

ANOTACE SVK UCHI 2010

Sekce: **Matematické modelování v chemickém inženýrství
(B III, 8:30 přednášková)**

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Členové: Ing. Martin Kohout, PhD.
zástupce sponzora
Ing. Jan Štěpánek
Ing. Alexandr Zubov

počet účastníků 7

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Srovnání simulačních metod v programu Aspen Plus

Autor: Michal Dudák
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. RNDr. Tomáš Vaněk, CSc., Ing. Martin Kohout, Ph.D.

Při návrhu nových nebo úpravě a optimalizaci stávajících chemicko-technologických procesů se v praxi často využívá univerzální simulační program Aspen Plus. Ten umožňuje volit mezi sekvenčně modulární (SM) metodou a rovnicově orientovanou (RO) metodou simulačního výpočtu. Cílem této práce bylo srovnat tyto metody z hlediska použití při základním a návrhovém simulačním výpočtu a porovnat možnosti a omezení těchto dvou metod v prostředí programu Aspen Plus V7.1. Výsledky jsou ilustrovány na příkladu separačního uzlu, ve kterém se dělí neideální dvousložkový systém s použitím přídavku třetí látky. Uzel se skládá ze dvou rektifikačních kolon s recyklem. SM metoda je v programu primárně použitelná pro základní simulační výpočet. Nestandardní specifikace jsou sice v omezené míře přípustné, ale za cenu další iterační úrovně. Naproti tomu RO metodu je možné standardně použít i pro návrhové výpočty. Především pro druhou metodu jsou potřeba dobré počáteční odhady všech neznámých parametrů z důvodu omezeného oboru konvergence. Je ukázáno, že počáteční odhady je možno jednoduše přenést z výsledků SM výpočtu.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Sdílení tepla na mikro a nanoměřítku

Autor: Pavel Ferkl
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Alexandr Zubov

Sdílení tepla na nano a mikroměřítku vykazuje řadu odlišností od makroměřítku. Tepelná vodivost je klesající funkcí tloušťky materiálu nebo velikosti póru v případech, kdy střední volná dráha fononů nebo molekul je srovnatelná s šířkou materiálu či póru. V průteplivých prostředích je potřeba uvažovat kombinované sdílení tepla vedením a zářením. Popis sdílení tepla na mezifázových rozhraních ve svých důsledcích také odlišuje transport tepla na nano a makro měřítku. S využitím těchto efektů lze připravit jak materiály s tepelnou vodivostí mnohem menší než vzduch (aerogely), tak i materiály s vynikající tepelnou vodivostí (kompozity s uhlíkovými nanotrubičkami). Cílem práce je modelování transportu tepla na nano a mikroměřítku v systémech, kde je teplo sdíleno molekulami, fonony a fotony. V práci jsou popsány fyzikální mechanismy sdílení tepla a jsou formulovány bilanční a transportní rovnice umožňující popis zvláštních efektů na nanoměřítku. Jsou diskutovány vybrané problémy a popsány numerické metody pro soustavy parciálních diferenciálních a integrálních rovnic. Konečným cílem tohoto projektu je výpočet tepelné vodivosti nano a mikrocelulárních materiálů v závislosti na jejich struktuře.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

CFD simulace proudění kapaliny pomocí injektování vzduchu

Autor: Bc. Jakub Hloužek
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Jedním ze způsobů čerpání kapaliny především v jaderném průmyslu, kde je nutné čerpat chladicí kapalinu při velmi vysokých teplotách, je čerpání kapaliny pomocí zavádění proudu vzduchu do paty zařízení, tzv. „gaslift reaktoru“. Počítačová dynamika tekutin (CFD) se jeví jako vhodný nástroj pro popis proudění tekutiny, což umožňuje zjištění teplotního profilu v zařízení. Práce je především zaměřena na výpočet rychlostního profilu uvnitř „gaslift reaktoru s vnitřním cyklem“ při použití různých metod simulace a několika geometrických modifikací. Při práci byl použit komerční program ANSYS FLUENT 12.0.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování mechanického namáhání heterofázových polymerů

Autor: Martin Klejch
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Michal Vonka

Polymerní materiály mají různou mikrostrukturu. V této práci se zabýváme hetero-fázovými polymery různých typů, například semi-krystalickými polyolefiny, pěnovými polymery a polymery s tzv. salámovou strukturou. Zástupcem posledně jmenované kategorie je houževnatý polystyren (HIPS) s dvojúrovňovou morfologií: (i) nepravidelné submikronové domény polystyrenu (PS) jsou dispergovány v částicích polybutadienu (PB), a (ii) oválné částice PB o charakteristické velikosti několika mikronů jsou dispergovány v kontinuální fázi PS. Cílem práce je nalezení závislosti mezi mikrostrukturou heterofázových polymerů a jejich aplikačními mechanickými vlastnostmi. V naší předchozí práci jsme se zabývali modelováním rázové houževnatosti. Výsledné charakteristiky rázové houževnatosti ale vykazovaly značný rozptyl vzhledem k absorpci energie nárazu v tzv. sekundárních prasklinách a puklinách. V této práci se proto zabýváme modelováním statického namáhání materiálů standardní zkouškou namáhání v tahu nebo ve stříhu. Vyvinutý program založený na metodě diskrétních elementů (DEM) umožňuje semi-kvantitativně předpovídat charakteristiky statického namáhání. Výsledky simulací jsou srovnány s experimenty.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování axiální disperze v rekonstruované koloně inverzní plynové chromatografie

Autor: Jan Kolda
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Alexandr Zubov

Inverzní plynová chromatografie (iGC) je jednou z experimentálních technik charakterizace difúzního transportu v porézních částicích. iGC je prakticky využitelná především pro krátké charakteristické doby difúze v porézních částicích. Experimentální data z iGC jsou zpracovávána modelem podle van Deemtera nebo přímým srovnáním naměřených a simulovaných koncentračních pulsů. Experimenty iGC prováděnými za několika tlaků bylo zjištěno, že žádný model nedokáže interpretovat difúzi probíhající paralelně jak v pórech tak v polymerní fázi částic. Proto byly započaty práce na více-škálovém rekonstruovaném modelu iGC kolony. Model uvažuje příspěvky k axiální disperzi vzniklé různými mechanismy: disperzí způsobenou rychlostním polem proudu plynu, přestupem hmoty na povrch částic i transportem uvnitř částic. Z pohledu modelování se jedná o náročný úkol vzhledem k více-škálovosti a vzhledem k nutnosti kalibrovat numerické metody na přítomnost numerické disperze. Tato práce shrnuje naše dosavadní výsledky a zkušenosti. Numerické simulace umožňují rovněž testovat předpoklad tzv. lineární chromatografie, který je základem všech analytických modelů pro interpretaci dat z iGC.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Vyhodnocení objemového koeficientu přestupu hmoty v mechanicky míchané disperzi kapalina-plyn

Autor: Libor Labík
Ročník: M1
Ústav: Chemické inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Tomáš Moucha, Dr.

Cílem práce bylo pokračovat ve verifikaci nového programu pro vyhodnocování objemového koeficientu přestupu hmoty $k_L a$ v mechanicky míchané disperzi kapalina-plyn. Na základě posouzení vlivu dynamiky kyslíkové sondy na získané hodnoty $k_L a$ byla pozměněna metodika výpočtu konvolučního integrálu a porovnána s původní. Dále byla posouzena citlivost matematického modelu na změnu vnitřních parametrů. Bylo zjištěno, že na vyhodnocení $k_L a$ má významný vliv časová konstanta kyslíkové sondy. Dále byly analyzovány vnitřní parametry funkce ode15s.m programu MatlabR2010a. Touto funkcí je řešena soustava diferencí algebraických rovnic. Byl zjišťován vliv nastavení relativní a absolutní přesnosti na vyhodnocení objemového koeficientu přestupu hmoty a nalezeny takové jejich hodnoty, aby byl zajištěn únosný výpočetní čas a dostatečná přesnost.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Měření a modelování vzniku N₂O na automobilovém katalyzátoru

Autor: David Mráček
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství (409)
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Motory spalující chudou palivovou směs v přebytku vzduchu (Diesel) dosahují lepší účinnosti a nižší spotřeby paliva než motory spalující stechiometrickou směs. Přebytek vzduchu však vede k silně oxidačním podmínkám ve výfukových plynech, což znesnadňuje redukci emisí oxidů dusíku (NO_x).

Tato práce se zabývá měřením produkce N₂O při neúplné redukcí oxidů dusíku (NO a NO₂) na automobilovém katalyzátoru. Vznik N₂O je zkoumán v laboratorním reaktoru při různých teplotách v rozmezí 100-400°C, pro různé poměry NO₂/NO_x a s různým obsahem redukčních činidel (CO, C₃H₆) ve vstupní směsi. Naměřené konverze NO_x a selektivity N₂O jsou použity při vývoji matematického modelu katalytického konvertoru výfukových plynů.

ANOTACE SVK UCHI 2010

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 1 (B 139, 8:30, přednášková)**

Komise:

Předseda: Doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Členové: Ing. Zdeněk Grof, PhD.

zástupce sponzora

Ing. Otto Hadač

Ing. Josef Chmelař

počet účastníků 9

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Rozprašovací sušení jako progresivní způsob mikroenkapsulace

Autor: Martin Jakubec
Ročník: B3
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, PhD

Mikroenkapsulace je procesem, který umožňuje převést kapalné roztoky, emulze či suspenze do částic se strukturou „jádro-slupka“ (angl. core-shell), jejichž velikost se řádově pohybuje v mikrometrech. Technika rozprašovacího sušení (angl. „spray drying“) je perspektivní alternativou ke klasickým způsobům mikroenkapsulace. Umožňuje totiž zapouzdřit či uzavřít i méně stabilní látky nebo látky neslučitelné s okolním prostředím do miniaturních částic, dále použitelných v mnoha průmyslových odvětvích, především pak v potravinářském, farmaceutickém či materiálovém. V této práci je pomocí laboratorního přístroje Buchi Mini Spray-Dryer zkoumán vliv počátečních parametrů (průtok a teplota sušícího plynu, koncentrace roztoku) na vlastnosti (morfologie, velikost) vytvořených mikročástic z biopolymerů dextranu a alginátu sodného. Konečným cílem práce je mikroenkapsulace látek do částic z těchto biopolymerů a studium kinetiky jejich vylučování při rozpouštění.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Vývoj a optimalizace technologie výroby úzkých mikrokanálů v polymerních substrátech

Autor: Bc. Tomáš Kotala
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Lindner, Ph.D.

Mikrofluidika je obor zabývající se studiem toku tekutiny v kanálech o charakteristickém rozměru do 1000 μm . Mikrofluidní zařízení již mají řadu komerčně dostupných aplikací (např. analytické mikročipy) a jsou používána v základním i aplikovaném výzkumu. V naší laboratoři používáme převážně polymerní substráty (PMMA, PS). Mikrokanály široké přes 100 μm lze snadno vyrobit mikrofrézováním. Pro některé aplikace je však potřeba vyrobit kanály užší (šířka $\sim 10^1 \mu\text{m}$). V rámci této práce byly studovány možnosti výroby úzkých mikrokanálů a jsou popsány a diskutovány jeho jednotlivé kroky. Zde navržený postup využívá UV litografie, galvanické pokovování, vtláčování za tepla a tepelné slinování. Dále jsou diskutovány možné aplikace mikrofluidních zařízení s úzkými mikrokanály a charakteristiky toku tekutiny v úzkých mikrokanálech jak v případě toku vyvolaného působením vnějšího rozdílu tlaků, tak toku vyvolaného vloženým elektrickým polem (elektroosmóza).

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Syntéza kompozitních Fe₃O₄ - SiO₂ dutých mikročastic a studium jejich ohřevu elektromagnetickou indukcí

Autor: Zuzana Kremláčková
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

K důležitým vlastnostem dutých částic s porézní stěnou, používaných k cílenému vylučování látek, patří jejich schopnost uvolnění neseného obsahu ve správný časový okamžik, popř. na správném místě. Možností, jak nepřímo řídit tento děj, je několik. Lze například využít citlivosti na pH, na přítomnost určité látky, tlak, teplotu či magnetické pole. Cílem předložené práce je příprava dutých kompozitních mikročastic na bázi oxidu křemičitého schopných ohřevu v magnetickém poli. Toho je dosaženo pomocí zabudování magnetických nanočástic Fe₃O₄. Hmotnostní poměr Fe₃O₄ vůči SiO₂ ovlivňuje vlastnosti připravených kompozitních mikročastic. Byly připraveny částice s různým hmotnostním zastoupením Fe₃O₄ a studovány jejich vlastnosti. Rozložení velikosti částic bylo měřeno pomocí statického rozptylu světla na laserovém analyzátoru částic a struktura byla pozorována pomocí elektronové a konfokální mikroskopie a rentgenové mikrotomografie. Propustnost kompozitních schránek byla charakterizována nepřímo pomocí měření kinetiky vylučování modelové látky na spektrofotometru. Přítomnost Fe₃O₄ v křemičitých mikročasticích byla potvrzena pomocí FTIR spekter získaných pomocí infračervené spektroskopie.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Charakterizace morfologie polymerů sorpčními a difúzními měřeními

Autor: Andra Nistor
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Josef Chmelař

Hlavním cílem práce je charakterizace morfologie semi-krystalického polyethylenu (PE) na základě sorpčních a difúzních měření. Obecnějším cílem je demonstrace, že transportní charakteristiky kompaktních polymerních membrán, tj. permeability a difuzivity, nejsou jen čistě empirickými veličinami, ale že závisí na mikrostruktuře polymeru. V semi-krystalických polymerech probíhá jak sorpce tak difúze pouze v elasticky stísněné amorfní fázi. Předchozí experimenty ukázaly, že difuzivita penetrantu ve stejném jakostním typu PE (daném krystalinitou) se může lišit až pětikrát v závislosti na morfologii vzorku, která je ovlivněna jeho přípravou. Nová systematická difúzní měření provedená v tavenině i v semi-krystalickém polymeru umožňují odhadnout tortuositu amorfní fáze a srovnání s teoretickými modely PE morfologie typu sferulitu nebo krystalických micel. Byly tak získány zásadní nové poznatky, které jsou konfrontovány s morfologickými charakteristikami získanými pomocí AFM. Nicméně výsledky měření ukazují také na několik stále otevřených problémů: (i) teplotní závislost difuzivity, (ii) závislost krystalinity na teplotě, a (iii) transportní hystereze. V rámci práce byla také vyvinuta metodika měření na aparatuře dynamické tlakové odezvy.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Using oxidation of sulphite for monitoring characteristics of mass transfer in bio-reactors.

Autor: Michal Opletal
Ročník: M2
Ústav: Chemické inženýrství
Školitel: Ing. Michal Kordač, Ph.D.

Mass transfer coefficients are one of most important factors for effective design and scaling up bio-reactors. Frequently used method for measuring mass transfer characteristic is absorption of air or oxygen to sulphite solution. Modified technique for measuring mass transfer coefficients was used. In this work is shown that using UV-spectroscopy at a wavelength 255 nm is more comfortable than classical technique based on the iodometric back-titration. UV-spectroscopy allows continual monitoring of changes concentrations of sulphite, decrease amount of titrations and make the sulphite method less time-consuming while preserving precision of the method. Effect of pH on the accuracy of the method is discussed and it was found that for correct using UV- spectroscopy is necessary to keep pH above 8.0 due to pH dependence of calibration curve below pH 8.0. Mass transfer coefficients were measured for two model cases: cultivation flask and fermentation in the cylindrical vessel. Measured values of coefficients for cylindrical vessel were compared with values measured by classical technique at the same conditions.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Použití rotačních biologických reaktorů s imobilizovanou houbou *Irpex lacteus* pro degradaci textilních barviv

Autor: Jan Šíma
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Pavel Hasal, CSc.

Cílem projektu je navrhnout rotační biologický reaktor s imobilizovanou houbou *Irpex lacteus* pro degradaci textilních barviv a u tohoto reaktoru následně zjistit nejvhodnější provozní parametry, jako je rychlost rotace disků, rychlost průtoku kapaliny, koncentrace barviva na vstupu do reaktoru při kontinuálních experimentech či počáteční koncentrace barviva u vsádkových experimentů. Účinnost reaktoru při degradaci barviv může ovlivnit také typ nosiče pro imobilizaci houby.

Při vývoji vznikly dva obdobné reaktory. Oba se skládaly z 12 rotačních disků na centrální ose, přičemž jeden měl dno tvořené lamelami svírajícími úhel 120° a druhý měl půlkruhové dno. Reaktory mohou být provozovány jak ve vsádkovém, tak v kontinuálním režimu. V obou bylo provedeno několik odbarvovacích experimentů s barvivem Remazol Brilliant Blue R za různých podmínek. Abychom charakterizovali dané reaktory, byla změřena odezvoivá křivka na výstupu z reaktorů v závislosti na skokové změně na vstupu při různých průtocích a různé rychlosti rotace disků. Na tato data byly u reaktoru s půlkruhovým dnem aplikovány dva jednoduché matematické modely: gama distribuce a série ideálně promíchávaných reaktorů se zpětným tokem.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Vliv podmínek přípravy na velikost a stabilitu liposomů

Autor: Martin Ullrich
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Liposomy jsou malé duté částice, jejichž stěnu tvoří polopropustná fosfolipidová dvojvrstva. Velikostně liposomy mívají od 30 nm až po desítky μm v průměru. Kvůli své stěně, která je uspořádáním podobná buněčné membráně, jsou již od 60. let minulého století intenzivně zkoumány a pomáhají nám objasnit některé jevy odehrávající se na povrchu buněk. Látky, uzavřené dovnitř liposomů, se uvolňují do okolí pomalu. Této vlastnosti využívají například některá léčiva či kosmetické přípravky s prodlouženým účinkem dostupné od počátku 90. let. Tato práce se zabývá metodikou přípravy menších liposomů v průměru maximálně 500 nm. Střední průměr a šířka distribuce velikostí liposomů totiž dosti závisí na způsobu přípravy. Pro tuto práci byla zvolena metoda sonikace, tj. příprava liposomů aplikací ultrazvuku. Byl systematicky studován vliv délky a intenzity sonikace na velikost výsledných liposomů a studována jejich stabilita v čase při 4 a 25 °C. Cílem následných experimentů je charakterizovat rychlost vylučování uzavřených látek, a nalézt způsoby, kterými může být tato rychlost ovlivněna. To zahrnuje především zvýšení stability liposomů a následnou řízenou destabilizaci. Jako modelová látka pro tuto studii byl zvolen karboxyfluorescein, který umožňuje sledovat kinetiku vylučování pomocí fluorescenční spektroskopie.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Adheze bubliny na pevnou částici

Autor: Tereza Váchová
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Práce je součástí projektu, který se zabývá vzájemnými interakcemi bublin a pevných částic. Interakce mezi bublinou a pevnou částicí charakterizují tři následné děje – kolize bubliny a částice, adheze neboli zachycení bubliny na částici a odtržení bubliny od částice. Proces adheze zahrnuje děje jako ztenčování kapalného filmu mezi bublinou a částicí, přetržení kapalného filmu a vytvoření a rozšiřování třířázového rozhraní. Náplní práce bylo experimentální měření skluzových kontaktních časů a vyhodnocování trajektorií bublin přichycujících se na částici. Jako experimentální částice byly použity nakloněné roviny představující kulovou částici o nekonečném poloměru. Experimentálním materiálem bylo silanizované sklo. Experimenty byly prováděny v prostředí roztoku povrchově aktivní látky. Adheze bubliny byla snímána vysokorychlostní kamerou a data byla zpracována pomocí softwaru NIS-Elements.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Příprava nanočástic elektrorozprašováním

Autor: Karel Zuček
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Jiří Maršálek

Při elektrorozprašování je kapalina protékající tenkou kapilárou vystavena vysokému DC napětí. Na konci tenké kapiláry vznikají v důsledku interakce elektrostatických sil a povrchového napětí malé kapičky, které se dále samovolně štěpí na menší a menší kapičky v důsledku povrchové hustoty náboje a odpařování rozpouštědla. Konečným produktem jsou tak nanočástice. Touto metodou lze také připravovat vrstvy nanočástic. Cílem práce byl návrh a konstrukce aparatury pro elektrorozprašování umožňující základní testování. Po úspěšném zprovoznění byly připraveny nanočástice menší než 100 nm pro několik anorganických i organických látek. Průběh procesu byl pozorován jednak vizuálně, jednak byla měřena distribuce velikosti částic na přístrojích Zeta-sizer a AFM. Byl studován vliv různých parametrů procesu na kvalitu vznikajících nanočástic. Zvýšení objemu produkce nanočástic metodou elektrorozprašování lze provést jednoduchou paralelizací, tj. využitím velkého množství paralelně uspořádaných kapilár. Našimi dalšími cíli jsou kromě paralelizace také řízení celého procesu pomocí elektrických pulsů a příprava nanočástic vhodných pro ukládání elektrické energie.

ANOTACE SVK UCHI 2010

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 2**
(knihovna B141b, 8:30, přednášková)

Komise:
Předseda: Doc. Ing. František Štěpánek, PhD.
Členové: Ing. František Jonáš Rejl, PhD.
zástupce sponzora
Ing. Walter Schrott
Ing. Šárka Bártová

počet účastníků 8

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Měření rozložení elektrické vodivosti v mikrofluidních systémech

Autor: Pavel Beránek
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Lindner, Ph.D.

V mikrofluidních systémech lze realizovat řadu procesů – od směšování přes separační procesy a chemické reakce, ale také jejich kombinace, které vedou ke komerčně využitelným aplikacím (mikroreaktory, DNA chipy aj.). Řada procesů v mikroměřítku probíhá odlišně ve srovnání s analogickými procesy v běžném měřítku. Měření prostorového rozložení vodivosti umožňuje získat informace o průběhu některých dějů (například míchání, rozsah chemické reakce aj.) a tedy i o výskytu efektů spojených se zmenšováním měřítka. Měření vodivosti (konduktometrie) je poměrně jednoduchá analytická metoda, která je použitelná pro většinu elektrolytů. Měření jejího prostorového rozložení však klade velké nároky na konstrukci mikrozařízení, jakož i na sběr a interpretaci naměřených údajů. V práci je popsána výroba průtočného senzoru umožňujícího měření rozložení elektrické vodivosti a jsou uvedeny výsledky předběžných experimentů. Diskutovány jsou také možné aplikace sestaveného zařízení.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Segmentovaný tok jako způsob miniaturizace částic

Autor: Michal Brož
Ročník: M2
Ústav: Chemické inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Při toku nemísitelných tekutin v tenkých kanálcích o průměru řádově stovek mikrometrů může za určitých podmínek dojít ke vzniku tzv. segmentovaného toku, kdy po kontaktu obou tekutin v hydrofobním kanálku mikrosystému má vodná fáze tendenci zachovat co nejmenší povrch a vytvoří kulové kapénky, zatímco nepolární fáze zaujme zbytek objemu a smáčí stěny mikrokanálku. Tohoto procesu lze využít nejen ke tvorbě kapalných dispersí, ale též k přípravě mikročástic. V této práci bude studován vliv poměru průtoků vodné a organické fáze v mikrokanálcích na velikost vzniklých mikročástic. Princip tvorby mikročástic je založen na gelaci vodného roztoku alginátu sodného pomocí dvojmocných kationtů vápníku (zatímco alginát sodný je ve vodě rozpustný, alginát vápenatý tvoří gel). Při snižování průtoku roztoku alginátu sodného vzhledem k org. fázi bude docházet k vytvoření menšího průměru kuliček a k delším segmentům nepolární fáze. Při výtoku z mikrofluidního zařízení zreaguje kapička alginátu sodného s vápenatými ionty v kádince a k oddělení vrstvy org. fáze vlivem díky rozdílu v hustotách. Vzniklé částice byly separovány a analyzovány pomocí optického mikroskopu. Byla vyhodnocena distribuce velikosti částic. Výsledkem práce je mapa závislosti velikosti částic na průtoku a viskozitách obou kapalných složek v zařízení.

Sekce : Procesní a systémové inženýrství 2

Transportní charakteristiky strukturovaných výplní Mellapak

Autor: Bc. Jan Gubiš
Ročník: M1
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, Ph.D.

V této práci byly naměřeny transportní charakteristiky strukturované kovové výplně Mellapak typologické řady Y o různých geometrických plochách - 250, 350 a 500 m²/m³. Byly stanoveny objemové koeficienty přestupu hmoty v kapalně (k_{La}) a plynně (k_{Ga}) fázi. Objemový koeficient k_{La} byl měřen desorpčí kyslíku z vody do proudu dusíku, při níž je hlavní odpor proti přenosu hmoty soustředěn v kapalně fázi. Objemový koeficient k_{Ga} byl měřen absorpcí SO₂ z proudu vzduchu do roztoku NaOH, při níž je hlavní odpor proti přenosu hmoty soustředěn v plynu. Měření byla provedena na poloprovozním absorpční koloně o vnitřním průměru 0,295m a s výškou výplně 0,84m. Získané hodnoty koeficientů na čtyřech typech výplní jsou porovnány vzájemně a s publikovanými daty. Cílem práce je posoudit vliv geometrické plochy na velikost objemových koeficientů přestupu hmoty.

Sekce : Procesní a systémové inženýrství 2

Syntéza a použití mikro-částic PNIPAM-Fe₃O₄ pro cílené vyučování látek

Autor: Jan Kuchař
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Práce se zabývá využitím mikročástic z termo-senzitivního polymeru PNIPAM (poly-N-isopropylakrylamid) s pevně zabudovanými nanočásticemi magnetitu, pro cílené vyučování látek. Mikročástice jsou schopny při zahřátí vratně zmenšit svůj objem až o 65%, navíc díky nanočásticím magnetitu je možné využít ohřevu ve střídavém magnetickém poli. Naším cílem je do daných mikročástic vpravit nanočástice stříbra s antibakteriálními účinky a zajistit jejich stabilitu a cílené vyučování pomocí změny teploty.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Syntéza kompozitných silikových mikročastic reagujúcich na vonkajšie stimuly

Autor: Nina Sarvašová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství a Laboratoř chemické robotiky
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Cieľom tejto práce je pripraviť a charakterizovať kompozitné častice založené na silike, ktoré by boli schopné reagovať na vonkajšie podnety. Boli použité dve modifikácie základných silikových mikročastic a to inkorporáciou magnetitových Fe_3O_4 magnetitových nanočastic na povrch a do interiéru východzích častic a naviazaním termoresponzívneho polyméru poly-N-izopropylakrylamidu na ich povrch. V prvom prípade bol použitý jednoduchý postup zmiešania roztokov a destabilizácie magnetitových nanočastic za účelom získania produktu, ktorý by bol schopný reagovať na prítomnosť vonkajšieho magnetického poľa a to zmenou teploty alebo pohybom riadeným týmto poľom. V druhom prípade boli použité dva rozdielne postupy modifikácie východzích častic založené na radikálovej kopolymerizácii poly-N-izopropylakrylamidu (termoresponzívneho polyméru) s dvojitou väzbou naviazanou na povrch už predmodifikovanej siliky pomocou metakryloxypropyltrimetoxysilánu za účelom získania produktu schopného reagovať na zmenu teplotu okolia v tomto prípade zmenou objemu povrchovej vrstvy a rozdielnou v porozitou.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Sledování kinetiky oxidace siřičitanu prostřednictvím UV spektrometrie

Autor: Jaroslav Solich
Ročník: M1
Ústav: Chemické inženýrství
Školitel: Ing. Michal Kordač, Ph.D.

Absorpce kyslíku do siřičitanu sodného je často využívaná pro zjišťování fyzikálních veličin ($k_L a$, mezifázová plocha) v různých aparátech. Rychlost absorpce je určována z rozdílu koncentrací siřičitanu. Koncentrace siřičitanu sodného v systému je obvykle zjišťována jodometricky. Hlavní nevýhody této metody jsou: vysoká náročnost a nemožnost kontinuálního sledování koncentrace siřičitanu. V této práci je ověřováno využití UV spektrometrie pro sledování reakce siřičitanu s kyslíkem při různých koncentracích katalyzátoru. Tato instrumentální metoda je principiálně jednoduchá a umožňuje kontinuální měření koncentrace siřičitanu sodného v systému. Pro ověření spolehlivosti metody byla pro stanovení siřičitanu použita jak jodometrie tak UV spektrometrie. Porovnáním rychlostí absorpce získané oběma metodami nebyly zjištěny významné odchylky.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Metody přípravy a charakterizace lipozomů v projektu CHOBOTIX

Autor: Martin Štěrbák
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Lipozomy byly připraveny 4 rozdílnými metodami (Banghamova metoda, Mozafariho metoda, MEI, REV). Byla provedena měření trendů při změnách výchozích způsobů přípravy lipozomů. Získané lipozomy byly stabilní po dobu minimálně 14 dní. Byla stanovena střední velikost částic pomocí měření na Zetasizeru Nano ZS. Byla uskutečněna spektrometrická měření. Na základě zkušeností z těchto měření byla sestavena tabulka shrnující vhodnost různých způsobů charakterizace.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Srovnání transportních charakteristik výplní Mellapak 250Y a Mellapak 452Y při destilaci alkoholického a organického systému

Autor: Eliška Vachková
Ročník: M1
Ústav: Chemické inženýrství
Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, Ph.D.

V rámci této práce byly měřeny objemové koeficienty přestupu hmoty na straně kapaliny a plynu, $k_{L,a}$ a $k_{G,a}$, na výplních Mellapak švýcarského výrobce Sulzer. Typová řada výplní Mellapak má analogickou konstrukci lišící se geometrickou plochou a byla nedávno modernizována technickými úpravami zlepšujícími hydraulické chování. K měření byla využita výplň Mellapak 250Y s geometrickou plochou $250\text{m}^2/\text{m}^3$ a modernizovaná výplň Mellapak 452Y s geometrickou plochou $350\text{m}^2/\text{m}^3$. Transportní charakteristiky byly měřeny profilovou metodou při destilaci alkoholického systému methanol-propanol a organického systému cyklohexan-heptan za atmosférického tlaku. Získané výsledky potvrzují výrazně lepší hydraulické parametry inovované výplně Mellapak 452Y. Poměr transportních charakteristik je úměrný poměru geometrických ploch výplní. Vliv použitého systému na hodnoty $k_{G,a}$ odpovídá teoretickým předpokladům. Výrazně vyšší hodnoty $k_{L,a}$ organického systému zatím nejsou vysvětleny.