

## Závěrečná zpráva o řešení výzkumného záměru

Identifikační kód	AV0Z40720504
Název výzkumného záměru	Výzkum vícefázových reagujících systémů pro návrh procesů v oblastech syntézy a přípravy nových materiálů, energetiky a ochrany životního prostředí
Příjemce	Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i.
Řešitel	Prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc.
Doba řešení	1. 1. 2005 – 31. 12. 2011

### 1. Splnění cílů řešení výzkumného záměru

Všechny vymezené cíle výzkumného záměru byly pro jednotlivé výzkumné směry (celkem 10) splněny:

#### (1) Difúzní a separační procesy

- byly nalezeny podmínky pro amplitudu a frekvenci oscilací průtoků za bod zahlcení u kolon
- byly aplikovány partikulární 3-D elektrody na průmyslový elektrochemický proces
- byla zavedena protiproudá kontinuální extrakce kys. a neutrálních sloučenin z talového oleje
- byly optimalizovány extrakce přírodních látek pomocí superkritického CO<sub>2</sub>
- byly aplikovány membránové separace pro dělení CO<sub>2</sub> a methanu

#### (2) Termodynamika reagujících vícefázových soustav

- byly zpracovány studie řešící restrukturalizaci molekul vody okolo molekuly rozpouštědla
- byly navrženy stav. rovnice použitím poruchových rozvoju pro predikci fáz. chování směsí
- byly změřeny fáz. rovnováhy pro soustavy (voda–uhlovodík) při vys. tlacích a teplotách
- byly aktualizovány bibliografické databáze dat o rovnováze kapalina-pára

#### (3) Katalýza, reakční a molekulární inženýrství

- byly zavedeny nové metody přípravy heterogenních katalyzátorů (nevodná impregnace, mikroemulze, termické rozprostírání)
- byla vyvinuta nová chromatografická metoda pro získání difúzních koeficientů a dalších transportních charakteristik porézních látek tvarovaných do nestandardních tvarů
- byla aplikována metodika pro získání chemicky relevantních informací z elektronových párových hustot pro interpretaci elektronové struktury molekul se složitými vazebnými poměry i v excitovaných stavech

#### (4) Vícefázové reaktory

- byly získány poznatky o interakci fází na středních čas. a délkových škálách významné pro pochopení makroskopických modů chování vícefázových soustav
- byla rozvinuta elektrodifúzní diagnostika proudění v rámci technologie přípravy mikročidel
- byly stanoveny charakteristiky různých reologicky složitých materiálů (suspenze, emulze, gely, polymerní roztok) zahrnující efekt zdánlivého skluzu tekutiny na stěně

#### (5) Biotechnologie a základy procesů pro životní prostředí

- byly získány nové organicko-anorganické materiály obsahující biologické součásti pro optické senzory
- byla využita mikrovlnná energie při katalyt. a fotochemických reakcích pro zlepšení syntézy
- bylo aplikováno mikrovlnné záření při sušení knih a recyklaci PET či PU pěn
- byly vyvinuty nové ligandy pro homogenní katalýzu v organokovové chemii

#### (6) Přenosové jevy v aerosolech

- byla studována tvorba a chování atmosférických aerosolů v Praze-Suchdole a Košetících
- byly vyvinuty nízko a vysoko teplotní metody přípravy kompozitních nanočástic

- byly studovány faktory určující expozici lidí aerosoly ve vnitřním prostředí
  - byla zkoumána nukleace orientovaná na podmínky odpovídající procesům v atmosféře
- (7) Spalovací procesy a dioxinová chemie
- byla získána nová relevantní data použitelná při návrhu a provozování fluidních jednotek určených ke zplyňování biopaliv či odpadu
  - byly zkoumány mechanismy vzniku PCDD/F a PCB využitelné pro monitorování znečištění
- (8) Systémy s fluidní vrstvou a vysokoteplotní čištění plynů
- byly studovány vysokoteplotní systémy tuhé částice-plyn s chemickými reakcemi
  - byly aplikovány nové znalosti o procesech s využitím fluidní vrstvy pro spalování
  - byly vyvinuty nové metody účinného čištění plynů (odstraňování dehtu a sirných sloučenin)
- (9) Laserová chemie pro přípravu nových materiálů
- byla zdokonalena laserová fotopolymerace CS<sub>2</sub>, laserová ablace polymerů, laserová fotooxidace benzothiofenu a laserem indukovaná reakce organokřemičitých sloučenin s karbonyly kovů pro četné aplikace v nanovědách
- (10) NMR spektroskopie
- byly vyvinuty nové metody pro NMR měření <sup>29</sup>Si-<sup>13</sup>C interakčních konstant
  - byla aplikována LC/NMR technika při separaci a identifikaci složitých organokřem. látek

## 2. Stručné zhodnocení výsledků výzkumného záměru

### 2.1. Česky:

*Získané výsledky výzkumu umožnily identifikaci charakteristik soustav na molekulární úrovni a jejich integraci s fenomenologickými poznatky o chování systémů v závislosti na procesních podmínkách i kvantitativní popis chování reagujících vícefázových soustav pomocí matematických modelů použitelných pro optimální návrh procesních zařízení vyhovujících požadavkům na šetrnost k životnímu prostředí.*

### 2.2. Anglicky:

*Research results obtained facilitated the identification of molecular-level characteristics of the investigated systems with a phenomenological knowledge of system behaviour as a function of process conditions, the quantitative description of the behaviour of multiphase reacting systems by mathematical models applicable to optimum process design conforming to requirements of environmental concern.*

## 3. Uplatněné výstupy řešení výzkumného záměru

### 3.1. Souhrnné počty výsledků dle kategorií

Články v impakt. časopisech	Články v ostatních časopisech	Odborné knihy	Kapitoly v odborných knihách	Příspěvky ve sbornících	Patenty	Aplikované výsledky	Ostatní výsledky	CELKEM
699	95	10	37	1375	37	10	406	2669

### 3.2. Nejvýznamnější uplatněné výsledky

1) Sipilä M., Berndt T., Petäjä T., **Brus D.**, Vanhanen J., Stratmann F., Patokoski J., Mauldin, III R.L., Hyvärinen A.-P., Lihavainen H., Kulmala M.: The Role of Sulfuric Acid in Atmospheric Nucleation. *Science* 327(5970), 1243-1246 (2010).

- 2) **Poloncarzová M., Vejražka J., Veselý V., Izák P.:** Effective Purification of Biogas by Condensing Liquid Membrane. *Angew. Chem. Int. Ed.* 50(3), 669-671 (2011).
- 3) **Církva V., Žabová H.:** *Photocatalysis on Titania-coated Electrode-less Discharge Lamps.* New York: Nova Science Publisher, **2010**, 76 s.
- 4) Bultinck P., **Ponec R.,** Van Damme S.: Multicenter Bond Indices as a New Measure of Aromaticity in Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. *J. Phys. Org. Chem.* 18(8), 706-718 (2005).
- 5) **Storch J., Sýkora J., Čermák J., Karban J.,** Císařová I., Růžička A.: Synthesis of Hexahelicene and 1-Methoxyhexahelicene via Cycloisomerization of Biphenyl-Naphthalene Derivatives. *J. Org. Chem.* 74(8), 3090-3093 (2009).
- 6) Vega C., Abascal J.L.F., **Nezbeda I.:** Vapor-Liquid Equilibria from the Triple Point up to the Critical Point for the New Generation of TIP4P-like Models: TIP4P/Ew, TIP4P/2005, and TIP4P/ice. *J. Chem. Phys.* 125(3), 034503, 9 pp (2006).
- 7) Betancor L., López-Gallego F., Hidalgo A., Fuentes M., **Podrazký O., Kuncová G.,** Guisán J.M., Fernández-Lafuente R.: Advantages of the Pre-Immobilization of Enzymes on Porous Supports for their Entrapment in Sol-Gels. *Biomacromolecules* 6(2), 1027-1030 (2005).
- 8) **Vít Z., Gulková D., Kaluža L.,** Bakardieva S., Boaro M.: Mesoporous Silica-Alumina Modified by Acid Leaching as Support of Pt Catalysts in HDS of Model Compounds. *Appl. Catal., B* 100(3-4), 463-471 (2010).
- 9) **Sýkora J.,** Himl M., Stibor I., Císařová I., Lhoták P.: Unique Self-Assembly Patterns Based on the Thiocalix[4]arene-Silver Interactions. *Tetrahedron* 63(10), 2244-2248 (2007).
- 10) Hussein T., Glytsos T., **Ondráček J., Dohányosová P., Ždímal V.,** Hameri K., Lazaridis M., **Smolík J.,** Kulmala M.: Particle Size Characterization and Emission Rates During Indoor Activities in a House. *Atmos. Environ.* 40(23), 4285-4307 (2006).
- 11) **Dřínek V.,** Šubrt J., Klementová M., Rieder M., **Fajgar R.:** From Shelled Ge Nanowires to SiC Nanotubes. *Nanotechnology* 20(3), 035606 (2009).
- 12) **Pěnkavová V., Tihon J., Wein O.:** Stability and Rheology of Dilute TiO<sub>2</sub> – Water Nanofluids. *Nanoscale Res. Lett.* 6(1), 273 (2011).
- 13) **Křišťál J.,** Kodým R., Bouzek K., **Jiříčný V.:** Electrochemical Microreactor and Gas-Evolving Reactions. *Electrochem. Commun.* 10(2), 204-207 (2008).
- 14) **Sovová H.:** Mathematical Model for Supercritical Fluid Extraction of Natural Products and Extraction Curve Evaluation. *J. Supercrit. Fluids* 33(1), 35-52 (2005).
- 15) **Vejražka J., Fugasová M., Stanovský P., Růžička M., Drahoš J.:** Bubbling Controlled by Needle Movement. *Fluid Dyn. Res.* 40(7-8), 521-533 (2008).

16) Šyc M., Pohořelý M., Jeremiáš M., Vosecký M., Kameníková P., Skoblia S., Svoboda K., Punčochář M.: Behavior of Heavy Metals in Steam Fluidized Bed Gasification of Contaminated Biomass. *Energy and Fuels* 25(5), 2284–2291 (2011).

17) Wichterle I., Linek J., Wagner Z., Fontaine J.-C., Sosnkowska-Kehiaian K., Kehiaian H.V.: Landolt-Börnstein IV/13A. *Vapor-Liquid Equilibrium in Mixtures and Solutions*. Springer, Berlin 2007, 583 s.

18) Šolcová O., Schneider P.: *Experimental Determination of Transport Parameters*. In: Gas Transport in Porous Media. (Ho C.K. - Webb S.W., Ed.), pp. 245-272, Springer, Dordrecht 2006.


19) Hájek M., Sobek J., Brustman J., Veselý V., Drahoš J.: Způsob chemické depolymerace odpadního polyethylentereftalátu. Pat. No. CZ299908. Applied: 07.07.13, Patented: 08.11.12.

20) Gruber V.: Method of Extracting of Europium(III) and/or Yttrium(III) Ions from Concentrate of Luminophore Dust or Sludge. Pat. No. EP1817437/PCT/CZ2005/000088. Applied: 05.11.24, Patented: 09.03.25.

#### 4. Náklady na řešení výzkumného záměru

Rok	Institucionální podpora ze státního rozpočtu (tis. Kč)	Podpora z ostatních veřejných zdrojů (tis. Kč)	Podpora z neveřejných zdrojů (tis. Kč)
2005	79 048	0	0
2006	79 900	0	0
2007	88 454	0	0
2008	85 437	0	0
2009	103 241	0	0
2010	59 052	0	0
2011	25 656	0	0
<b>CELKEM</b>	<b>520 788</b>	<b>0</b>	<b>0</b>

V Praze dne 1.3.2012

.....  
  
 .....  
 razítko a podpis statutárního zástupce

ÚSTAV CHEMICKÝCH PROCESŮ AV ČR, v. v. I.  
 165 02 Praha 6 - Suchbát, Rozvojová 135  
 IČO: 67985858 DIČ: CZ67985858