. výrobu rozpouštědel na bázi lehkých benzinových uhlovodíků nebo selektivní rafinaci frakcí pro výrobu mazacích olejů.

Z hlediska rafinérií bude klíčový především další vývoj zvyšování kvality motorových paliv, hlavně automobilového benzinu a motorové nafty. Změny kvality motorových paliv totiž, kromě přímého vlivu na emise, umožňují implementovat nové technologie v konstrukci automobilů zaměřené na snížení spotřeby paliva a emise. U automobilových benzinů určitě dojde ke snížení maximálního obsahu aromátů, olefínů, méně těkavých složek z konce destilace ropy a možná i obsahu síry. Speciální problém představuje rozhodování o dalším využití éterů v automobilovém benzínu. U motorové nafty pak bude omezen zejména obsah polycyklických aromátů. Požadavky na kvalitu motorových paliv iniciují další změny v konfiguraci rafinerií a k využití nových petrochemických procesů.

Zpracování ropy je energeticky náročné, rafinerie a petrochemické jednotky proto patří k významným emitentům CO_2. Evropské sdružení rafinérských společností pro záležitosti životního prostředí CONCAWE intenzivně pracuje na stanovení limitních emisí z rafinérských technologií v návaznosti na systém obchodování s emisními povolenkami. Náklady na povolenky mohou ovlivnit i konfiguraci a způsob využití rafinérských technologií, tj. vysoká spotřeba energie v technologii bude nevýhodou. Např. kontinuální katalytické reformování je ve srovnání s alkylací velký emitent CO_2, ale produkt z obou technologií je z hlediska uplatnění v automobilovém benzínu srovnatelný. Inženýrský VaV stojí před základním úkolem udržitelnosti a realizace nízkouhlíkového hospodářství. Jedná se vyřešení efektivní metody

jímání CO_2 z různých zdrojů, jeho dopravu a skladování, tzv. CCS (carbon capture and storage). Výzvy v případě energetiky (viz kap. 5.4.4) lze s určitou analogií aplikovat i pro spalovací motory (přístup však je podstatně komplikovanější a využití CO_2 obtížnější), v zásadě se může jednat o následující technologie:

a) Spalování paliva se vzduchem a následná separace CO_2 ze spalin („post combustion capture“).
Technologické zařízení CCS zachycuje CO_2 po spálení paliva v systému zpracování spalin. Jedná se o „první generaci“ technologie CCS. Nevýhodou tohoto technického řešení je, že CO_2 má ve spalinách poměrně nízkou koncentraci (cca 15 %) a zařízení musí zpracovávat velké množství spalin, včetně oxidů dusíku (NOx).

b) Spalování paliva s čistým kyslíkem a následná separace CO_2 ze spalin („Oxy-Fuel“).
Jedná se o „druhou generaci“ technologie CCS. Tímto způsobem vzniká menší množství zpracovávaného plynu a odpadá potřeba zpracování oxidů dusíku. Zvýšená výsledná koncentrace CO_2 ve spalinách dosahuje úrovně až 98 %.

c) Zplynování paliva před spálením, konverze CO z plynu na CO_2, separace CO_2 a vodíku a následné spalování čistého vodíku („pre combustion capture“ resp. IGCC - Integrated Gasification Combined Cycle).
Technologie IGCC jsou v současné době nejpropracovanější technická řešení, která lze využít pro zachycování a separaci CO_2. Tyto technologie byly v minulosti primárně vyvíjeny za účelem zplyňování uhlí v chemickém průmyslu a až následně se začaly modifikovat i pro technologie CCS. Proto je IGCC prakticky neslučitelná s fungováním již vybudovaných fosilních elektráren, lze ji uplatnit pouze u nově budovaných zařízení.
Energetické nároky technologií CCS rozhodně nejsou zanedbatelné. Celkově to znamená výrazné zvýšení vlastní spotřeby elektrárny, vysoké investiční výdaje a další spotřebu energie na technologie přepravy a ukládání CO_2, který se uskladňuje hluboko pod zemí za vysokého tlaku. Existuje celá řada mechanismů na zajištění oxidu uhličitého pod zemí a záleží hlavně na geologickém podloží v místě uskladnění. Technologie CCS jsou teprve „v plenkách“, uplyne alespoň deset, možná dvacet let, než bude CO_2 skladován ve velké míře a z obchodního hlediska bude toto skladování ziskové.
I v ČR byla studována možnost podzemního ukládáním uhlíkových emisí na Břeclavsku a dále jsou řešeny projekty výzkumu vysokoteplotní absorpce CO_2 ze spalin s využitím karbonátové smyčky, studie pilotních technologií CCS pro uhelné zdroje v ČR.

Prioritní výzkumná témata
Rafinérsko/petrochemický průmysl se do roku 2030 rozhodně nemusí obávat nedostatku surovin. Těžba i rafinérské kapacity porostou, ale pouze v hospodářsky se rozvíjejících zemích. Bude se ale měnit jejich kvalita a cena. Centrum rafinérsko/petrochemického podnikání se přesune z USA do Asie, kde bude spotřeba ropy největší a budou provozovány nejmodernější rafinerie a petrochemické komplexy.
Dostupné rafinérské a petrochemické technologie jsou schopné řešit všechny očekávané výzvy. Prioritní témata pro podporu výzkumu, vývoje a inovací katalyzátorů pro čištění ovzduší, vod a výfukových plynů jsou komentovány v kapitole uvedené dříve, jedná se např. o výzkum vysokoteplotní absorpce CO_2 ze spalin s využitím karbonátové smyčky;
Dále budou rozvíjeny procesy využívající katalyzátory, zejména hydrogenační a založené na Fischer-Tropsch syntéze i katalyzátory samotné.
Poroste podíl alternativních surovin i produktů v rafinérsko-petrochemickém podnikání, ale centrální úloha ropných uhlovodíků pro mobilitu obyvatelstva a pro petrochemický průmysl se

zatím zásadně nezmění. Proces uplatnění bio-komponent obecně i v rafineriích musí ale projít určitou sebereflexí vycházející z nutnosti fiskální podpory uplatnění biopaliv (ale obecně i dalších alternativních paliv) a nutnosti vývoje takové technologie výroby biopaliv, která z komplexního pohledu (náklady na výrobu, udržitelnost, životní cyklus, disponibilita zdrojů aj.) bude efektivnější než výroby pohonných hmot a surovin pro navazující petrochemický průmysl.

Rafinérský a petrochemický průmysl, jako energeticky náročné odvětví, bude muset najít odpověď na změny v systému obchodování s emisemi CO_2.

4. Horizontální otázky (témata)

Sekce Horizontálních otázek (problémy společné celému chemickému průmyslu) je zaměřena na přezkoumávání nezbytných politických, sociálních a strukturálních reforem potřebných pro inovace a požadované evropské oživení k udržení náskoku uvnitř stále více se globalizujícího světa. 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.

5. Závěr

Na základě identifikace globálních trendů techniky a budoucích potřeb ekonomiky s ohledem na potenciál české vědeckovýzkumné základny a inovační potenciál českých firem byly vytipovány základní strategické oblasti, pro které existuje nebo je vytvářen v České republice dostatečný vědeckotechnický potenciál, záměry jsou realizovatelné a mohou významně přispět k řešení potřeb české společnosti a aktualizována Vize české chemie. Aktualizovaná SVA vychází z technologických, ekonomických a sociálních změn ve světě, včetně dopadů klimatických změn, čtvrté průmyslové revoluce, nedostatku některých surovin, snižování zásob vody, exponenciálního růstu populace a zvyšování kontaminace životního prostředí.

Pochopení a hlavně včasná reakce na tyto změny může zásadně ovlivnit udržitelnost a zachování konkurenceschopnosti české chemie. Specifické, interdisciplinární postavení oborů chemie, chemické technologie a procesního inženýrství uplatňující se v mnoha oborech lidské činnosti, vyžaduje včas se připravit na důslednou recyklací a zajištění obnovitelných uhlíkatých surovinovými zdroji pro chemický průmysl, včetně přechodu části chemického průmyslu na biochemické technologie zaměřené na důkladnější využívání biologického odpadu všeho druhu, a to nikoliv jen na biopaliva.

Podpora aplikovaného výzkumu, který by přinesl efekty v relativně kratším výhledu, je důležitá proto, aby tuzemské firmy nabídly inovativní produkty s daleko vyšší přidanou hodnotou. Proto je žádoucí koncentrace lidských, materiálových a zejména finančních zdrojů. Současně je třeba urychlit standardizaci nových výrobků a úprava legislativy.

S ohledem na rozsah chemického průmyslu a jeho důležitost pro navazující obory (např. automotive) je potřebné zařadit oblast chemie mezi Národní inovační platformy, podporovat zpracování a aktualizaci strategických dokumentů, směry udržitelného rozvoje chemického průmyslu v ČR, priority podpory VaVaI v oblasti chemie a souvisejících oborů a zařazení chemie jako součásti národní RIS3 strategie.

6. Seznam použitých zkratek

APC	Advanced Process Control
AV	Akademie věd
b. c.	běžné ceny
ČTP	Česká technologická platforma
ES	Evropské společenství
EU	Evropská unie
FT	Fischer-Tropsch syntéza
IAP	Implementační akční plán (ČTP pro udržitelnou chemii)
MPO ČR	Ministerstvo průmyslu a obchodu České republiky
MSP	Malé a střední podniky
MŠMT	Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy
OLED	Organic Light Emitting Diode
OP	Operační program
OP VaVpI	Operační program Výzkum a vývoj pro inovace
OPVK	Operační program Vzdělávání pro konkurenceschopnost
REACH	nařízení EU k registraci, evaluaci a autorizaci chemických látek
PME	Prvky platinové skupiny
REE	Prvky vzácných zemin
RVVI	Rada pro výzkum, vývoj a inovace
SVA	Strategická výzkumná agenda (ČTP pro udržitelnou chemii)
TP	Technologická platforma
UPH	účetní přidaná hodnota
VaV	Věda a výzkum
v. v. i	veřejná výzkumná instituce
VaVaI	Věda, Výzkum, Inovace
VOC	Volatile Organic Compounds
TCA	Technologické centrum Akademie věd ČR
ZP	Zpracovatelský průmysl