



Universitatea POLITEHNICA din București

TEZĂ DE ABILITARE

**FENOMENE DE TRANSFER
ÎN PROCESSE CU/FĂRĂ
REAȚIE (BIO)CHIMICĂ**

REZUMAT

Conf. dr. ing. Oana Cristina PÂRVULESCU

**Facultatea de Chimie Aplicată și Știința Materialelor
Departmentul de Inginerie Chimică și Biochimică**

2017

Teza de abilitare intitulată **FENOMENE DE TRANSFER ÎN PROCESE CU/FĂRĂ REACȚIE (BIO)CHIMICĂ** prezintă principalele realizări profesionale obținute după conferirea titlului de doctor (2005) și, de asemenea, câteva direcții viitoare de cercetare. Lucrarea este structurată în *trei părți* la care se adaugă 316 referințe bibliografice și **Anexa 1 (Lista de lucrări și brevete)**.

În *prima parte (DEZVOLTAREA CARIEREI PROFESIONALE)* sunt prezentate succint aspecte relevante ale carierei profesionale, punându-se accent pe activitățile didactice și de cercetare științifică, precum și pe realizările aferente.

Partea a doua (PRINCIPALELE REALIZĂRI ȘTIINȚIFICE) include o prezentare detaliată a studiilor publicate în 22 de articole științifice publicate în reviste indexate BDI, dintre care 20 în reviste indexate ISI (FI>0,75). Această parte e structurată în *șase capitole* care conțin date experimentale și teoretice referitoare la transferul de masă și căldură în procese cu/fără reacție (bio)chimică, *i.e.*, adsorbție/desorbție, piroliză, extracție, separare prin membrane, fermentare, uscare și răcire.

În **Capitolul 1 (Adsorbția și desorbția compușilor organici volatili în strat fix de adsorbant)** sunt prezentate curbe experimentale și obținute prin simulare pentru adsorbția și desorbția unor specii de compuși organici volatili (COV), *i.e.*, acetonă, n-hexan (HEX) și izopropanol (IPA), pe/din silicagel, cărbune activ pur și impregnat cu cupru, membrane de celuloză bacteriană (CB) și CB modificată cu nanoparticule de magnetită (M/CB). Adsorbția de specii de COV din aer în strat fix de adsorbant și desorbția termică au fost studiate în două sisteme experimentale independente. Influența factorilor caracteristici proceselor de adsorbție și desorbție (viteza superficială a aerului, temperatura, dimensiunea particulei de adsorbant, concentrația de cupru și magnetită în adsorbant) asupra performanțelor acestora a fost evaluată cantitativ prin analiza statistică a datelor experimentale. Capacitatea de adsorbție la saturație a variat în intervalul 0,15-0,81 g/g iar valorile cele mai mari (0,70-0,81 g/g), obținute la nivelurile maxime ale vitezei aerului (1,7 cm/s) și temperaturii de adsorbție (40 °C) pentru adsorbția de HEX și IPA pe membrane de CB și M/CB, sunt superioare celor raportate în literatura de specialitate. Dinamica proceselor a fost simulată utilizând modele matematice bazate pe ecuații de bilanț de masă și căldură. Parametrii ajustabili ai modelelor au fost estimați din date experimentale.

Capitolul 2 (Piroliza lentă a materialelor vegetale și aplicații ale cărbunelui pirolitic) include rezultate referitoare la piroliza în strat fix a biomasei vegetale netratate și impregnate cu săruri de nichel, precum și la prepararea de catalizator fixat pe suport de cărbune activ (CSCA) din cărbune pirolitic (CP) și testarea CSCA în procese chimice. Boabe de porumb și grâu au fost pirolizate în prezența CO₂ obținându-se CP, ulei pirolitic și o fază gazoasă. Influența factorilor procesului, *i.e.*, fluxul termic (2600-4500 W/m²), viteza superficială a CO₂ (1-2,6 m/h), dimensiunea particulei de biomasă (0,2-0,8 cm), și concentrația soluției de nitrat de nichel (0-300 g/L), asupra dinamicii procesului și distribuției de produși pirolitici a fost evaluată calitativ și cantitativ. S-au stabilit corelații între masele specifice (calculate ca raport între masa finală de produs și masa inițială de material vegetal) de CP (0,24-0,39) și ulei pirolitic (0,36-0,49) utilizând un plan factorial 2³. Modele cinetice ai căror parametri specifici au fost determinați din date experimentale au fost utilizate pentru a simula dinamica procesului. Catalizatorii obținuți prin activarea CP impregnat cu nichel au fost caracterizați și testați în procesul de hidrogenare în fază lichidă a cinamaldehydei.

În **Capitolul 3 (Extracție de compuși bioactivi din materiale vegetale)** se prezintă date experimentale și obținute prin simulare referitoare la extracția cu solvenți a compușilor bioactivi din biomasă vegetală, *i.e.*, β-caroten din măceșe, inulină din rădăcină de cicoare, glicirizină din rădăcină de *Glycyrrhiza glabra* (lemn dulce) și ulei din semințe de camelină. Dinamica procesului de transfer de masă a fost simulată utilizând modele matematice ai căror parametri ajustabili au fost identificați din date experimentale. Eficiența procesului a fost

influențată de tipul de solvent, temperatura de operare, raportul masic solid/solvent și dimensiunea particulei de biomasă.

Capitolul 4 (Prepararea și aplicațiile membranelor polimerice) conține aspecte calitative și cantitative referitoare la: (i) prepararea membranelor de celuloză și ortosilicat de tetraetil (TEOS)/celuloză și testarea acestora în procesul de pervaporare al soluțiilor apoase de alcool etilic (**4.1. Prepararea și aplicațiile membranelor pe bază de celuloză**); (ii) prepararea membranelor de celuloză bacteriană (CB) și magnetită/CB și testarea acestora ca vectori de oxigen (**4.2. Prepararea și aplicațiile membranelor pe bază de celuloză bacteriană**); (iii) permeația gazoasă prin membrane de cauciuc poliizoprenic (**4.3. Aplicații ale membranelor de poliizopren**).

În **Capitolul 5 (Procese fermentative avansate)** sunt prezentate rezultate experimentale și aspecte referitoare la modelarea, simularea și optimizarea proceselor de fermentație cuplate cu sisteme de îndepărtare a produșilor cu efect inhibitor. Biosinteza ABE (acetonă-butanol-etanol) cu bacterii *Clostridium acetobutylicum* cuplată cu recuperarea solvenților prin pervaporare sau stripare cu gaz este detaliată în subcapitolul **5.1. Sistem integrat de fermentație ABE și recuperare de solvenți**. Îndepărtarea butanolului din mediul de reacție este necesară din cauza efectului inhibitor al acestuia asupra celulelor bacteriene. S-au elaborat modele matematice pentru a simula dinamica proceselor cuplate și s-au determinat condițiile optime necesare pentru a obține valori maxime ale producției de solvenți ABE și ale gradului de utilizare a substratului. Subcapitolul **5.2. Fermentație lactică cuplată cu îndepărtarea *in situ* a acidului lactic (AL)** conține date experimentale și obținute prin simulare referitoare la fermentația în regim discontinuu a laptelui inoculat cu bacterii lactice (BAL) în prezența argilelor anionice de tip hidrotalcit. Particulele de argilă au reținut o parte din AL produs în mediul de fermentare, reducând astfel efectul inhibitor al acestuia asupra dezvoltării BAL. A fost studiată influența factorilor procesului, *i.e.*, temperatura de operare (38-43 °C), raportul argilă/lapte (1-7,5 g/L) și frecvența câmpului ultrasonic (0, 35 kHz), asupra dinamicii procesului. S-a elaborat un model matematic bazat pe ecuații de bilanț de materiale, de cinetică de transfer de masă și de echilibru interfazic pentru a simula dinamica proceselor cuplate iar parametrii ajustabili ai modelului s-au estimat din date experimentale. S-au determinat corelații între variabilele dependente și independente ale procesului prin analiza statistică a datelor experimentale.

Capitolul 6 (Uscarea și răcirea materialelor) include date experimentale și teoretice referitoare la procesele de uscare și răcire. Aspecte privind uscarea cu aer a straturilor fixe de particule nedeformabile și a plăcilor plane sunt prezentate în subcapitolul **6.1. Uscarea convectivă a materialelor poroase**. S-au elaborat modele matematice bazate pe ecuații de bilanț de masă și energie, considerându-se că în porii materialului are loc un proces de difuziune moleculară peste un strat de gaz inert. Parametrii ajustabili ai modelelor s-au determinat din date experimentale. În cazul uscării unui strat fix de cărbune activ cu un curent de aer, viteza de uscare a crescut cu viteza superficială a aerului (0,04-0,42 m/s) și temperatura de intrare a aerului (25-45 °C). Simulările efectuate pentru uscarea plăcilor de rigips pe o bandă transportoare au evidențiat o creștere a vitezei de uscare cu temperatura de intrare a aerului (20-40 °C), respectiv o scădere a acesteia cu umiditatea relativă a aerului (20-60%) și viteza benzii transportoare (0,005-0,02 m/s). Aspecte experimentale și teoretice privind răcirea materialelor cu un dispozitiv prevăzut cu tuburi termice și aripiore de disipare a căldurii sunt prezentate în subcapitolul **6.2. Răcirea cu tuburi termice a componentelor electronice**.

În *partea a treia (PERSPECTIVE DE CERCETARE)* a tezei sunt prezentate câteva direcții de cercetare preconizate pentru activitatea viitoare de conducere de doctorat.