

## SOUHRN

Cílem této diplomové práce bylo posouzení možnosti efektivnějšího vedení ekologicky velmi příznivé přímé aminace alkenů amoniakem nebo aminy za tvorby primárních, sekundárních a terciárních aminů v nestacionárních podmínkách vynucených programovými změnami ve složení nástřiku do katalytického reaktoru.

Přímou aminací nižších alkenů amoniakem se při stacionárních podmínkách dosahuje konverze na amin do 10 % (reakční teplota 250°C a tlak 5 MPa). Protože se jedná o exotermickou reakci, s rostoucí teplotou klesá rovnovážná konverze. Reakce ovšem neprobíhá bez přítomnosti kyselých katalyzátorů (zeolitů), které jsou aktivní až při vyšší teplotě. Katalyzátor je v průběhu reakce deaktivován tvorbou uhlíkatých úsad.

Předpokládá se, že reakce probíhá mezi adsorbovanou molekulou alkenů, který je na kyselém Brønstedově centru protonizován na karbokation, a molekulou amoniaku přímo z objemové fáze. Navržený reakční mechanismus zahrnuje sorpci reaktantů a produktů, aminační reakci a vedlejší oligomerační reakce. Na základě reakčního mechanismu a fyzikálně-chemických představ o interakci molekul s aktivními centry byly navrženy konstanty rychlostních rovnic.

Při matematickém modelování procesu byl uvažován isotermní diferenciální reaktor. Modelovou reakcí byla přímá aminace isobutenu amoniakem.

Nestacionární chování bylo vynuceno koncentračními perturbacemi amoniaku do kontinuálního proudu alkenů. Byl zkoumán vliv použité periody, rozdělení této periody a složení nástřiku na konverzi alkenů, selektivitu na tento amin a výtěžek aminu.

Název diplomové práce:	Nestacionární uspořádání přímé aminace alkenů
Studijní obor:	Technologie organických látek
Diplomant:	Michal Skácel
Vedoucí práce:	Doc.Ing. Josef Koubek, CSc.

Diplomová práce byla odevzdána dne 15.5.2002.