

Sekce: **Chemical Engineering I (B139)**

Předseda komise: prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Komise: Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D., Ing. Denisa Lizoňová, Ing. Jiří Kolář, zástupce sponzora

8:30	zahájení	
8:40 - 9:00	Martin Balouch	Protocells: Promising nanocarriers for on-demand drug delivery
9:00 - 9:20	Filip Hládek	Preparation of protocells: encapsulation efficiency and on-demand payload release
9:20 - 9:40	Anna Hubatová-Vacková	Preparation of multi-compartment microparticles for controlled drug release
9:40 - 10:00	Kristýna Idžakovičová	Light-shaped chitosan hydrogels
10:00 - 10:20	Emel Ilgin Karakoc	The effect of pH of supply solutions on pH dynamic behaviour of Urea-Urease system in CSTR
10:20 - 10:40	přestávka	
10:40 - 11:00	Aliye Hazal Koyuncu	Synthesis and Characterization of Nanoparticles by Using Microfluidic Device
11:00 - 11:20	Erik Sonntag	Design of Dissolution Method for Poorly Soluble Drug Formulation
11:20 - 11:40	Adam Waněk	Development and characterisation of tablets with controlled dissolution kinetics by FDM 3D printing
11:40 - 12:00	David Zůza	Design of Taylor reactor for continuous preparation of silica microparticles
12:00 - 12:20	Martin Šourek	Linking micro-scale and meso-scale models for catalytic filter
	přestávka	
12:40		představení sponzorů, vyhlášení výsledků

Protocells: Promising nanocarriers for on-demand drug delivery

Autor: Bc. Martin Balouch
Ročník: M2
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

The targeted delivery of specific Active pharmaceutical ingredients (APIs) to the required site of effect inside human body is complicated and recently often studied problem, because when API is not specifically targeted various adversary effects can occur, such as reaction of API with surrounding environment, poor solubility in body fluids, immune response, etc. Liposomes can be used as vessels for such targeted delivery for some APIs like doxorubicin, daunorubicin or cytarabine. However, they are not suitable for all APIs due to complications with encapsulation of the APIs into the liposomes. One of the possible solutions for this problem is to first adsorb the API into a porous particle and then encapsulate the particle itself into the liposome. The formed nanocomposites are called protocells. The aim of this work is to prepare silica nanoparticles, adsorb a model set of APIs into them and encapsulate the particles into liposomes to form protocells. Further aim of this work is to prove that using this way it is possible to encapsulate APIs which are not possible to be encapsulated into simple liposomes.

Preparation of protocells: encapsulation efficiency and on-demand payload release

Autor: Filip Hládek
Ročník: B3
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Majority of newly synthesized drugs is characterized by poor water solubility, which can be improved either by amorphization or by loading into a carrier, for example mesoporous silica particle. This work focuses on preparation of so-called protocells – mesoporous silica nanoparticles encapsulated in liposomes, where liposomes act as gatekeepers and prevent undesired drug leakage. Such formulations allow us to deliver the drug into specific sites, for example tumours (passive targeting via EPR effect, or antibody-mediated active targeting). This work contains synthesis of the silica nanoparticles (180 nm) and its optimization, subsequent loading of the model substance, preparation of the protocells and evaluation of the loading capacity and release kinetics.

Preparation of multi-compartment microparticles for controlled drug release

Autor: Bc. Anna Hubatová-Vacková
Ročník: M2
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Hydrogel microparticles are hydrophilic microparticles with the ability to incorporate various functional components such as liposomes, nanoparticles or enzymes. Microfluidics allows us to prepare monodisperse microparticles in sizes comparable to those of blood cells, i.e. 5 to 10 μm , which makes them suitable for targeted drug delivery. These microparticles can be used as miniature chemical or biochemical reactors in order to store, deliver, chemically process and locally release pharmaceutically active substances that are highly reactive or unstable, and therefore cannot be delivered in standard dosage forms. Targeted drug delivery improves efficiency and decreases side-effects of a drug by avoiding interactions with healthy tissue. The goal of this project is to synthesize hydrogel microparticles which are able to deliver and in response to an external radiofrequency signal release active matter, e.g. allicin, a highly potent natural antibiotic compound found in garlic. In the current stage, alginate microparticles containing iron oxide nanoparticles and liposomes with encapsulated carboxyfluorescein dye were successfully prepared in a microfluidic chip and analysed by confocal microscopy.

Light-shaped chitosan hydrogels

Autor: Kristýna Idžakovičová
Ročník: B3
Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

Hydrogels are cross-linked materials capable of absorbing large amounts of water without dissolving. They are used in broad spectrum of bioapplications such as drug delivery and tissue engineering. For these uses specific shapes of particles are required. Thus, the focus of the scientists has shifted to lithographic synthesis of such hydrogels. Most of lithographic methods use light to determine the shape of synthesized objects, therefore, synthetic photocrosslinkable polymers are used as substrates. However, biopolymers offer much better biocompatibility over synthetic polymers, which is crucial in bioapplications. Biopolymers can be crosslinked using various methods, but light is not one of them, which prevents their lithographic processing. In this work, we utilized synthetic polymer as sacrificial template to generate biopolymer particles of desired shape. We successfully prepared mixture of biopolymer (chitosan) and template polymer (methacrylated dextran). Synthetic polymer was crosslinked via stop-flow lithography to gain desired shape and then we used genipin to crosslink entrapped biopolymer. Synthetic polymer was then hydrolysed under basic conditions yielding solely biopolymer particles.

The effect of pH of supply solutions on pH dynamic behaviour of Urea-Urease system in CSTR

Autor: Bc. Emel Ilgin Karakoc
Ročník: M2
Školitel: Ing. František Muzika, Ph.D.

Urea-Urease system is promising system for the bio regeneration of concrete material. The cracks in concrete can be filled with solution of powdered chalk (CaCO_3) dissolved in lactic acid creating a Ca^{2+} solution and then other solution of urea and urease should be added. The urease solution hydrolyse urea producing ammonia and bicarbonate ions that can precipitate and produce calcium carbonate [1]. Urea-urease system has bell shaped activity curve from pH 3 to 11 showing maximum at pH 7. If the higher pH is caused by ammonia, it creates negative feedback [2], which may lead into pH dynamic regimes. That can be used in breathing microgel reactors [3]. In this study we used CSTR (2.86ml) with three inflows, specifically: urea (0.0015M, $F_0 \sim 0.08 \text{ml/min}$), urease (5U/ml, $F_0 \sim 0.33 \text{ml/min}$) and sulphuric acid solutions ($\text{pH} = \langle 2.624; 4.81 \rangle$, $F_0 \sim 0.08 \text{ml/min}$) under 25°C . Different concentrations of acid were used to find dynamic behaviour. pH was measured using pH probe theta 113vfr and pH meter HI 5222-02. [1] Phua, Y.J. and A. Røyne, Construction and Building Materials, 2018, 167, 657-668. [2] Hoare, J. P. and Laidler K. J., J. Am. Chem. Soc., 1950, 72 (6), 2487-2489 . [3] Che, H., S. Cao, and J.C.M. van Hest., J. Am. Chem. Soc., 2018, 140(16),5356-5359.

Synthesis and Characterization of Nanoparticles by Using Microfluidic Device

Autor: BSc Aliye Hazal Koyuncu
Ročník: M2
Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

In recent years, nanoparticles have essential role in various areas such as biomedical, environmental or pharmaceutical applications due to their chemical and physical properties. In all these applications, ensuring control over the particle size and shape has high importance due to their size and shape dependent attributes. The most traditional nanoparticle synthesis method is the batch process due to its fast and easy reaction setup. However, abundant types of nanoparticles are very sensitive to the reaction parameters which directly affect the final particle size and shape. Thus, the process is hardly reproducible.

In this work, we present silver nanoparticle synthesis using a droplet generation in microfluidic device. Microfluidic setup offers higher control over the reaction process by easy control and flexible settings of the system parameters (e.g. mixing and flow rates of the reagents) than batch process. The size and morphology of the final nanoparticles are analyzed and compared to batch process.

Design of Dissolution Method for Poorly Soluble Drug Formulation

Autor: Bc. Erik Sonntag
Ročník: M1
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

One of the ways how to administer a poorly water soluble drug into human body is a long-acting intramuscular suspension. Such formulation offers many advantages when compared with conventional formulations of the same compounds. These advantages include: predictable drug-release profile over a defined time period, decreased side effects, improved systemic availability by avoidance of first-pass effect, etc. The goal of this work is to design an in vitro dissolution method for a particular depot suspension of an inactive medication. After the administration the suspension remains inside the muscle in a form of depot. Solid particles slowly dissolve into tissue fluid and the prodrug is enzymatically metabolized to the active drug. Particle size and surface area are limiting step for dissolution kinetic of this formulation. By mimicking of in vivo conditions in in vitro environment we are enabled to investigate dissolution profile of a depot formulation before in vivo studies. This method would be beneficial in a generic drug development or the enhancement of the formulation in a personalized medicine. For this purpose the development of HPLC method, parametric study of the suspension nano-milling and the sample preparation methodology were carried out.

Development and characterisation of tablets with controlled dissolution kinetics by FDM 3D printing

Autor: Bc. Adam Waněk
Ročník: M1
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

FDM (fused deposition modeling) 3D printing is an innovative, fast-growing method of rapid prototyping where a solid object is formed by the printer according to a supplied 3D drawing. Its application can be found throughout many areas of industry, science or even medicine and pharmacy. Since recently, it is considered to be a possible alternative method for drug dosage form manufacturing. Current manufacturing methods operate with very large batches and usually the API (active pharmaceutical ingredient) dosage and shape of the tablets are set for the whole process. A popular new approach to medication and care (personalized medicine), where the whole treatment is tailored to a specific patient needs, requires new methods of drug dosage form manufacturing where only small batches will be produced, dosage of the API can easily be adjusted and dissolution kinetics of the API can be controlled. Goal of this work is to produce two types of biodegradable filaments (feed for 3D printer) with each of them containing one model API. Models of tablets will be designed to yield various dissolution profiles of each API. This will be achieved by changing inner porosity and outer surface area of tablets. Dissolution kinetics will be then measured by dissolution tests.

Design of Taylor reactor for continuous preparation of silica microparticles

Autor: Bc. David Zůza
Ročník: M1
Školitel: Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

Taylor reactor (TR) is a batch reactor made from two concentric rotating cylinders separated by fluid (Fig. 1a). In real applications modification with steady external cylinder called Taylor-Couette reactor (TCR) is used. TCRs are in general employed for homogenous mixing of highly viscous mixtures such as substrates for enzymatic catalyzes, also for preparation of submicron particles (lower viscosity) or reactions, but their feasibility for microparticle synthesis still needs to be investigated. This work is based on findings previously reported in my bachelor thesis, where TCR for the preparation of silica particles was used (Fig. 1b). The goal of this work is an improvement of batch preparation of microparticles by means of continuous TCR and use of narrower shear rate distribution provided by TCR to decrease a polydispersity of produced particles. In pursuit of achieving this goal TCR was redesigned with the lower ratio between the height of reactor and gap between cylinders. Results of this work may contribute to continuous production particles with lower polydispersity compared to common batch-wise synthesis. Additionally, the mathematic model will be prepared to bring insight into nontrivial flow regimes typical for TCR and particle synthesis.

Linking micro-scale and meso-scale models for catalytic filter

Autor: Bc. Martin Šourek
Ročník: M1
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

The increasingly stringent automotive emission regulations enforce the use of particulate filters to effectively control the particulate emissions from both diesel and gasoline engines. Due to the cost and size limitations of the exhaust gas after-treatment system, it is favorable to combine the particulate filter with a catalytic reactor for conversion of gaseous pollutants. The properties of the resulting catalytic filter are highly dependent on the quality of the catalytic coating. In order to accelerate the design process of catalytic filters, it is necessary to understand the relation between the device microstructure, e.g. the pore structure and coating distribution, and the full device performance (pressure drop, conversion and filtration efficiency). This study represents one part of a reliable multi-scale CFD model development for catalytic filters. A new boundary condition mapping was developed to transfer the flow data from a macro-scale model of the entire filter channel to a micro-scale simulation of the porous wall. In this way, a more realistic prediction of flow field in the wall microstructure was achieved, which provided improved estimates of the device filtration efficiency depending on the substrate and catalytic coating properties.

Sekce: **Chemical Engineering II (B141b)**

Předseda komise: doc. Ing. Miroslav Šooš, Ph.D.

Komise: Ing. Eliška Skořepová, Ph.D., Ing. Matěj Novák, Ing. Jakub Mužík, zástupce sponzora

8:00	zahájení	
8:20 - 8:40	Nasrin Bakhshiyeva	Incorporation of API in tablet coating using airbrush technique
8:40 - 9:00	Samuel Frei	Design and development of stimuli-responsive magnetoliposomes
9:00 - 9:20	David Gráf	Optimalizace depozice nanočástic pomocí elektrostatických čoček
9:20 - 9:40	Vojtěch Konderla	Enhancement of graphite felt electrode for vanadium redox flow battery by in-cell graphene oxide electrodeposition
9:40 - 10:00	Lucie Kopačková	Immunoliposomes: development and antibody coupling strategies
10:00 - 10:20	Jakub Regner	Effect of chemical structure of selected organic redox compounds on their electrochemical properties using rotation disk electrode
10:20 - 10:40	přestávka	
10:40 - 11:00	Martin Krov	Dripping characterization from single needle
11:00 - 11:20	Pavλίna Michaláková	Interaction of surface-modified nanoparticles with tumor and immune cells
11:20 - 11:40	Bager Baris Solgun	Influence of temperature and initial concentration of NaOH on pH dynamic behaviour of GO _x -Ferricyanide-Glucose system in CSTR
11:40 - 12:00	Barbora Tučková	Co-swelling of PE in gas and liquid and its impact on morphology
12:00 - 12:20	Pavel Zelenka	Construction and optimization of flow cell for particle separation and analysis
	přestávka	
12:40		představení sponzorů, vyhlášení výsledků

Incorporation of API in tablet coating using airbrush technique

Autor: Bc. Nasrin Bakhshiyeva
Ročník: M2
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Spray coating of tablets is an important operation in the pharmaceutical industry, since it is mainly used to product protection, better appearance or brand recognition. In some cases it can be used for modification of dissolution kinetics. Film coating of tablets is the application of a thin layer of coating material to modify the tablet properties. Materials for coating may include various substances, such as natural or synthetic resins, gums, sugar, plasticizer and colorant and sometimes flavoring material. Addition of Active Pharmaceutical Ingredient (API) to film coating process is presented in this work. This method can enhance solubility of hydrophobic API, or it can create complex multilayer tablet with more than one API. For this purposes, the airbrush technique was utilized to spray solution of the coating agent together with API onto glass samples. The objective of this study is an investigation of incorporation of API into the tablet coating by utilization of airbrush technique. Polyvinylpyrrolidone along with fluorescein as model API was applied as model coating agent. Layer distribution was examined on confocal laser scanning microscope, where pictures were taken. Determination of the average layer thickness was analysed by ImageJ software program.

Design and development of stimuli-responsive magnetoliposomes

Autor: Samuel Frei
Ročník: B3
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Over the last years, significant effort has been invested in research of so-called magnetoliposomes, which are a combination of liposomes and magnetic nanoparticles (NPs). While liposomes can be used as vesicles for drug delivery, incorporating magnetic NPs such as Fe₃O₄ can be used for targeted delivery as well as on-demand drug release using an alternating magnetic field. Based on a surface modification/stabilization of NPs, they can show hydrophilic or hydrophobic behavior. Also, different types of behavior between them and liposomes can be observed (e.g. aggregation). This work focuses on the usage of several types of Fe₃O₄ NPs (Dextran 40, sodium citrate and dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC) stabilizers) and multiple ways of magnetoliposomes preparation.

Tests for the movement in the magnetic field and for the radiofrequency-triggered release of cargo were carried out with magnetoliposomes (400-500 nm) prepared with DPPC-stabilized Fe₃O₄ NPs loaded by 6-carboxyfluorescein.

Optimalizace depozice nanočástic pomocí elektrostatických čoček

Autor: David Gráf
Ročník: B3
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Urged need of new, more effective technique of nano-sized particle production is growing in the scientific and industrial fields. One of the promising methods which can fulfill these requirements is electrospraying. Using this technique, we are able to control the droplet size, charge and frequency of their generation. Moreover, the produced particles are of a narrow particle size distribution, because the mechanism of deposition prevents the aggregation of particles. The deposition efficiency of charged spray on an object is much higher than for uncharged droplets, but the shape of the deposition cone is impractical for spraying on larger surfaces. The goal of this work is to investigate the influence of the electrostatic field on deposited particulate layers. To improve the deposition of particles and specifically, to control the geometry of deposition cone, we utilize electrostatic lenses attached to the electrospraying system. By comparing behaviours of systems with and without the lenses, respectively, we showed that the presence of electrostatic lenses significantly improves the resulting layer quality. We further present a broad parametric study of the layer quality dependence on the electrostatic lenses that may be useful both for the scientific community and industry.

Enhancement of graphite felt electrode for vanadium redox flow battery by in-cell graphene oxide electrodeposition

Autor: Vojtěch Konderla
Ročník: B3
Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Energy efficiency of vanadium redox flow batteries can be significantly improved by enhancement of catalytic properties of graphite felt electrode, e.g., by its heating, etching or by deposition of electrocatalytic nanoparticles. In this study, graphene oxide (GO) is electrodeposited on the positive battery electrode in order to create more active sites in the felt where the reaction between VO_2^+ and VO_2^+ can occur. We investigated the effect of various deposition conditions on the performance of the electrode in the battery single-cell. The electrochemical impedance spectroscopy, load curve measurements and charge-discharge cycling of the battery revealed significant improvement of felt conductivity and catalytic activity due to GO deposition. Subsequently, the homogeneity of the deposited GO was observed by scanning electron microscopy and the changes in the specific surface area were evaluated from nitrogen physisorption based on Brunauer-Emmett-Teller theory.

Immunoliposomes: development and antibody coupling strategies

Autor: Bc. Lucie Kopačková
Ročník: M1
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Immunoliposomes are promising in field of drug delivery systems, offering targeting and increased therapeutic index of anti-cancer drugs. They consist of two main parts: 1) antibody or antibody fragments, that provide active targeting to the tumor site; 2) liposomes, accumulating, stabilizing and protecting the drug against the degradation. Many liposomal products are on the market (e.g. liposomal doxorubicin). Nevertheless, only few immunoliposomal formulations reached clinical trials.

The Fab' fragments of IgG M75 antibody (specific for Carbonic Anhydrase IX, overexpressed on colorectal carcinoma, e.g. HT-29 cell line) were prepared, reduced and conjugated to PEGylated liposomes via maleimide group. ELISA- like test, polyacrylamide gel electrophoresis (PAGE) and size-exclusion chromatography (SEC) have been carried out to optimize the fragment generation protocol. Immunoliposomes with prepared antibody fragments were characterized by dynamic light scattering and ELISA-like test. Immunoliposomes' ability of binding the target cells will be studied in vitro using HT-29 cell line.

Effect of chemical structure of selected organic redox compounds on their electrochemical properties using rotation disk electrode

Autor: Jakub Regner
Ročník: B3
Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

The intermittency of photovoltaics and wind electricity source is the main technical obstacle for the distribution grid. Redox flow battery (RFB) is a technology for the compensation of fluctuations between the generation and consumption of the electricity. In this system the energy is stored in liquid electrolytes which are circulated through the battery stack. Vanadium RFB is currently the most technologically mature system, but high cost and low abundance of vanadium motivate for research of alternative redox compounds. Organic redox compounds can provide more-electron redox reaction and appropriate properties as an active material. In this work we study the electrochemical reversibility and transport properties of selected quinone derivatives on glassy carbon rotating disk electrode. The diffusion coefficient and reaction rate constant was evaluated from polarization curves under different electrode rotation rates using Koutecky-Levich equation. The effect of number of substituents and its position on quinone molecule in acidic electrolyte is systematically investigated.

Dripping characterization from single needle

Autor: Martin Krov
Ročník: B3
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Dripping and jetting provides a simple way of creating spherical drops that could be used for fabrication of liquid marbles, however a uniform diameter the drops is required. The goal of this study was to investigate the effect of process parameters (temperature, the speed of the linear pump, diameter and length of the needle) on droplet size. The most desired size were 1.5 mm monodisperse ones. Needles of different length and diameter connected to a linear pump were used for creating a droplet. Two hollow aluminum blocks were used as liquid reservoirs. The first one was equipped with a standard plastic syringe, while in the second one the liquid was squeezed out directly from the block by using a piston. Images of the drops were captured with a high-speed camera and consequently, software FIJI was used for image analysis to determine the size of the droplets. It was found that jetting regime is either unstable or far too sensitive to slight fluctuations in the parameters of the liquid, which results in large variation in droplet sizes. Drops produced by dripping regime were larger than intended (1.8 mm). However, dripping showed a remarkable consistency of drop size, making it a useful method for creating liquid marbles with precise control of diameter.

Interaction of surface-modified nanoparticles with tumor and immune cells

Autor: Pavlína Michaláková
Ročník: B3
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Cancer is one of the world`s biggest health problems and one of the leading causes of death. The methods commonly used for the cancer treatment have many side effects and are non-effective for many patients. These problems could be solved by using chemical robots – nanoparticle based carrier systems able to specifically deliver the encapsulated drug to the tumor, which would minimize the side effects and maximize the treatment efficiency. However, most of the intravenously administered nanoparticles are recognized by the immune system and are removed from the bloodstream by macrophage phagocytosis. The presented work is based on the results of in vivo study (Lizoňová et al., 2018) and explores the interaction of antibody-modified “stealth” nanoparticles with the target tumor cells (HT-29 cell line) and with macrophages (J774.A1 cell line). The main aim of the work is to optimize the nanoparticle dosage leading to preferential adhesion to the tumor cells, while avoiding the macrophages. Prepared nanoparticles were characterized by Dynamic Light Scattering (160 nm), ELISA-like test and the experiments with the cell lines were evaluated via fluorescent microscopy.

Influence of temperature and initial concentration of NaOH on pH dynamic behaviour of GOx-Ferricyanide-Glucose system in CSTR

Autor: Bc. Bager Baris Solgun
Ročník: M2
Školitel: Ing. František Muzika, Ph.D.

Glucose oxidase (EC 1.1.3.4, from *Aspergillus Niger*) catalyzes the oxidation of β -D-glucose δ -lactone in the presence of a variety of oxidizing substrates, including molecular oxygen (O_2) and many one and two electron acceptors [1]. $K_3 [Fe(CN)_6]$ is used as electron acceptor in this work. Glucose oxidase (GOx) is widely used for the determination of dissolved glucose in body fluids (diagnostics) or in nanotube biofuel cells [2].

In the experiment there were 4 stock solutions, namely NaOH, $K_3 [Fe(CN)_6]$ (936mM), GOx (58.972U/ml) and glucose (48mM). The initial concentration of NaOH is adjusted in each experiment to see the effect on the reaction. The pH is measured using pH meter HI 5222-2. The temperature of stock solutions is maintained using dry thermostat WiseTherm HB-R and to the heater/stirrer Wisd MSH-20D beneath the CSTR.

The experiments with pH oscillatory behaviour is shown in the graph. The largest pH oscillation measured in my experiment with more than 2 pH units is show as blue curve. [1] Vladimir K. Vanag, David G. Míguez, and Irving R. Epstein, *The Journal of Chemical Physics* 125, 194515 (2006)

[2] Ágnes Ch., Reuillard B., Le Goff A., Holzinger M. and Cosnier S., *Electrochemistry Communications* 34, 105-108, (2013).

Co-swelling of PE in gas and liquid and its impact on morphology

Autor: Barbora Tučková
Ročník: B3
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polyolefins, namely polyethylene (PE) and polypropylene (PP), are the largest class of commodity thermoplastics. Their easy processability and low price make them the most widely produced and used synthetic polymers. Polyolefins are semi-crystalline materials, i.e., they consist of amorphous and crystalline phase. Only amorphous phase changes its volume during the swelling, whereas the crystalline part remains the same. In this work, we investigate the swelling of PE in a mixture of liquid and gaseous hydrocarbons (e.g., liquid n-hexane and gaseous ethylene), particularly we measure the effect of gas (ethylene) pressure on the swelling. These thermodynamic data are not only scientifically interesting, but are applicable as input data for the process optimization. The second part of this work focuses on morphology changes of PE before and after swelling by liquid penetrant. For this purpose, we use Atomic force microscope (AFM) of samples prepared for scanning by cryo-ultramicrotomy. Extensive swelling causes irreversible changes in semi-crystalline morphology due to deformations of both crystalline and amorphous domains. Our swelling and morphology measurements are compared to available theories.

Construction and optimization of flow cell for particle separation and analysis

Autor: Pavel Zelenka
Ročník: B3
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

The behaviour of pharmaceutical tablets in aqueous media is an important part of the drug design. The dissolution of an active ingredient is greatly influenced by the process of tablet disintegration and can affect crucial parameters of the treatment. Therefore, it is necessary to understand the dynamics of both processes. In previous work, many widely used methods were examined to characterize these processes but none of them could provide results comprehensive enough. The presented work deals with the design of the new method for disintegration residual size distribution measurement and separation based on the combination of hydrodynamic fractionation and image processing in public domain program ImageJ. The method utilizes differences of the sedimentation rates between particles of different sizes. A flow cell was designed, in which the flow rate of a fluid medium is linearly dependant on the z-axis coordinate. In this environment, the point of equilibrium exists for each particle between the flow rate of the medium and the sedimentation rate of said particle. This work focuses on proving the concept viable using model spherical glass particles and comparing the particle size distribution measured by this method with particle characteristics from other conventional methods.

Sekce: **Chemické inženýrství I (BS9)**

Předseda komise: prof. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Komise: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D., Ing. Lenka Krajáková, Ing. Vojtěch Šálek, zástupce sponzora

8:30	zahájení	
8:40 - 9:00	Kateřina Kholyavytská	Studium silových interakcí polyethylenu
9:00 - 9:20	Jakub Klimošek	Experimental diffusion study in polyolefins and comparison to free volume theory
9:20 - 9:40	Tomáš David	Predikce reologických vlastností stéricky stabilizovaných koloidních systémů
9:40 - 10:00	Tomáš Hlavatý	Vylepšení meso-scale modelů katalytických filtrů zohledněním zakřivení kanálku monolitu
10:00 - 10:20	přestávka	
10:20 - 10:40	Jakub Kovačovič	Preparation of PANI-based adsorbents for CO ₂ capture
10:40 - 11:00	Vladimír Němec	Vliv procesních a formulačních parametrů na mechanické vlastnosti granulí připravených vysokosmykou granulací
11:00 - 11:20	Jan Němec	Analýza tlakových ztrát v automobilových filtrech pevných částic
11:20 - 11:40	Matěj Černý	Replikace nanostruktury povrchu křídla vážky do polymerní matrice
	přestávka	
12:00		představení sponzorů, vyhlášení výsledků

Studium silových interakcí polyethylene

Autor: Bc. Kateřina Kholyavytská
Ročník: M2
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Znalost silových interakcí polyolefinů hraje klíčovou roli jak při studiu jejich mechanických vlastností, tak i při jejich průmyslovém zpracování. Adhezní síly působící mezi částicemi polyolefinů mohou vést k nežádoucí aglomeraci částic polyolefinů v reaktoru nebo uvnitř odplyňovacích jednotek. Mezi tyto silové interakce patří van der Waalsovy síly, přitažlivé elektrostatické síly, tvorba kapalných můstků a provazování neboli tzv. entanglement polymerních řetězců. Důležitost jednotlivých silových interakcí je z velké míry dána dobou kontaktu částic při jejich srážce. Největší výzvou ve studiu adhezních silových interakcí je pochopení a kvantitativní zmapování entanglementu, který představuje zcela neprobádanou oblast kontaktní mechaniky polymerních částic. Jedná se o spojení částic propletením polymerních řetězců na povrchu částic, které může být natolik silné, že dá vzniknout pevnému aglomerátu. Tato práce se zaměřuje na fundamentální výzkum adhezních sil mezi polyethylenovými částicemi včetně entanglementu pomocí silové spektroskopie na mikroskopu atomárních sil (AFM). Zachycením a statistickým zpracováním tohoto jevu na mikroskopické úrovni lze nejen dodat zcela chybějící kvantitativní data v této oblasti, ale také lépe pochopit aglomerační kinetiku polyethylenových částic.

Experimental diffusion study in polyolefins and comparison to free volume theory

Autor: Bc. Jakub Klimošek
Ročník: M1
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

The information about monomer(s) and/or penetrant(s) transfer in polyolefins is essential for the optimization of polymerization and down-stream processes on the industrial scale. Diffusion measurements provide us with degassing characteristic of produced raw polymer or with the information about monomer transfer to catalyst sites in growing particles. The aim of this study is the systematic measurement of diffusion in polyethylene in dependence on sample crystallinity, temperature and penetrant type. For this purpose we improved the pressure decay apparatus capable to obtain diffusivity of gaseous penetrants in polyolefins. In this apparatus, pressure evolves due to the dynamics of sorption/desorption of penetrant(s) in the sample. During last year, the automated pressure decay apparatus was developed in line with industry 4.0 efforts. Thanks to the automated measuring process we were able to extend our database of diffusion data, which nowadays includes large range of polyolefin samples, penetrants and pressures. The theoretical part discusses the usage of a free volume theory to diffusion processes. This theory provides a useful comparison to the experimental diffusion data and allows to predict the diffusion of different penetrants in polyolefin samples.

Predikce reologických vlastností stéricky stabilizovaných koloidních systémů

Autor: Tomáš David
Ročník: B3
Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Koloidní disperze jsou velmi důležitou součástí mnoha průmyslových odvětví. Jejich uplatnění nalezneme například v oblasti nátěrových hmot a barviv, kde umožňují snížit množství ekologicky problematických organických rozpouštědel. Při jejich výrobě a zpracování se však často setkáváme s problémem koagulace dispergovaných částic. Vzniklé agregáty výrazně ovlivňují vlastnosti disperze, v krajních případech může dojít až k nežádoucí koagulaci celého systému. Abychom porozuměli příčinám koagulace disperzí, je třeba studovat podmínky jejich stability. Pro stabilizaci disperzí se využívají surfaktanty buď ionogenní (elektrostatická stabilizace) nebo neionogenní (stérická stabilizace). Uspokojivá predikce rheologického chování stéricky stabilizovaných disperzí zůstává otevřeným problémem, který jsme se rozhodli řešit tzv. metodou diskrétních elementů, v níž je chování koloidních částic určeno silami na ně působícími. V modelu jsou zahrnuty mezičásticové interakce: nekontaktní Van der Waalsovy síly a nově implementované síly stérické repulze v kombinaci s kontaktní JKR teorií. Důležitou součástí modelu pak představuje také vzájemná interakce částic a tokového pole. Predikované rheologické charakteristiky polymerních disperzí jsou srovnány s experimentálními daty převzatými z literatury.

Vylepšení meso-scale modelů katalytických filtrů zohledněním zakřivení kanálku monolitu

Autor: Tomáš Hlavatý
Ročník: B2
Školitel: Ing. Martin Isoz

Zpracování výfukových plynů v automobilech je v současnosti zajišťováno filtry pevných částic a katalyzátory pro snížení obsahu plynných znečišťujících látek. Dříve musely obsahovat filtry pevných částic pouze automobily se vznětovými motory, ale normou EURO 6c platnou od roku 2017 byla tato povinnost rozšířena i na zážehové motory. Vzhledem k technologické podobnosti obou zařízení se zdá být přirozené zkombinovat je do jedné součástky, katalytického filtru. Pro dosažení vhodné provozní charakteristiky katalytického filtru je nutné optimalizovat distribuci katalyzátoru na filtru za účelem minimalizace tlakové ztráty a maximalizace účinnosti zařízení. Tato práce je součástí více-škálového modelování katalytických filtrů. Vstupním parametrem výpočtů je permeabilita stěny kanálku katalytického filtru získaná z CFD modelu proudění mikrostrukturou stěny. Permeabilita stěny je použita pro výpočet proudění v reprezentativní jednotce katalytického filtru, z čehož je možné odhadnout tlakovou ztrátu celého zařízení. Cílem práce bylo zpřesnit geometrii existujícího modelu. Uvažováním zahnutí stěn kanálku způsobeného přítomností katalytické vrstvy je dosaženo přesnějšího popisu proudění v zařízení a zjednodušení sdílení dat mezi makro- a mikroměřítkem vyvíjeného více-škálového modelu.

Preparation of PANI-based adsorbents for CO₂ capture

Autor: Bc. Jakub Kovačovič
Ročník: M2
Školitel: doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

Carbon dioxide emissions are believed to be a major contributor to global warming. As a result of that, large anthropogenic CO₂ sources such as burning fossil fuels or industrial production will be required to implement carbon capture and storage technologies to control CO₂ emissions. Very important part of this technology is to efficiently capture the CO₂. In this work, we report about preparation of monolithic form of porous sorbents for CO₂ capture. To form porous material with suitable porosity, pore size distribution and appropriate surface groups to maximize the sorption of CO₂, we used polymerization of aniline in the presence of two fillers, polystyrene nanoparticles and expanded graphite. Prepared material was consequently carbonized and KOH activated to convert polyaniline into highly porous active carbon. Presented study will be focused on the impact of polymerization conditions, ratio of filler to polyaniline and KOH activation conditions on the basic properties of porous material, i.e. porosity, specific surface area and pore size distribution. Obtained results will be latter on used to optimize the production process of PANI-based adsorbents.

Vliv procesních a formulačních parametrů na mechanické vlastnosti granulí připravených vysokosmykovou granulací

Autor: Bc. Vladimír Němec
Ročník: M1
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Vysoko-smyká granulace představuje významnou jednotkovou operaci ve farmaceutickém průmyslu. Účinné látky (API) jsou velmi často hydrofobního charakteru, zatímco ostatní excipienty jsou spíše hydrofilní, návržení optimálního granulačního procesu spolu s vytvořením ideální formulace je kritickým faktorem pro úspěšnou vysoko smykou granulaci. Tato práce se zabývá optimalizací granulačního procesu pro ternární směs ibuprofen (aktivní látka) - laktóza (plnivo) - předželovaný škrob (pojivo) byla použita jako modelová formulace. Byly sledovány základní vlastnosti granulí jako sypná hustota a distribuci velikosti granulí s fokusem na množství přegrnulovaného produktu v závislosti na množství pojiva ve vsádce (vyjádřeno pomocí poměru přidané vody k pevné látce L/S). Vliv granulačních parametrů (L/S; množství pojiva) byl dále vyhodnocován pomocí měření mechanických vlastností a disolučního chování, tedy vlastností, které hrají významnou roli pro další zpracování a uvolňování účinné látky z konečného produktu – tablet.

Analýza tlakových ztrát v automobilových filtrech pevných částic

Autor: Bc. Jan Němec
Ročník: M2
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Výfukové plyny obsahují mikroskopické částice sazí, na jejichž povrchu mohou být adsorbovány další škodlivé látky. Množství pevných částic ve výfukových plynech je proto regulováno emisními normami. Filtry pevných částic jsou dnes nepostradatelnou součástí všech automobilů s diesellovými motory a nově jsou řazeny také za benzinové motory. Toto zařízení však představuje překážku ve výfukovém potrubí, která způsobuje tlakovou ztrátu a snižuje účinnost motoru. V případě moderních katalytických filtrů pevných částic, které mají uvnitř porézní struktury nanosen katalyzátor, je nutné nalézt kompromis mezi nízkou tlakovou ztrátou, vysokou filtrační účinností a katalytickou aktivitou. Celková tlaková ztráta se skládá z několika příspěvků: Jedná se především o kontrakci/expenzi plynu na začátku/konci filtru, jeho proudění kanálkem a průchod skrz porézní stěnu. V této práci je diskutován vliv umístění katalyzátorů na stěnu filtru. V nově vyvinutém reaktoru byla naměřena tlaková ztráta pro několik filtrů s různě nanosenou katalytickou vrstvou. Velikost tlakové ztráty byla také určena pomocí matematického modelu, jehož výsledky byly porovnány s naměřenými hodnotami.

Replikace nanostruktury povrchu křídla vážky do polymerní matrice

Autor: Bc. Matěj Černý
Ročník: M2
Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Dragonfly wings show spectacular antibacterial property thanks to a hierarchical topography. The surface of the wings consists of the high aspect ratio nanopillars as tall as 200 nanometers. When a bacterial cell comes into contact with the wing structure the mechanical stress between pillars and the cell wall causes its rupture and cell lysis. This theory implies the antibacterial effect is solely a result of the topography with no or negligible effect of the chemical nature of the structure. This work is focused on creating an artificial surface with the same topography as it is found in domestic dragonflies and damselflies (Fig. 1). In the first step, the topography of various wings was observed and analysed using a scanning electron microscope (SEM) and compared with the antibacterial structures described in the literature. Next, a negative stamp from the biological templates was made by a soft lithography method using polydimethylsiloxane (PDMS). The surface of the PDMS with replicated structures was again analysed using SEM microscope and will be used in further experiments for the preparation of positive replica. Finally, surface properties as wettability, contact angle and antibacterial effect along with resistance to bio-fouling will be examined.

Sekce: **Chemické inženýrství II (BS4)**

Předseda komise: prof. Ing. Pavel Hasal, CSc.

Komise: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D., Ing. Vít Zvoníček, Ing. Jindřich Mrlík, zástupce sponzora

8:30	zahájení	
8:40 - 9:00	Patrik Bouřa	Příprava a charakterizace biopolymerních mikrocelulárních pěn
9:00 - 9:20	Radek Chmelař	Využití neurálních sítí pro popis chování kapek dekanolu v roztoku dekanoátu
9:20 - 9:40	Wilhelm Feigl	Možnosti optimalizace ejektoru pro použití při zpracování odplynů
9:40 - 10:00	Jan Kejzlar	Polymorphism of active pharmaceutical ingredients
10:00 - 10:20	přestávka	
10:20 - 10:40	Lenka Kolářová	Plastic waste treatment by the means of electrification
10:40 - 11:00	Martina Kukrálová	Experimentální studie PE pomocí DSC
11:00 - 11:20	Ondřej Libánský	Studium dějů probíhajících v zinko-vzduchovém palivovém článku
11:20 - 11:40	Karel Mařík	Matematický model syntézy cefalexinu
11:40 - 12:00	Michaela Mikešová	Stanovení koncentrace a oxidačního stavu vanadových iontů v elektrolytu používaném ve VRPB
	přestávka	
12:20		představení sponzorů, vyhlášení výsledků

Příprava a charakterizace biopolymerních mikrocelulárních pěn

Autor: Bc. Patrik Bouřa
Ročník: M1
Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

V posledních letech je vzhledem ke zvyšujícímu se znečištění životního prostředí plasty vyvíjen čím dál větší tlak na řešení situace. V tomto ohledu mají potenciál biodegradabilní plasty nahradit stávající. Příkladem může být polymléčná kyselina (PLA), která je nejen biologicky odbouratelná, ale navíc je vyráběna z obnovitelných zdrojů. Mimoto je PLA jako jeden z mála biopolymerů schválena k aplikaci v medicíně. Současným trendem výroby materiálů je také snaha o snížení spotřeby výchozích surovin a úsporu energie. Tyto možnosti nabízí vypěněné polymery, které jsou využívány např. jako izolanty, separační membrány, ke kultivaci tkání nebo kvůli svým výborným mechanickým vlastnostem (vzhledem k jejich hustotě). V této práci jsem se zabýval přípravou a charakterizací mikrocelulárních polymerních pěn, které mohou vykazovat mnohem lepší vlastnosti než běžné polymerní pěny. PLA rozpouštěná v kyselině octové byla vypěněna netradiční metodou spinodální dekompozice. Je to poprvé, kdy byla PLA vypěna za použití kyseliny octové, která je díky své velmi nízké toxicitě zajímavou, ekonomicky přívětivou alternativou k toxickým rozpouštědlům. Nedílnou součástí této práce byl také návrh a úspěšná implementace kontinuálního chlazení u vypěňovací aparatury, a to za použití 3D tiskárny.

Využití neurálních sítí pro popis chování kapek dekanolu v roztoku dekanoátu

Autor: Radek Chmelař
Ročník: B3
Školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Tato práce se zabývá možností využití strojového učení, konkrétně neurálních sítí, pro popis chování systému tvořeného z kapek dekanolu v roztoku dekanoátu sodného. Cílem je zjistit, jestli je možné využít neurální síť pro popis takového systému. Z pokusů, kde budou kapky dekanolu umístěny na roztok dekanoátu sodného, získáme snímáním kamerou obrázky, ze kterých obrazovou analýzou získáme souřadnice kapek. Teplotu, koncentraci roztoku, čas od začátku pokusu a objem kapek známe. Tato data předáme jako vstup neurální síti. Neurální síť bude mít za úkol naučit se odhadovat, kde budou kapky v následujícím snímku. Cílem učení je minimalizovat rozdíl hodnot navržených neurální sítí od hodnot skutečných. Naučená síť může být použita pro odhad chování kapek pro ještě nevyzkoušené podmínky a bude možné získat závislost rychlosti, celkové uražené vzdálenosti, nejčastější relativní uspořádání případně nějaké další specifické chování, na teplotě, koncentraci, velikosti kapek, času od začátku pokusu a podobně.

Možnosti optimalizace ejektoru pro použití při zpracování odplynů

Autor: Bc. Wilhelm Feigl
Ročník: M2
Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Velké množství chemických procesů je založeno na interakci fází v soustavě kapalina-plyn. Konkrétní požadavky kladené na danou interakci rozhodují o vhodné podobě průmyslové aparatury. Pro aplikace, kde je žádána velká mezifázová plocha kapalina-plyn, či intenzivní mezifázové sdílení hmoty (mechanické i chemické čištění plynů, sycení kapalin, rychlé heterogenní chemické reakce) se vedle konvenčních aparátů stává rentabilní užívání ejektorového čerpadla, jehož hlavní přednosti spočívají v nízkých pořizovacích nákladech, jednoduchém a elegantním designu a absenci pohyblivých součástí ve styku s plynem, znamenající vyšší spolehlivost a menší náročnost na údržbu. Limitujícím faktorem v používání ejektoru jsou vysoké energetické nároky pro většinu aplikací. V této práci budou představeny některé modifikace ejektoru, umožňující vyšší efektivitu při užití ejektoru při aplikacích jako je čištění odplynů, kde hlavním kritériem optimality je celkové zpracované množství plynu vztažené na jednotku dodané energie. Kromě v současné době již známých modifikací, spočívajících v zařazení rotačního elementu před trysku, byl experimentálně studován také vliv dosud nezkoumaných variant, jako je destabilizace paprsku vody prostřednictvím expanze inertního plynu či smykovým třením o povrch trysky.

Polymorphism of active pharmaceutical ingredients

Autor: Jan Kejzlar
Ročník: B3
Školitel: doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

Liquid assisted grinding is becoming very popular nowadays, due to many advantages such as little amount of solvent and we can obtain new forms, not accessible with other solvent related methods. Purpose of this work is to obtain different polymorphs of API (active pharmaceutical ingredient) and observe factors that may have influence of polymorph forming, such as frequency and time of milling and amount of used solvent.

Plastic waste treatment by the means of electrification

Autor: Bc. Lenka Kolářová
Ročník: M1
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Plastic products are vastly present for example in packaging, electronics, automotive industry and constructions. Consequent plastic waste is treated by incineration or recycling. However, both of the treatments require pre-separation of plastics, which is still a challenging problem. Current methods like manual separation, flotation or methods based on density differences aren't sufficiently effective. The new promising method, triboelectric separation, originates in the idea that every plastic reaches different electrostatic charge and therefore plastic mixtures can be separated in electric field. In this work, we determined the key parameters affecting tribocharging (charging by friction) of common plastics (PP, PS, PET, PVC), and then examined the electrostatic separation. Charging the plastics using self-designed rotational tribocharger showed that the charging dynamics fastens with increasing rotational frequency and the saturation charge is proportional to applied mechanical pressure. We also observed that corona surface treatment significantly fastened following tribocharging. We further compared rotational tribocharging with vibrational one, as rotational tribocharging is well defined; however, vibrational one simulates better the desired industrial application.

Experimentální studie PE pomocí DSC

Autor: Bc. Martina Kukrálová
Ročník: M1
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polyethylen (PE) patří mezi plasty se širokou škálou použití. Jeho vlastnosti se pro průmyslové využití neustále vylepšují. Mechanické vlastnosti a chemickou odolnost polymeru ovlivňuje podíl krystalické fáze. Právě podíl krystalické fáze, tzv. krystalinita, a dynamický vývoj krystalinity během soproce byly pomocí diferenční skenovací kalorimetrie (DSC) studovány.

Jedná se o experimentální metodu, při níž se zkoumají tepelné vlastnosti materiálu. Zahříváním materiálu dochází k fázovým přeměnám, které je možno mimo jiné detekovat a určovat teplotu a entalpii fázových přechodů.

V této práci byla určena teplota a entalpie tání PE a z těchto hodnot byla následně vypočítána krystalinita jednotlivých vzorků. DSC se obecně považuje za jednoduchou a univerzální metodu s lehce interpretovatelnými výsledky. Tento předpoklad platí pouze u nízkomolekulárních látek a kovů. Při měření vysokomolekulárních látek jako je PE je nutné řešit řadu výzev (určení začátku fázových přechodů, šířka fázového přechodu, nehomogenita polymerních vzorků). Úpravou měřících postupů na DSC aparatuře jsme dokázali úspěšně pozorovat vliv sorpčních procesů ve vzorcích PE. Tyto výsledky rozšiřují poznatky v oblasti difúzních procesů v polymerních systémech.

Studium dějů probíhajících v zinko-vzduchovém palivovém článku

Autor: Bc. Ondřej Libánský
Ročník: M2
Školitel: Ing. Jaromír Pociďič, Ph.D.

Integrace obnovitelných zdrojů energie do elektrické sítě je celosvětově na vzestupu a nejinak tomu bude i v blízké budoucnosti. Chceme-li však plně přejít na tyto zdroje, nevyhneme se potřebě sezónního ukládání elektrické energie. V současnosti hojně propagované lithiové baterie nejsou ekonomicky vhodnou technologií pro dlouhodobou akumulaci elektrické energie a vodíkové hospodářství čelí technologické překážce v podobě skladování vodíku. Jedním z perspektivních kandidátů může být „zinková energetika“ na bázi chemie zinek-vzduch, jež jako elektroaktivní látky využívá kovový zinek a vzdušný kyslík. Toto řešení vyniká vysokou hustotou energie, nízkou cenou a využitím materiálů, které jsou málo toxické a dobře recyklovatelné. Před masivním rozšířením tohoto konceptu je ovšem nutné ověřit jeho technologickou způsobilost. V rámci prezentované práce jsou studovány děje probíhající při provozu zinko-vzduchového palivového článku sloužícího k uvolnění uložené energie ze zinkového paliva. K tomuto účelu byl zkonstruován laboratorní palivový článek, jehož funkčnost byla testována za různých experimentálních podmínek. Získané výsledky umožňují porozumět principu fungování palivového článku, díky čemuž může být navrženo řešení s vyšší účinností konverze chemické energie na elektrickou.

Matematický model syntézy cefalexinu

Autor: Bc. Karel Mařík
Ročník: M2
Školitel: prof. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Cefalexin, beta-laktamové antibiotikum první generace cefalosporinů, patří k světově nejvíce předepisovaným léčivům. Specifické při jeho výrobě je, že enzymová syntéza cefalexinu je provázána následnou nežádoucí hydrolyzou produktu. Ta může být potlačena in situ odebíráním produktu, čímž se významně zvyšuje výtěžek reakce. Byly popsány různé způsoby zvýšení výtěžku cefalexinu, např. jeho in situ komplexací nebo snížením obsahu vody v reakčním médiu. Další možností je uskutečnění této syntézy v integrovaném mikrofluidním zařízení, kde zároveň probíhá separace produktu extrakcí s transportem zesíleným vloženým elektrickým polem. Aplikace mikrofluidních zařízení při syntéze látek s vysokou přidanou hodnotou představují slibnou alternativu v porovnání s klasickými vsádkovými reaktory, a to zvl. kvůli snížení transportních odporů, zajištění reprodukovatelných reakčních podmínek a možnosti vložení vnějších silových polí. Předmětem této práce je vytvoření matematického modelu vsádkové enzymové syntézy cefalexinu a identifikace hodnot kinetických parametrů pomocí experimentálně naměřených dat. Optimalizační procedurou byly nalezeny hodnoty rychlostních konstant. Sestavený model bude použit v další práci, která bude zaměřena na syntézu cefalexinu v průtočném mikroseparatoru-mikroreaktoru.

Stanovení koncentrace a oxidačního stavu vanadových iontů v elektrolytu používaném ve VRPB

Autor: Bc. Michaela Mikešová

Ročník: M1

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Alternativní zdroje energie v podobě větrných elektráren a solárních panelů si v dnešní době upevňují svou pozici mezi klasickými zdroji energie, kterými jsou fosilní či jaderná paliva. Problémem alternativních zdrojů je však jejich oscilující výkon, který lze stabilizovat instalací stacionárních úložišť elektrické energie. Tím může být například vanadová redoxní průtočná baterie (VRPB), jejíž nespornou výhodou je obrovská variabilita, zejména nezávislá škálovatelnost výkonu a kapacity. Jednou z důležitých součástí této baterie je elektrolyt, který je tvořen vanadovými ionty rozpuštěnými v roztoku kyseliny sírové. Složení elektrolytu ovlivňuje důležité vlastnosti baterie jako je kapacita či energetické ztráty systému, tudíž přesná znalost koncentrace vanadových a síranových iontů v elektrolytu je nedílnou součástí vývoje technologie vanadových redoxních průtočných baterií.

Tato práce se věnuje možnosti využití manganometrické titrace pro stanovení koncentrace a oxidačního stavu vanadových iontů v elektrolytu vanadové redoxní průtočné baterie a určení vlivů zkreslujících získané výsledky. Důvodem volby této kvantitativní analýzy je její nízká cena a snadná implementovatelnost pro vědecké i průmyslové použití.

Sekce: **Chemické inženýrství III (B03)**

Předseda komise: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Komise: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D., Ing. Anna Zítková, Ing. Simon Jantač, zástupce sponzora

8:30	zahájení	
8:40 - 9:00	Miroslav Blažek	Nanášení porézní katalytické vrstvy do automobilových katalyzátorů a filtrů pevných částic
9:00 - 9:20	Lukáš Joukl	Durability of homogenous and heterogenous ion-exchange membranes for vanadium redox flow batteries
9:20 - 9:40	Martin Kalný	Microstructure based simulation of the disintegration and dissolution of pharmaceutical tablets
9:40 - 10:00	Veronika Lesáková	3D printing of orodispersible films
10:00 - 10:20	přestávka	
10:20 - 10:40	Dominik Čapkovič	Vliv velikosti částic $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ na vlastnosti katalytické vrstvy v automobilovém filtru
10:40 - 11:00	Jan Mokrý	Využití exosomů jako nosičů pro cílené doručování léčiv
11:00 - 11:20	Jana Sklenářová	Nanášení antistatických nanovrstev metodou elektrosprejování
11:20 - 11:40	Jakub Strnad	Chování homogenních iontově-výměnných membrán v elektrickém poli
11:40 - 12:00	Adam Tylich	Experimentální vývoj vodíkové sondy
	přestávka	
12:20		představení sponzorů, vyhlášení výsledků

Nanášení porézní katalytické vrstvy do automobilových katalyzátorů a filtrů pevných částic

Autor: Bc. Miroslav Blažek
Ročník: M2
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Ve spalovacích motorech vznikají výfukové plyny, které obsahují jak plynné, tak pevné složky. Ke konverzi zdraví škodlivých plynných látek se používají automobilové katalyzátory. Pevné částice jsou odstraňovány ve filtrech pevných částic.

Automobilové katalyzátory jsou tvořeny nosičem (monolitem) z keramiky nebo kovu, který se skládá ze soustavy mnoha kanálků pokrytých tenkou porézní vrstvou katalyzátoru. Toto uspořádání umožňuje současně dosáhnout velkého povrchu katalyzátoru a nízké tlakové ztráty. Konverze škodlivin závisí na tloušťce a porozitě nanesené vrstvy.

Filtry pevných částic jsou dnes nepostradatelnou součástí všech automobilů s dieselvými motory a nově jsou řazeny také za některé benzinové motory. V případě filtru jsou kanálky vždy na jedné straně zaslepeny, plyn proto musí projít přes porézní stěnu mezi kanálky. V moderních katalytických filtrech pevných částic je do vnitřní porézní struktury stěny nanesen katalyzátor – i zde je nutné kromě požadované filtrační účinnosti a konverze škodlivin zajistit co nejnižší tlakovou ztrátu filtru.

Cílem prováděného výzkumu je tedy vylepšení postupu nanášení katalytické vrstvy do monolitu a filtru pevných částic namáčením (dip-coating) a dále návrh aparatury pro podtlakové nanášení katalytických vrstev do filtrů pevných částic.

Durability of homogenous and heterogenous ion-exchange membranes for vanadium redox flow batteries

Autor: Lukáš Joukl
Ročník: B3
Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Redox flow batteries are promising technology for electricity storage in large scale applications. However, the current high cost of redox flow batteries limits a wide spread of this technology. Membrane is a critical component of the battery as it determines its performance as well as the economic viability. It acts as a separator preventing mixing of the positive and negative electrolytes, while allowing the transport of ions to complete the electric circuit. An ideal membrane should be ionically conductivity, impermeability for electroactive species and chemically stable. The last aspect is studied within this contribution for various selected homogeneous and heterogeneous ion-exchange membranes. The ion-exchange capacities are measured for pristine membranes and after their exposure to oxidative environment of charged vanadium positive electrolyte. The causes of the degradation of membrane properties are investigated.

Microstructure based simulation of the disintegration and dissolution of pharmaceutical tablets

Autor: Bc. Martin Kalný
Ročník: M2
Školitel: Ing. Zdeněk Grof, Ph.D.

The design of pharmaceutical tablets relies on determination of the optimal formulation parameters that define the tablet shape, structure and composition. Since these parameters also affect the release rate of an active ingredient from it, their optimal values have to be found, so the dissolution curve follows a prescribed profile. However, in order to find their appropriate values, numerous experiments are required. This could be avoided by modelling the tablets disintegration and dissolution behaviour and determining the effects of the formulation parameters. Ultimately, a reliable simulation can be used to predict the dissolution curve and therefore to reduce the number of experiments required. In the present work, the disintegration and dissolution of a directly compressed tablet containing ibuprofen as an active ingredient and croscarmellose as a disintegrant was simulated. Firstly, the discrete element method (DEM) is used to simulate tablet fragmentation triggered by the swelling of the disintegrant. The effect of disintegrant amount and its spatial distribution inside the tablet on the resulting fragment size distribution was evaluated. The dissolution of the fragments was then separately simulated, and the computational simulation results were compared with experiments.

3D printing of orodispersible films

Autor: Bc. Veronika Lesáková
Ročník: M2
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

The 3D printing is a popular technology that planted its roots in a various fields of study including food technology and tissue engineering. It has promise for producing orodispersible drug forms for pharmaceutical industry. One of the 3D printing techniques is Fused deposition modeling (FDM) which builds on filaments that are produced by Hot-melt extrusion, technique which is already frequently used in the pharmaceutical technology. Extrusion applies heat and pressure to melt mixture of ingredients and force it out of a head in a form of a filament. The filaments for oral films are made of various ingredients which includes polymers, active pharmaceutical ingredient, disintegrants, flavours, colours, saliva stimulating agents, plasticizers and surfactants. Because of various excipients that also can be implemented as film formers, 3D printing method seems to be the most advantageous technique of producing orodispersible films. The porous structure of printed films leads to increased dissolution rate in comparison to casted films. The aim of this work is to print a rapid release orodispersible film by choosing suitable polymers, other excipients and printing design.

Vliv velikosti částic $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ na vlastnosti katalytické vrstvy v automobilovém filtru

Autor: Bc. Dominik Čapkovič
Ročník: M2
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Spalovací motory produkují velké množství škodlivých plynů a pevných částic. K největšímu nárůstu automobilů došlo v sedmdesátých letech, což vedlo ke zhoršení ovzduší – začaly se vytvářet emisní normy a automobily musely být vybaveny katalytickými konvertory výfukových plynů. Řešením pro snížení množství pevných částic je použití filtrů pevných částic, jež se nově používají u benzínových motorů. Filtry pevných částic se skládají z velkého množství souběžných kanálků, které jsou vždy na jedné straně zaslepeny tak, aby plyn musel prostoupit přes porézní stěnu do sousedních kanálků. Stejně jako monolity tak i na filtry je nanosená katalytická vrstva suspenze obsahující $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ jako nosič. Tloušťka a umístění vrstvy má zásadní vliv na tlakovou ztrátu filtru. V této práci je použita metoda „dip-coating“ – nanášení namáčením. V suspenzi lze upravovat různé parametry (pH, velikost částic, viskozita), tak aby bylo dosaženo tenké a rovnoměrné vrstvy $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ na povrchu kanálků, případně uvnitř porézní stěny. Velikost částic $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ je jednou z klíčových vlastností suspenze – v této práci byly použity dvě suspenze s velikostí $d_{90} = 8,7$ a $20,5 \mu\text{m}$, které vykazovaly různé fyzikální vlastnosti. Vzorčky byly profukovány různými tlaky a některé z nich byly před samotným nanášením ponořeny do vody.

Využití exosomů jako nosičů pro cílené doručování léčiv

Autor: Bc. Jan Mokry
Ročník: M2
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Tato práce se zabývá využitím exosomů – váčků uvolňovaných buňkami do okolního prostředí – izolovaných z kultivačních médií komerčně pěstovaných buněk a jejich následnou využitelností jako potenciálních součástí nosičů pro cílené doručování léčiv. Po nalezení konzistentního způsobu izolace exosomů se studuje schopnost enkapsulace barviva do těchto částic. Sledována je především účinnost enkapsulace, její časová stálost a schopnost uvolnění enkapsulované látky. Dalším z cílů je také připravit kompozitní částice či agregáty exosomů s laboratorně připravenými liposomy.

Nanášení antistatických nanovrstev metodou elektrosprejování

Autor: Bc. Jana Sklenářová
Ročník: M2
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

As demands on energy increase, it is necessary to improve renewable technologies to obtain higher amount of safe and clean energy. One of the resources, solar energy, can potentially satisfy such demands. According to available data, if we covered only 4 % of deserts with solar panels, they could provide enough electricity for the entire mankind. However, the accumulation of sand particles hinders the efficiency of the solar panels by around 40 %. The panels cannot be efficiently cleaned by water, because water is more precious than electricity in desert areas and mechanical cleaning scratches the panels, which leads to permanent efficiency losses. We aim to find a solution to remove the dust from solar panels utilizing the combination of antistatic coating and electric field. Therefore, we examined the electrostatic charging of sand – glass systems to find the polarity of charge generated on sand particles due to the friction between the particles and solar panel surface made of glass. Afterwards, we applied the method of electrospraying in order to form antistatic nanolayers on glass surface that would be of the same polarity as the sand particles. This layer combined with voltage pulses may ensure repulsion of accumulated dust particles from the panel's surfaces.

Chování homogenních iontově-výměnných membrán v elektrickém poli

Autor: Bc. Jakub Strnad
Ročník: M1
Školitel: doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Homogenní iontově-výměnné membrány se používají v elektrodialyzérech jako permselektivní médium zajišťující požadovanou separaci iontů v elektrickém poli. Při porovnání s heterogenními membránami, které obsahují značné množství iontově nevodivého materiálu, jsou homogenní membrány tvořeny pouze iontově selektivním materiálem a tedy obecně vykazují lepší separační vlastnosti ovšem často na úkor mechanické a chemické stability. Jedním z cílů našeho projektu je pochopit rozdíl v chování homogenní a heterogenní iontově-výměnné membrány v elektrickém poli. Tato práce se zaměřuje na pozorování dějů, které nastávají na diluátové straně membrány při měření voltampérové charakteristiky. Hlavní pozornost je věnována tzv. nadlimitní oblasti v níž dochází k tvorbě elektrokineticky řízených vírů popřípadě ke vzniku jiných jevů, např. štěpení vody. Provádění odsolování v elektrodialyzérech v nadlimitní oblasti je jednou z možností, jak intensifikovat daný proces. K vlastním experimentům byly využity homogenní aniontově i kationtově-výměnné membrány, jež byly integrovány do speciálně vyvinutého čipu umožňující elektrochemickou charakterizaci i pozorování procesů na membráně. Získané výsledky budou detailně popsány a diskutovány s ohledem na provozování elektrodialyzérů v nadlimitním režimu.

Experimentální vývoj vodíkové sondy

Autor: Adam Tylich

Ročník: B3

Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

V primárním okruhu jaderných elektráren se využívá demineralizovaná voda díky svým vhodným fyzikálně-chemickým vlastnostem, snadné dostupnosti a nízké ceně. Nevýhodou je její radiolytický rozklad a následná koroze zařízení. Kvůli zlepšení vlastností se do vody přidávají aditiva. Jedním z nejvýznamnějších je amoniak, jehož radiolytickým rozpadem přímo v primárním okruhu vzniká vodík. Ten zajišťuje v chladivu redukční podmínky a snižuje obsah kyslíku. Z bezpečnostních a ekonomických důvodů je vhodné sledovat koncentraci vodíku, která se pohybuje v jednotkách ppb. Použití většiny na trhu dostupných snímačů není vhodné vzhledem k jejich neselektivitě.

Nabízí se myšlenka využívat k měření koncentrací vodíku polarografické sondy, které jsou často využívány k měření koncentrací kyslíku. Výsledkem vývoje H-metru na bázi polarografických sond by v budoucnu mohl být nový žádaný produkt, protože dnes existuje pouze jediná firma nabízející obdobný přístroj.

Byl sestaven první prototyp H-metru, který je nyní ve fázi testování funkčnosti a přesnosti. Na laboratorní aparatuře byly testovány nově vyvinuté vodíkové sondy. Do budoucna je plánováno zlepšení celkové mechanické odolnosti H-metru a vývoj modernější elektroniky, která by splňovala požadavky na přesnost měření, stabilitu a funkčnost.

Sekce: **Chemické inženýrství IV (B07)**

Předseda komise: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Komise: Ing. Jan Haidl, Ph.D., Ing. Alexandr Romanov, Ing. Jakub Dvořák, zástupce sponzora

8:30	zahájení	
8:40 - 9:00	Ondřej Navrátil	Využití hydrogelových mikrokapslí jako variabilního nosiče léčiva
9:00 - 9:20	Kateřina Sladká	Experimental study of bubble adhesion on solid surface in aqueous solutions of simple alcohols
9:20 - 9:40	Přemysl Richtr	Vliv konstrukce zinko-vzduchové průtočné baterie na její účinnost a životnost
9:40 - 10:00	Kateryna Korniienko	Vliv procesních parametrů mikroenkapsulátoru na přípravu alginátových mikročástic
10:00 - 10:20	přestávka	
10:20 - 10:40	Adrián Žák	Porovnanie kinetiky oxidácie CO a C ₃ H ₆ na automobilových katalyzátoroch Pt/ γ -Al ₂ O ₃ a Pt/CeO ₂ / γ -Al ₂ O ₃
10:40 - 11:00	Jan Šikola	Termografická studie fázového rozhraní v systému kapalyna-plyn
11:00 - 11:20	Ondřej Šrom	Deeper insight into the dynamic light scattering technique for particle size characterization
11:20 - 11:40	Milan Žalud	Nanášení katalytické vrstvy do automobilového filtru - vliv reologie suspenze γ -Al ₂ O ₃
	přestávka	
12:00		představení sponzorů, vyhlášení výsledků

Využití hydrogelových mikrokapslí jako variabilního nosiče léčiva

Autor: Bc. Ondřej Navrátil
Ročník: M1
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Lékové formy s prodlouženou dobou uvolňování účinné látky jsou jednou z lékových forem s cíleně modifikovanou disoluční kinetikou. Jejich snahou je co nejefektivnější využití léčiva, doprovázeno nižší zátěží pro uživatele. Tato práce se zabývá přípravou hydrogelových mikročástic jako možnou alternativou ke klasickým lékovým formám s prodlouženou dobou uvolňování. Mezi částice se strukturou jádro-slupka lze zařadit alginátové kapsle, jež jsou schopny nést v jádře jak hydrofilní nebo lipofilní účinnou látku tak i jejich suspenze. Vlastnosti připravovaných kapslí závisí na volbě systému roztoků. Alginát sodný vždy figuruje jako gelující polymer (gelující v roztoku CaCl₂ procesem externí cross-polymerace) tvořící hlavní strukturu kapsle, kdy roztok v jádře je pak olejového, nebo vodného charakteru. Kapsle byly připravovány enkapsulátorem BÜCHI B-395 PRO, kdy vznikaly frekvenčním rozrušováním laminárního toku tekutiny ze soustředné soustavy trysek. U připravených kapslí byla provedena rozměrová analýza. Vybrané typy byly vybaveny modelovou účinnou látkou a byla testována funkčnost tohoto navrhovaného systému. Rovněž byla prozkoumána povrchová modifikace kapslí chitosanem.

Experimental study of bubble adhesion on solid surface in aqueous solutions of simple alcohols

Autor: Bc. Kateřina Sladká
Ročník: M2
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

This work deals with the study of bubble adhesion on a solid surface in the differently concentrated aqueous solutions of n-propanol. Alcohols influence adhesion and decrease the surface tension of liquid. Bubble adhesion can be used to determine the type of solids which are divided into two groups according to their character – hydrophobic and hydrophilic. Adhesion can work only on a hydrophobic surface and it determines the efficiency of a separation and flotation process. The image sequences are captured by a high-speed camera. A process and used substances are characterized by the velocity of a rising bubble, the angle of wetting and the size of a three-phase contact line. All the parameters describing this process are evaluated in NIS-Elements program. The three measured solutions contained 30, 10 and 0,5 molar percent of n-propanol. It was found that bubble adhesion had a strong dependency on the alcohol concentration of a solution. The size of a three-phase contact line decreased with the increasing contain of an alcohol in solution in proportion to a bubble size.

Vliv konstrukce zinko-vzduchové průtočné baterie na její účinnost a životnost

Autor: Bc. Přemysl Richtr
Ročník: M1
Školitel: Ing. Jaromír Pociedič, Ph.D.

S ohledem na omezené množství fosilních paliv je stále více elektrické energie produkováno z obnovitelných zdrojů, které mají ovšem kolísavou produkci energie, a tudíž je nutné stabilizovat jejich výkon. V dnešní době jsou k tomuto účelu nejvíce v používány Li-iontové baterie, vanadové redoxní průtočné baterie či vodíková energetika, nicméně tyto technologie limituje cena a zásoba nerostných zdrojů či nízká energetická účinnost. Proto se hledají cenově efektivní systémy pro akumulaci a jako slibné řešení se ukazují zinko-vzduchové průtočné baterie, které mají vysokou hustotu energie, jsou ekologické a na zemi jsou velké zásoby zinku. Přes perspektivnost systému je však tato technologie velmi málo prozkoumaná a existuje velmi omezené množství představených technických řešení. Cílem této práce bylo zjistit vliv designu baterie na její fungování a účinnost. V rámci studie byla připravena série konstrukčních řešení, které byly charakterizovány galvanostatickým nabíjením a vybíjením. Na základě výsledků byly navrženy změny, které přispěly k lepšímu fungování zinko-vzduchové průtočné baterie. Zásadní vliv na funkčnost baterie mělo uspořádání vzduchové elektrody sloužící k redukci a zpětné regeneraci vzdušného kyslíku.

Vliv procesních parametrů mikroenkapsulátoru na přípravu alginátových mikročástic

Autor: Kateryna Kornijenko
Ročník: B3
Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

V posledních letech dochází k rozvoji v oblasti enkapsulace látek. Enkapsulace je proces, kdy jsou do polymerní matrice začleněny další látky, například vitamíny, enzymy nebo léčiva. Takto připravené částice mohou být využity pro cílené doručení léčiv nebo zefektivnění jejich vstřebávání v těle pacienta. Tato práce se zabývala výzkumem alginátových mikročástic, vyráběných na laboratorním Enkapsulátoru BÚCHI B-395 Pro. Princip spočíval v protlačování vodného roztoku alginátu sodného skrz trysku enkapsulátoru. Pomocí vibrační frekvence byl tento tok rozrušován na kapky o stejných rozměrech. Ty byly dispergovány pomocí elektrického napětí, díky čemuž byla eliminována možnost koalescence mezi jednotlivými kapkami. Částice byly následně vytvrzeny v lázni s roztokem CaCl_2 , kde docházelo k polymeraci díky záměně sodných iontů za dvojmocné vápenaté ionty. Na základě popsané metody přípravy mikročástic byla provedena parametrická studie, zahrnující výzkum vlivu parametrů přístroje na charakteristiky mikročástic. A to zejména vliv elektrického napětí, vibrační frekvence a vzdálenost trysky od hladiny vytvrzovacího roztoku CaCl_2 . Vyhodnocování charakteristik částic bylo provedeno pomocí programu Image J (Fiji), a byl vytvořen poloautomatický algoritmus pro jejich obrazovou analýzu.

Porovnanie kinetiky oxidácie CO a C₃H₆ na automobilových katalyzátoroch Pt/ γ -Al₂O₃ a Pt/CeO₂/ γ -Al₂O₃

Autor: Bc. Adrián Žák
Ročník: M1
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Táto práca študuje kinetiku nežiadúceho javu, ktorý je v praxi označovaný názvom dvojité zapálenie katalytickej oxidácie CO. Počas bežnej automobilovej prevádzky je tento jav pozorovaný pri nepravidelnom jazdnom cyklu napríklad v hustej premávke, ale hlavne počas studeného štartu z dôvodu, že teplota katalyzátoru je nižšia, než jeho optimálna prevádzková teplota. V tomto deji môže byť pozorované, že s rastúcou teplotou dochádza k dočasnému poklesu konverzie CO. Nárast koncentrácie CO je z časti spôsobený jeho tvorbou, ako vedľajšieho produktu nedokonalkej oxidácie propénu a z časti tvorbou organických medziproduktov katalytickej oxidácie propénu, ako etylén, octany a mravčany, ktoré blokujú katalyticky aktívne centrá a prispievajú k inhibícii reakcie. Boli testované dve vzorky automobilových katalyzátorov Pt/ γ -Al₂O₃ a Pt/CeO₂/ γ -Al₂O₃. Na vzorke s obsahom CeO₂ je pozorovaný nižší pokles konverzie CO.

Termografická studie fázového rozhraní v systému kapalina-plyn

Autor: Bc. Jan Šikola
Ročník: M2
Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Procesy odehrávající se na fázovém rozhraní kapalina-pára, kapalin-plyn jsou zásadní pro popis celé řady operací, jež se uplatňují v mnoha oblastech chemického průmyslu. Tyto děje tvoří podstatnou část separačních procesů, z nichž se zejména destilace, sušení a odpařování podílí až deseti procenty na celosvětové energetické spotřebě. Při návrhu aparátů se vychází z empirických integrálních dat, která však svým charakterem neumožňují optimalizaci jednotlivých součástí daného procesu. Z tohoto důvodu je klíčové bližší studium dějů odehrávajících se lokálně na fázovém rozhraní a jejich správné popsání. Pro tuto studii byla jako vhodná neinvazivní metoda navržena termografie, jež by mohla poskytovat informace o teplotě fázového rozhraní kapalina-plyn (či kapalina-pára) v reálném čase. To by umožnilo další studie aktivity rozhraní z hlediska sdílení tepla a hmoty, důležitých dějů probíhajících ve zmiňovaných separačních procesech. Tato práce se zabývá návrhem a konstrukcí experimentální aparatury pro termografické měření klidné hladiny v situacích s probíhajícím mezifázovým sdílením tepla a hmoty, kde se očekává rozdílná teplota rozhraní od jádra obou fází. Aparatura je navržena k zodpovězení klíčové otázky projektu: Je možné termograficky spolehlivě určovat teplotu fázového rozhraní?

Deeper insight into the dynamic light scattering technique for particle size characterization

Autor: Bc. Ondřej Šrom
Ročník: M2
Školitel: doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

The size of nanoparticles (NPs) is an essential attribute which determines their physical and chemical properties, such as solubility, melting point, surface area, surface plasmon resonance, catalyst efficiency, etc. It is therefore crucial to have knowledge about the dimensions of NPs in order to comprehend their behavior.

Thanks to its convenience, rapidness and statistical sufficiency, a very useful and commonly used technique for NP characterization is carried out through dynamic light scattering (DLS), tracing the substantial Brownian motion of such particles dispersed in a liquid medium.

Due to the scattering intensity fluctuations, speckles of light carry precious information about NPs' size. Furthermore, the technique is non-invasive to the sample and therefore one obtains (indirect) information directly about a sample with no previous modification. However, the indirect nature of DLS creates a greater scope for data misinterpretation, which occurs very often among its users.

Since the results obtained from DLS measurements are frequently mistreated, the goal of this work is to provide deeper understanding and improvement of the data treatment. Besides that, other measuring modes of the DLS and their usage are presented.

Nanášení katalytické vrstvy do automobilového filtru - vliv reologie suspenze γ -Al₂O₃

Autor: Milan Žalud
Ročník: B3
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Spalovací motory jsou v současné době jednoznačně nejpoužívanějším pohonem pro automobily. Jejich největším problémem jsou emise škodlivých plynných látek a pevných částic do ovzduší. Jednou ze součástí systému pro čištění výfukových plynů jsou filtry pevných částic, které jsou již běžnou součástí diesellových motorů (DPF) a nově i některých benzínových (GPF).

U katalytického filtru pevných částic je na povrch a do pórů stěn jeho vnitřních kanálků nanášena katalytická vrstva. V mé práci je tato vrstva nanášena v podobě suspenze obsahující γ -Al₂O₃ metodou washcoatingu. Při přípravě suspenze je třeba sledovat několik parametrů, jako je velikost částic Al₂O₃, pH či reologii. Připravená suspenze je neneutonská tekutina, konkrétně ji lze charakterizovat modelem pseudoplastické kapaliny. Pro tyto systémy je zaveden pojem zdánlivá dynamická viskozita, která není konstantou, nýbrž je závislá na smykové rychlosti. Pomocí reologického měření jsou získány reogramy, které zobrazují závislost smykového napětí na smykové rychlosti. Při analýze výsledků nanášení suspenze na vzorky pak znalost reologie umožňuje definovat optimální vlastnosti suspenze γ -Al₂O₃ a následně dosáhnout požadovaného umístění a rovnoměrnosti nanášené vrstvy.

Sekce: **Chemické inženýrství V (BIII)**

Předseda komise: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Komise: Ing. Věra Pěnkavová, Ph.D., Ing. Ladislav Konopka, Ing. Jiří Charvát, zástupce sponzora

8:30	zahájení	
8:40 - 9:00	Martin Bureš	Simulation of long term cycling of vanadium redox flow battery
9:00 - 9:20	Daniel Götz	Vliv vlastností membrány na provozní charakteristiky vanadové redoxní průtočné baterie
9:20 - 9:40	Jarmila Kučerová	Viskoelastické chování polyethylenových částic
9:40 - 10:00	Jakub Nademlejnský	Blood cell-like microparticles produced with continous lithography
10:00 - 10:20	přestávka	
10:20 - 10:40	Tomáš Pachtl	Porovnání kinetiky dvojitého zapálení CO v přítomnosti C ₃ H ₆ na katalyzátorech Pd/ γ -Al ₂ O ₃ a Pt/ γ -Al ₂ O ₃
10:40 - 11:00	Jakub Svoboda	Příprava hierarchických mikro-strukturovaných povrchů s využitím polystyrenových částic
11:00 - 11:20	Adam Vondra	Vliv tlaku na konverzi škodlivin v automobilovém katalyzátoru
11:20 - 11:40	Václav Šmíd	Možnosti zvýšení energetické účinnosti ejektorového čerpadla kapalina-plyn
	přestávka	
12:00		představení sponzorů, vyhlášení výsledků

Simulation of long term cycling of vanadium redox flow battery

Autor: Bc. Martin Bureš
Ročník: M1
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Alternativou k uskladnění energie z obnovitelných zdrojů jsou vanadové průtočné baterie, u nichž probíhá přečerpávání elektrolytů skrz porézní elektrody oddělené membránou. Membrány jsou v ideálním případě propustné pouze pro vodíkové ionty, které přenášejí elektrický náboj. V reálném případě jsou ale propustné i pro vanadové kationty a vodu, což mírně snižuje účinnost baterie a její kapacitu při dlouhodobém cyklování. Naštěstí lze baterii snadno regenerovat na původní plnou kapacitu. V této práci simulujeme pomocí matematického modelu chování reálné baterie. V modelu využíváme její rozdělení na 4 části, pozitivní a negativní celou a dva zásobní tanky k nim připojené. Model zahrnuje popis transportu iontů skrz membránu Nernst-Planckovou rovnicí, popis reakční kinetiky v roztoku a popis elektrochemických reakcí Butler-Volmerovou rovnicí. K výpočtu toku vody využíváme osmotický tlak a popis membrány jako homogenní i porézní prostředí. K popisu rovnovážného napětí je použita Nernstova rovnice. Z výsledků lze predikovat jak vývoj kapacity baterie, tak objemů a koncentrací elektrolytů v průběhu dlouhodobého nabíjení a vybíjení. Využitím vyvinutého modelu budeme schopni řídit baterii tak, aby se zlepšila její účinnost a dlouhodobá stabilita.

Vliv vlastností membrány na provozní charakteristiky vanadové redoxní průtočné baterie

Autor: Bc. Daniel Götz
Ročník: M2
Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Dlouhodobý trend zvyšování časově nerovnoměrné poptávky po elektrické energii s sebou nese potřebu stabilizovat síť pomocí stacionárních uložení, kupříkladu ve formě akumulátorů. Na tyto jsou ale v této funkci kladeny specifické požadavky zejména dlouhodobé výdrže, spolehlivosti a v neposlední řadě také nízké ceny. Právě tyto vlastnosti nabízejí vanadové redoxní průtočné baterie. Jednou z klíčových komponent, která rozhoduje o technických a ekonomických parametrech baterie, je membrána oddělující kladný a záporný elektrolyt a zajišťuje iontové propojení mezi poločlánky. Cílem mé práce bylo experimentální studium provozních vlastností baterie s rozdílnými membránami.

Pro experimenty jsem zkonstruoval aparaturu umožňující nejen základní charakterizaci laboratorního monočlánku, ale též k průběžnému monitorování změn objemu a složení elektrolytu. Aparatura byla využita k charakterizaci několika zástupců výměnných membrán o různé iontovýměnné kapacitě. Byl sledován významný vliv vlastností membrány na provozní vlastnosti baterie (účinnost, kapacita), ale též na transport jednotlivých složek elektrolytu membránou, a to i v dlouhodobém horizontu.

Viskoelastické chování polyethylenových částic

Autor: Bc. Jarmila Kučerová
Ročník: M2
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Powder particles, for example polymers or drugs, undergo various collisions during their manufacturing and transport. Their viscoelastic properties lead to energy dissipation during collisions. The amount of dissipated energy determines the behaviour of the whole particulate system and is crucial when studying phenomena like particle aggregation or fouling. In our work, we focus on collision behaviour of PE particles. As a measure of dissipated energy, we use restitution coefficient (defined as the ratio of velocity after and before impact). Based on our experimental observations, we developed DEM model that enables us to predict restitution coefficient and post-impact behaviour of particles under various conditions. During the experiments, we recorded PE particles impacting metal plate and by image analysis obtained their restitution coefficients. We used the measured data to fit dissipative force parameter in one-element model. Consequently, we applied the same force description in a model with discretized particles represented by aggregate of elements. This model enabled us to predict energy dissipation of particles of different shapes and surface roughness. Our results also provide information about force propagation during impact and the significance of particle rotation.

Blood cell-like microparticles produced with continous lithography

Autor: Jakub Nademlejnský
Ročník: B3
Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

In this work, we try to synthesize hydrogel particles that can mimic the red blood cells and flow through the bloodstream and not being excreted by kidney or liver. To achieve that, we must mimic the shape, surface and mechanical properties of the blood cells. We have synthesized the blood-cell shaped particles from polymer PEGDA using stop flow lithography, demonstrating we are able to do such small and diversified particles. We plan to use the particles as in-vivo microsensors of blood composition by loading them with fluorescent sensors of biologically relevant parameters (pH, glucose, lactate...)

Porovnání kinetiky dvojitého zapálení CO v přítomnosti C₃H₆ na katalyzátorech Pd/ γ -Al₂O₃ a Pt/ γ -Al₂O₃

Autor: Bc. Tomáš Páchl
Ročník: M1
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

New strict emission standards for internal combustion engine vehicles require deeper understanding of catalytic converters. This study focuses on co-oxidation of propene and carbon monoxide over Pd/ γ -Al₂O₃ and Pt/ γ -Al₂O₃ monolith-supported catalysts. Partial oxidation of light hydrocarbons to intermediates and their accumulation on active sites reduce efficiency of the catalyst. This can lead to temporary decreasing conversion of CO with increasing temperature, which is known as dual light-off. This effect was studied under lean and stoichiometric conditions typical of diesel oxidation and three-way catalysts. The biggest impact was observed on Pt based catalyst with presence of NO under stoichiometric conditions. On the other hand, under lean conditions oxidation of intermediates is sufficient and their effect is negligible. A global mathematical model was modified to take into account these findings. Additional reactions describe: a) partial oxidation of propene to intermediates that block active sites and slow down other reactions, b) oxidation of the intermediates and c) partial oxidation of propene to CO. The newly created CO plays only a minor role in dual light-off behaviour. The results from the modified model are consistent with the experimental data.

Příprava hierarchických mikro-strukturovaných povrchů s využitím polystyrenových částic

Autor: Bc. Jakub Svoboda
Ročník: M2
Školitel: Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

This work deals with the preparation of artificial surfaces with hierarchical topology inspired by the natural templates. Many natural materials with two-scale roughness show unique properties such as superhydrophobicity (rose petals), self-cleaning effect (lotus leaf), antibacterial properties (cicada wing) or cytocompatibility (moth eye). The aim of this work is to use various methods of soft-lithography to produce hierarchical structures with the possibility to control both levels of surface roughness and thus the final surface properties. First, the microscale roughness can be altered by the size of primary polystyrene (PS) beads (Fig. 1a) and secondary, the nano-roughness can be controlled via process parameters of oxygen plasma etching (Fig 1b) or alternatively, by deposition of the additional layer composed from nanoparticles on top of microspheres. A close-packed layer of PS with various diameter was prepared by spin coating of glass/PDMS surface pre-activated by oxygen plasma. Influence of inlet parameters (presence of solvent, acceleration or speed of drying) on quality of surface coverage by PS beads will be presented. Additionally, wetting parameters of structured surfaces and resistance to bacterial colonization compared to a flat surface will be investigated.

Vliv tlaku na konverzi škodlivin v automobilovém katalyzátoru

Autor: Adam Vondra
Ročník: B3
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V dnešní době je kladen stále větší důraz na ochranu životního prostředí. Neustále se zpřísnující limity na snížení emisí automobilových výfukových plynů, společně s novými testovacími postupy pro zjišťování emisí a spotřeby paliva WLTP (Worldwide Harmonized Light Vehicles Test Procedures) a RDE (Real Driving Emissions), nutí výrobce používat neustále sofistikovanější katalytické konvertory, které přeměňují stopy zdraví škodlivých látek, jako je oxid uhelnatý (CO), zbytky nespálených uhlovodíků (HC) a oxidy dusíku (NO_x) na zdraví nezávadné plyny (vodu, oxid uhličitý a dusík). Jednou z uvažovaných možností, jak dosáhnout co nejvyšší konverze škodlivin, je umístění katalyzátoru do místa s vyšším tlakem výfukového plynu (před turbo). Tato práce se zabývá matematickým modelováním vlivu tlaku na konverzi škodlivin v automobilovém katalyzátoru a porovnáním výsledků simulací s experimentálními daty naměřenými v laboratoři. Při zvýšeném tlaku došlo v případě oxidace CO a uhlovodíků k drobnému snížení teploty zapálení, u adsorpce NO_x pak k mírnému nárůstu adsorpční kapacity, což je v obou případech žádoucí.

Možnosti zvýšení energetické účinnosti ejektorového čerpadla kapalina- plyn

Autor: Václav Šmíd
Ročník: B3
Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Ejektor je jednoduché a poměrně bezporuchové zařízení, které je díky absenci jakýchkoliv pohyblivých částí vhodné pro čerpání znečištěných kapalin a plynů, např. suspenzí, kalů, prachů či dýmů, které by v konvenčních zařízeních mohly způsobovat zanášení. Principem jeho činnosti je tvorba jemné, velmi dobře míchané, disperze plynu v hnací kapalině, což podporuje intenzivní přestup hmoty mezi plynem a kapalinou. Velmi vysoká hustota mezifázové plochy ve vznikající plynokapalinové směsi umožňuje použití ejektoru jako zařízení pro mechanické nebo chemické čištění plynů a par z průmyslových procesů. Alternativně lze ejektor použít jako velmi účinný chemický reaktor, který si sám přisává reagující plyn. Mimořádné vlastnosti ejektoru jako výměníku hmoty jsou však kompenzovány vysokými energetickými nároky a omezenou databází návrhových dat. Tato práce se zaměřuje na možnosti zvýšení energetické účinnosti ejektoru pro zpracování velkých objemů plynu prostřednictvím mechanického rozrušení paprsku hnací kapaliny. V práci jsou popsány a studovány dvě možnosti rozrušení paprsku: (i) prostřednictvím rotace části kapaliny v paprsku způsobené rotačním tělískem – swirllem; (ii) rozpad paprsku vlivem expanze bublin komprimovaného plynu v trysce.