

*Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství*

**Datum a místo konání: 25.11. 2011 v 8: 30 v posluchárně B III**

**Počet účastníků: 10**

8:30	<b>Antecký Tomáš</b>	<b>Vliv modelu pro koeficient odporu na CFD simulaci suspendace v mechanicky míchané nádobě</b>
8:50	<b>Dudák Michal</b>	<b>3D modelování porézní katalytické vrstvy na mikroúrovni</b>
9:10	<b>Fačkovec Boris</b>	<b>Vývoj programového vybavenia pre analýzu komplexných reakčných systémov: príklad aplikácie na prietokový systém <math>\text{H}_2\text{O}_2</math> - <math>\text{S}_2\text{O}_3^{2-}</math> - <math>\text{SO}_3^{2-}</math></b>
9:30	<b>Ferkl Pavel</b>	<b>Sdílení tepla v heterofázových materiálech</b>
9:50	<b>Hloužek Jakub</b>	<b>CFD simulace procesu denitrifikace spalin metodou SNCR</b>
10:20		<i><b>přestávka</b></i>
10:40	<b>Kadlecová Marcela</b>	<b>Přenos signálu v astrocytech šířením reakčně-difúzních <math>\text{Ca}^{2+}</math> vln</b>
10:40	<b>Konopka Ladislav</b>	<b>Modelování osmotického transportu v porézních membránách</b>
11:00	<b>Kroupa Martin</b>	<b>Studium aglomerace koloidních částic metodou diskrétních elementů</b>
11:20	<b>Labík Libor</b>	<b>Vyhodnocení objemového koeficientu přestupu hmoty při metodě záměny plynů</b>
11:40	<b>Toulec Miloš</b>	<b>Modelování galvanických článků</b>

Sekce :           Matematické modelování v chemickém inženýrství

## Vliv modelu pro koeficient odporu na CFD simulaci suspendace v mechanicky míchané nádobě

Autor:           Tomáš Antecký  
Ročník:         M2  
Ústav:          Ústav chemického inženýrství  
Školitel:       Doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Naplňující práce byla studie suspendace pevné fáze v mechanicky míchané nádobě pomocí počítačové dynamiky tekutin. Práce se především zaměřuje na různé možnosti popisu mezifázové odporové síly, která významným způsobem ovlivňuje kvalitu výsledné vícefázové simulace. Bylo vyzkoušeno několik korelací pro koeficient odporu vyvinutých pro turbulentní oblast proudění. Zmíněné modely však nejsou dostupné v použitém simulačním softwaru ANSYS FLUENT, a proto byly v rámci studie implementovány v podobně uživatelsky definovaných funkcí. Na závěr byly představeny a porovnány dosavadní výsledky získané pomocí CFD simulace pro odlišně zvolené korelace koeficientu odporu.

Sekce :           Matematické modelování v chemickém inženýrství

## 3D modelování porézní katalytické vrstvy na mikroúrovni

Autor:           Bc. Michal Dudák  
Ročník:         M2  
Ústav:          Ústav chemického inženýrství  
Školitel:       Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Vysoké ceny platiny, rhodia a paladia přispívají ke snaze o optimalizaci množství použitého aktivního kovu v heterogenních katalyzátorech při zachování provozních vlastností. Pomocí počítačové simulace lze stanovit vliv difuzních omezení konverze v závislosti na porézní struktuře katalytické vrstvy. Skutečný porézní materiál je v digitální podobě reprezentován kulovými částicemi o dané distribuci velikostí, které jsou nejprve náhodně rozmístěny v prostoru a následně stlačené na hodnotu naměřené makroporozity. Tento proces odpovídá skutečné přípravě vrstvy ze suspendovaných mikročástic nosiče katalyzátoru.

Cílem práce bylo zrekonstruovat skutečné vzorky katalyzátorů do podoby 3D digitálního porézního média, provést simulace transportu a oxidace CO v katalytické vrstvě, a získat tak tabulky efektivních rychlostí reakce a difúze v jednotlivých vzorcích. S využitím těchto dat pak byly provedeny simulace celého kanálku monolitu a předpovězeno makroskopické chování reaktoru – tzv. křivka zapálení. Pro většinu vzorků bylo dosaženo velmi dobré shody s naměřenými daty.

Sekce :           Matematické modelování v chemickém inženýrství.

## Vývoj programového vybavenia pre analýzu komplexných reakčných systémov: príklad aplikácie na prietokový systém $\text{H}_2\text{O}_2$ - $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ - $\text{SO}_3^{2-}$

Autor:           Boris Fačkovec  
Ročník:         M2

Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Analýza stechiometrických sítí (SNA) představuje systematický přístup štúdia komplexných reakčných systémov, umožňujúci popísať kvalitatívne črty siete bez nutnosti znalostí rychlostných konštánt jednotlivých reakcií. Cieľom práce je vyvinúť programové vybavenie umožňujúce efektívne využitie SNA pri skúmaní reálnych systémov. Veľkým problémom SNA je exponenciálne škálovanie časovej náročnosti s počtom reakcií. V rámci projektu boli navrhnuté vysoko efektívne implementácie a modifikácie obvykle používaných algoritmov, znižujúce výpočtovú a pamäťovú náročnosť, a zvyšujúce spoľahlivosť určenia stability, resp. nestability podsietí. Vysledná metodológia bude ilustrovaná na príklade zjednodušeného prietokového systému  $\text{H}_2\text{O}_2 - \text{S}_2\text{O}_3^{2-} - \text{SO}_3^{2-}$  publikovaného v práci „Chaotic pH Oscillations in the Hydrogen Peroxide-Thiosulfate-Sulfite Flow System, Rabai G., Hanazaki I., J. Phys. Chem. A 1999, 103, 7268-7273“.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

## **Sdílení tepla v heterofázových materiálech**

Autor: Pavel Ferkl  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Juraj Kosek, Richard Pokorný

Popis sdílení tepla v heterofázových prostředích jako jsou polymerní pěny nebo aerogely zahrnuje celou řadu jevů, jejichž význam je třeba pečlivě uvážit. V těchto materiálech je třeba uvažovat kombinované sdílení tepla vedením molekulami v celách, fonony v pevné fázi a zářením fotony přes celý materiál. Tepelné záření může být v materiálu absorbováno, znovu vyzářeno, rozptýleno nebo odraženo na fázovém rozhraní. Pro studium výše zmíněných jevů byly na základě bilančních a transportních vztahů vyvinuty jedno- i vícerozměrné matematické modely. Dále byly popsány numerické metody pro řešení soustav parciálních diferenciálních rovnic. V práci je diskutován vliv spektrálních vlastností heterofázových materiálů na jejich tepelně-izolační vlastnosti. V pěnách s velkou porozitou se radiace může podílet i více než 30% na celkovém tepelném toku. V takovýchto pěnách můžeme navíc pozorovat nelineární teplotní profil. V souladu s experimentálními daty naše modely předvídají minimální tepelnou vodivost při určité porozitě pěny. 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 procesu denitrifikace spalin metodou SNCR**

Autor: Jakub Hloužek  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Jedním ze způsobů snižování emisí oxidů dusíku, vznikajících v průmyslových kotlích, je aplikace selektivní nekatalytické redukce (SNCR). Tato práce je zaměřena na ověření možnosti použití počítačové dynamiky tekutin pro popis procesu denitrifikace spalin pomocí

metody SNCR. Simulace je kompletně provedena v programu ANSYS FLUENT. Numerická simulace zahrnuje dvě vlastní fáze. První fází tvoří samostatný výpočet spalování pevného paliva v kotli se zahrnutou tvorbou oxidů dusíku. Ve druhé fázi výpočtu je do výpočetní geometrie zahrnuta injektáž redukčního činidla. Pomocí implementovaného modelu SNCR je řešena změna koncentrace oxidů dusíku na výstupu ze sledované geometrie. Výsledná koncentrace vystupujícího plynu, zjištěná pomocí numerické simulace, je porovnána s materiálovou bilancí reagujících látek.

Sekce :           Matematické modelování v chemickém inženýrství

## **Přenos signálu v astrocytech šířením reakčně-difúzních $\text{Ca}^{2+}$ vln**

Autor: Marcela Kadlecová

Ročník: M2

Ústav: Chemické inženýrství

Školitel: Prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Nervový systém se skládá ze dvou druhů buněk – neuronů a glií, jež jsou stejnou mírou zodpovědné za jeho správnou funkci. Astrocyty jsou charakteristické hvězdčovitě gliové buňky, které jsou z hlediska struktury nejčastěji se vyskytujícím typem buněk v celém centrálním nervovém systému. Astrocyty mají na své membráně receptory pro mnoho neurotransmiterů, jejichž aktivace vede k oscilacím  $\text{Ca}^{2+}$ . Tyto oscilace indukují uvolnění chemických transmiterů jako je glutamát, D-serin a ATP. Astrocyty se také přímo podílejí na regulaci signalizace mezi neurony a poskytují živiny do nervové tkáně. Mnoho základních fyziologických procesů je řízeno vápníkem. Primární roli však hraje  $\text{Ca}^{2+}$  jako intra- nebo intercelulární posel nesoucí informaci. Sousední buňky jsou propojeny tzv. volnými spoji, které umožňují vzájemný přenos  $\text{Ca}^{2+}$  vln, molekul a iontů. Pomocí těchto volných spojů se  $\text{Ca}^{2+}$  vlny šíří nejenom uvnitř buňky, ale jsou schopny propagace i do větších vzdáleností. Pro simulační studii byl vybrán deterministický model s typem komunikační cesty přes volné spoje.  $\text{Ca}^{2+}$  vlny se šíří v reakčně-difúzním prostředí pomocí uměle vyvolané perturbace uvnitř jedné buňky. Matematický model byl vyvinut za účelem analýzy vzájemného působení procesů zapojených do propagace vln a bližšího porozumění dynamice  $\text{Ca}^{2+}$  vln.

Sekce:           Matematické modelování v chemickém inženýrství

## **Modelování osmotického transportu v porézních membránách**

Autor:           Ladislav Konopka

Ročník:         M1

Ústav:         Ústav chemického inženýrství

Školitel:       Juraj Kosek, Richard Pokorný

Tato práce se zabývá matematickým modelováním transportních procesů, konkrétně osmózou, elektroosmózou a hydraulickým tokem v tenké kapiláře (mikrokanálku). Takovou kapiláru bereme jako první aproximaci pro studium vlastností porézních membrán, které se používají například při elektrodialýze, v palivových článcích a podobně. Hlavním cílem práce je studium osmotického toku, který v takových prostředích způsobuje transport rozpouštědla (např. vody) mezi dvěma médii oddělenými iontově-výměnnou membránou. Na několika modelových příkladech je ukázán vliv osmózy na koncentrační, potenciálové a rychlostní

pole v kapiláře. Výsledky ukazují, že osmóza může často významně ovlivňovat efektivitu celého separačního procesu.

Sekce :           Matematické modelování v chemickém inženýrství

## **Studium aglomerace koloidních částic metodou diskrétních elementů**

Autor:           Martin Kroupa  
Ročník:          M1  
Ústav:           Ústav chemického inženýrství  
Školitel:        Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Michal Vonka

Koloidní systémy se vyskytují v mnoha odvětvích chemického průmyslu. Znalost mechanismů jejich aglomerace je nezbytná pro realistický popis jevů jako jsou například emulzní či suspenzní polymerace, agregace sypkých hmot, zachycení částic v nanofiltrech a další. Mechanismy aglomerace koloidních částic stejně jako vliv různých faktorů na její průběh nejsou dosud přesně známy. Program použitý v této práci popisuje vzájemné silové poměry v systému pomocí Derjaguin–Landau–Verwey–Overbeek teorie, Hookeova zákona a Stokesova zákona za použití metody diskrétních elementů. Tento program je založen na druhém Newtonově zákoně a uvažuje kombinace sil popsanych výše zmíněnými teoriemi. S jeho pomocí byla studována dynamika interakce dvou nebo mnoha částic s důrazem na charakterizaci faktorů vedoucích k aglomeraci. Tato práce navazuje na dřívější studie a představuje další krok k bližší charakterizaci koloidních systémů a k možnosti předpovídat jejich chování a stabilitu na základě jejich vlastností.

Sekce :           Matematické modelování v chemickém inženýrství

## **Vyhodnocení objemového koeficientu přestupu hmoty při metodě záměny plynů**

Autor:           Libor Labík  
Ročník:          M2  
Ústav:           Chemické inženýrství  
Školitel:        Doc. Ing. Tomáš Moucha, Dr.

Cílem práce bylo setavit model popisující průběhy koncentrací kyslíku v kapalině a plynu v mechanicky míchaném probublávaném fermentoru po skokové záměně koncentrace plynu na vstupu. Na jeho základě byl vytvořen program pro vyhodnocení objemového koeficientu přestupu hmoty  $k_L a$ . Dále tímto programem byla vyhodnocena data z experimentů a byla porovnána s výsledky z dynamické tlakové metody. Výsledky byly porovnány s obdobnými pokusy provedenými na fermentoru laboratorního měřítka. Ukázalo se, že metoda záměny plynů je nevhodná pro fermentory obou měřítek, z důvodu přílišné citlivosti na stanovení zádrže při vyšších otáčkách míchadel.

Sekce :           Matematické modelování v chemickém inženýrství

## **Modelování galvanických článků**

Autor: Miloš Toulec  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Alexandr Zubov

Tato práce se zabývá matematickým modelováním dynamiky primárních a sekundárních galvanických článků (baterií). Model je formulován jako jednorozměrný, přičemž jeho kostrou je látková bilance iontů společně s Poissonovou rovnicí pro výpočet rozložení potenciálu. Transport iontů je uvažován mechanismem difúze a migrace. Výsledná soustava parciálních diferenciálních rovnic je diskretizována metodou konečných objemů, přičemž výpočetní síť je výrazně zhuštěna v oblasti elektrod. Model je sestaven dostatečně obecně, aby mohl být aplikován na popis a studium chování různých typů článků, v této práci byl jako konkrétní systém zvolen klasický olověný akumulátor. V současné fázi vývoje je již model schopen predikovat zátěžovou charakteristiku baterie (tj. závislost svorkového napětí na množství odebíraného proudu) a do budoucna se počítá s možností srovnání výsledků simulací s experimentálními daty.

## Sekce: *Procesní a chemické inženýrství 1*

**Datum a místo konání:** 25.11. 2011 v 8: 30 v posluchárně B 139

**Počet účastníků:** 10

8:30	<b>Beránek Pavel</b>	<b>Optimalizace technologie výroby mikroelektrodových polí</b>
8:50	<b>Gubiš Jan</b>	<b>Konstrukční návrh kolony se smáčenou stěnou</b>
9:10	<b>Jakubec Martin</b>	<b>Příprava strukturovaných mikročástic rozprašovacím sušením s využitím třífázové trysky</b>
9:30	<b>Korčák Miloš</b>	<b>Charakteristika výplně Mellapak 452Y</b>
9:50	<b>Leskovjan Martin</b>	<b>Simulační studie kombinovaného systému DOC–NSRC–SCR pro konverzi automobilových výfukových plynů</b>
10:20		<i><b>přestávka</b></i>
10:40	<b>Roubíčková Tereza</b>	<b>Degradace textilních barviv v rotačním reaktoru s imobilizovanou houbou <i>Irpex lacteus</i></b>
11:00	<b>Sarvašová Nina</b>	<b>Syntéza hybridních SiO<sub>2</sub>/Pnipam/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> mikročástic</b>
11:20	<b>Smrčka David</b>	<b>Studium kinetiky reaktivní granulace pro výrobu detergentů</b>
11:40	<b>Solich Jaroslav</b>	<b>Distribuce pevných částic a jejich vliv na mezifázovou plochu</b>
12:00	<b>Václavík Marek</b>	<b>Vliv místa odebrání vzorků z katalytického monolitu a jejich uložení v laboratorním reaktoru na měřená data</b>

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

## **Optimalizace technologie výroby mikroelektrodových polí**

Autor: Pavel Beránek  
Ročník: M2  
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.

Pro objasnění příčin těchto odlišností je nutné provést experimenty zahrnující měření veličin pomocí polí mikroelektrod. V současné době je snaha takové senzory zmenšovat, s klesajícími rozměry však roste náročnost jejich výroby. Defekty způsobující nefunkčnost zařízení nejsou výjimkou a jejich přítomnost není vždy na první pohled patrná.

V práci jsou popsány některé možnosti eliminace vzniku vad při výrobě průtočného senzoru pro měření elektrické vodivosti a ukázána detekce vadných mikroelektrod pomocí impedanční spektroskopie.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

## **Konstrukční návrh kolony se smáčenou stěnou**

Autor: Jan Gubiš  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, Ph.D., Ing. Jan Haid

V laboratoři sdílení hmoty byla vyvinuta tzv. profilová metoda pro získávání objemových koeficientů přestupu hmoty  $k_L a$ ,  $k_G a$  na výplních za destilačních podmínek. Závislosti těchto veličin na průtoku fází poskytované profilovou metodou jsou však v rozporu s obecně přijímanými představami a je tedy zamýšleno provést ověření této metodiky v jednodušším experimentálním uspořádání. Jako nejvhodnější aparát se jeví kolona se smáčenou stěnou, neboť mezifázová plocha dosahovaná v tomto zařízení je známá a shodná pro různé průtoky fází a pro absorpční i destilační podmínky. Profilová metoda v tomto uspořádání pak umožňuje stanovení přímo hodnoty koeficientů přestupu hmoty ( $k_G$ ,  $k_L$ ) a jejich závislosti na průtocích fází pro destilační podmínky, zatímco experimenty se standardními absorpčními systémy poskytují obdobné výsledky za podmínek absorpce. Cílem práce je navrhnout experimentální kolonu se smáčenou stěnou, kterou bude možné provozovat za absorpčních/desorpčních i destilačních podmínek a bude poskytovat možnost měření koncentračních profilů podél její výšky – zdrojová data potřebná pro použití profilové metody. Mezi hlavní body konstrukčního návrhu se řadí výška kolony, příkon vařáku, návrh distributoru kapalné fáze a konstrukce odběrových míst.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

## **Příprava strukturovaných mikročástic rozprašovacím sušením s využitím třífázové trysky**



Autor: Martin Jakubec  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Práce se zabývá přípravou stabilních mikročastic určených pro transport a cílené vylučování aktivních látek metodou rozprašovacího sušení. Rozprašovací sušení je běžně používáno v mnoha průmyslových odvětvích například k výrobě práškového mléka, léčiv nebo nanomateriálů. V této práci bylo využito inovativní kombinace speciální třífázové trysky a laboratorní rozprašovací sušárny, pomocí níž byly připraveny chitosanové mikročastice, které byly zevnitř zesíťovány a byly prozkoumány jejich parametry (morfologie, velikost, míra bobtnání ve vodě a zeta potenciál). To vše bylo prováděno jako příprava na budoucí enkapsulaci prekursorů antibakteriálních aktivních látek obsažených v česneku (alliin a enzym alliináza) do těchto mikročastic a vytvoření umělé česnekové buňky pro budoucí *in vivo* aplikace.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

## **Charakteristika výplně Mellapak 452Y**

Autor: Miloš Korčák  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, PhD., Ing. Jan Haidl

Strukturovaná výplň Mellapak 452Y je jednou ze strukturovaných výplní vyráběných firmou Sulzer. Na této výplni byly při atmosférické destilaci systému methanol-propanol při nekonečném zpětném toku naměřené koncentrační profily pro různé průtoky fází. Naměřené koncentrační profily poskytly základ k výpočtu HETP, jako jednoho z ukazatelů separační účinnosti výplně. Zároveň byla při destilaci propanolu naměřena tlaková ztráta na výplni jako funkce F-faktoru a vyhodnoceny body zavěšení a zahlcení. Vypočítané hodnoty HETP a hydraulické vlastnosti výplně byly porovnány s hodnotami naměřenými na výplni Mellapak 252 stejného výrobce a v další práci poslouží ke komplexnějšímu porovnání těchto výplní.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

## **Simulační studie kombinovaného systému DOC–NSRC–SCR pro konverzi automobilových výfukových plynů**

Autor: Martin Leskovjan  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Neustálé zpřísnování emisních limitů pro automobily nutí výrobce používat stále složitější a dražší systémy pro ošetření spalin. Optimalizace parametrů katalyzátoru (velikost, vzdálenost od motoru, hustota kanálků atp.) je výhodná nejen z finančního hlediska, ale stále častěji hrají roli i prostorové důvody. Tato práce je ve formě parametrické simulační studie a zabývá se kombinovaným systémem složeným z katalyzátorů DOC, NSRC a NH<sub>3</sub>-SCR, řazených za sebou. Je zkoumán vliv velikosti jednotlivých monolitů, hustot kanálků a vzdáleností katalyzátorů od motoru (odpovídající jinému průběhu teplot). Jsou porovnávány dosažené konverze CO, HC a NO<sub>x</sub> během standardního Evropského jízdního cyklu NEDC.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

## **Degradace textilních barviv v rotačním reaktoru s imobilizovanou houbou *Irpex lacteus***

Autor: Tereza Roubíčková  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Prof. Ing. Pavel Hasal, CSc.

Cílem projektu bylo zprovoznit laboratorní rotační biologický reaktor s imobilizovanou houbou *Irpex lacteus* pro degradaci textilních barviv a zvolit vhodný typ nosiče pro imobilizaci houby, protože nosič může zásadním způsobem ovlivnit účinnost reaktoru. Dalším cílem u tohoto reaktoru provést pokusy s degradací textilních barviv. Pro experimenty byl sestaven reaktor s půlkruhovou vanou. Na hřídeli je připevněn buben, který je uvnitř rozdělen na tři části shodné velikosti. Během experimentu byla testována pórovitá výplň ve tvaru válečků nazývaných AL-Schwimmbettmedium. Reaktor byl provozován ve vsádkovém režimu. Pro degradční pokusy bylo použito barvivo Remazolová brilantní modř R. Dalším úkolem bylo zjistit koeficient přestupu hmoty pro kyslík do růstového média. Rozpuštěný kyslík je jedním z mnoha faktorů, který ovlivňuje růst houby a její schopnost odbarvovat textilní barviva.

Sekcia : Procesní a chemické inženýrství 1

## **Syntéza hybridných $\text{SiO}_2$ /Pnipam/ $\text{Fe}_3\text{O}_4$ mikročastic**

Autor: Nina Sarvašová  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství a Laboratoř chemické robotiky  
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Cieľom tejto práce je pripraviť hybridné mikročastice, ktoré budú obsahovať siliku, termoresponzívny polymér poly-N-isopropylakrylamid a magnetitové nanočastice. Každý z daných materiálov dodáva žiadaným časticiam unikátne vlastnosti ako odolnosť a tvrdosť siliky, schopnosť zmeny objemu v závislosti na teplote, ktorou disponuje Pnipam, a možnosť indukčného ohrevu ako následku prítomnosti magnetitových nanočastic. Syntéza takýchto mikročastic sa skladá z viacerých krokov. Základom je získanie dutých silikových makroporéznych mikročastic s použitím metódy pevného templátu, ktoré sú následne modifikované naviazaním termoresponzívneho polyméru na ich povrch. Čo sa magnetitových nanočastic týka, boli použité dva postupy. V prvom boli častice inkorporované už v procese tvorby dutých silikových mikročastic, zatiaľ čo v druhom boli naviazané na kompozitné mikročastice  $\text{SiO}_2$ /Pnipam v poslednom kroku syntézy výsledných hybridných mikročastic. Boli skúmané viaceré metódy modifikácie silikových mikročastic termoresponzívnym polymérom za účelom výberu tej najvhodnejšej varianty a takisto bola premeraná schopnosť indukčného ohrevu takto získaných častic.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

## **Studium kinetiky reaktivní granulace pro výrobu detergentů**

Autor: David Smrčka  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Sodná sůl kyseliny dodecyl-benzensulfonové je v současnosti nejrozšířenější povrchově aktivní látkou používanou v pracích prášcích a dalších čisticích prostředcích. Vyrábí se suchou neutralizací kyseliny dodecyl-benzensulfonové pomocí uhličitanu sodného v reakčním granulátoru, kde dochází k nástřiku kyseliny do mechanicky promíchávaného lože uhličitanu. Specifikem této technologie je, že kyselina kromě reaktantu plní i funkci pojiva mezi částicemi uhličitanu a reakční kinetika tedy neovlivňuje pouze celkovou konverzi ale i fyzikálně-chemické vlastnosti vznikajících granulí. V této práci budou prezentovány výsledky z měření kinetiky suché neutralizace v laboratorním granulátoru. Reakční kinetika byla vyhodnocena ze závislosti objemu vyvinutého oxidu uhličitého – vedlejšího produktu suché neutralizace – na čase při různých teplotách a rychlostech míchání. Byl rovněž sestaven matematický model popisující kinetiku suché neutralizace a jeho pravost byla ověřena sérií experimentů.

Sekce :            Procesní a chemické inženýrství 1

## **Distribuce pevných částic a jejich vliv na mezifázovou plochu**

Autor:            Jaroslav Solich  
Ročník:           M2  
Ústav:            Ústav chemického inženýrství  
Školitel:         Ing. Michal Kordač, Ph.D.

Některé vlastnosti pevných částic používaných při experimentech jsou už v dnešní době známé a využívá se jich v různých aplikacích. Příkladem je aktivní uhlí, o němž se ví, že dokáže z vody odstraňovat organické látky. Další využívanou vlastností pevných částic, je netečnost k systému, ve kterém se vyskytují. Takovým případem jsou částice  $Al_2O_3$ , Glass Hollow,  $SiO_2$ , které se využívají v systému, v němž probíhá reakce siřičitanu sodného s kyslíkem. Tento systém je velmi náchylný na nečistoty, které způsobují například zpomalení či zrychlení zmíněné reakce. Vliv částic na tuto vlastnost je již prozkoumaný a známý, ale pomocí siřičitanového systému se také zjišťuje mezifázová plocha. Pro její určení je potřeba zjistit zda zmíněné částice mají na mezifázovou plochu vliv. U všech používaných částic je deklarována výrobcem velikost. Ve skutečnosti jsou tam částice v určitém intervalu velikostí a je zapotřebí znát všechny velikosti tohoto intervalu. Určením všech velikostí intervalu lze zjistit i plochu těchto částic a měřením lze ověřit jejich vliv na siřičitanový systém.

Sekce :            Procesní a chemické inženýrství 1

## **Vliv místa odebrání vzorků z katalytického monolitu a jejich uložení v laboratorním reaktoru na měřená data**

Autor:            Marek Václavík  
Ročník:           B2  
Ústav:            Ústav chemického inženýrství  
Školitel:         Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Práce se zabývá optimalizací postupů používaných při měření konverzí automobilových výfukových plynů na vzorcích katalytického monolitu v laboratorním reaktoru. Je zkoumán vliv místa odebrání vzorku na získaná data. Ukazuje se, že aktivní katalytická vrstva je v průmyslově vyráběném monolitu nanesená do jisté míry nerovnoměrně, přičemž její množství má zásadní vliv na celkové konverze. Výsledky ovlivňuje také způsob uložení vzorků v laboratorním reaktoru a v neposlední řadě i způsob utěsnění prostoru kolem nich, což je demonstrováno na měřených datech. Na základě získaných poznatků jsou navrženy zásady pro vhodný výběr vzorků a jejich uložení v reaktoru, aby byla získána reprezentativní a opakovatelná data.

## Sekce: *Procesní a chemické inženýrství 2*

**Datum a místo konání:** 25.11. 2011 v 8: 30 v knihovně B141b

**Počet účastníků:** 9

8:30	Dundálek Jan	Konstrukce primární zinek/vzduchové baterie
8:50	Fišer Jan	Vývoj mikrofluidního elektrochemického imunosenzoru
9:10	Ira Jiří	Měření a vyhodnocení experimentálních dat pro modelování tepelného rozkladu pevných materiálů
9:30	Isoz Martin	Metody hodnocení separační účinnosti výplní při destilaci ternárních systémů
9:50	Kohoutová Štěpánka	Posouzení spolehlivosti experimentální techniky záměny vstupního plynu pro měření objemového koeficientu přestupu hmoty.
10:20		<i>přestávka</i>
10:40	Kremláčková Zuzana	Příprava kompozitních SiO <sub>2</sub> mikročástic pro cílené vylučování látek
11:00	Mráček David	Porovnání vlastností čerstvého a vystařeného vzorku automobilového katalyzátoru s ukládáním NO <sub>x</sub>
11:20	Pittermanová Anna	Syntéza, charakterizace a adhezní vlastnosti tepelně-citlivých hydrogelových mikročástic
11:40	Zygulová Petra	Využití nosiče Mutag BioChip TM v bioreaktorech pro úpravu textilních odpadních vod

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

## **Konstrukce primární zinek/vzduchové baterie**

Autor: Jan Dundálek  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Josef Chmelař, Ing. Jaromír Pociďič

S rozvojem mobilních elektrických spotřebičů (elektromobily, notebooky, mobilní telefony, atd.) jsou kladeny stále větší požadavky na jejich zdroje energie, kterými jsou nejčastěji baterie. Vývoj nových elektrických článků si klade za cíl zvýšit výkon a množství uložené energie vztahované na hmotnost článku při použití levných a dostupných materiálů šetrných k životnímu prostředí. Zinek/vzduchové baterie využívající oxidaci zinku v alkalickém prostředí vzdušným kyslíkem splňují výše uvedené požadavky. Při srovnání s NiMH či Li-Ion akumulátory, které jsou dnes nejvíce používané zdroje elektrické energie pro mobilní zařízení, dosahuje systém Zn/vzduch více jak 2x větší specifické energie (Wh/kg) a přitom využívá netoxických a dostupných materiálů, nicméně nedosahuje tak dobrých hodnot specifického výkonu (W/kg). Práce je zaměřena na návrh konstrukce primární Zn/vzduchové baterie. Na základě vypracované literární rešerše je sestavována laboratorní baterie.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

## **Vývoj mikrofluidního elektrochemického imunosenzoru**

Autor: Jan Fišer  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Doc. Ing. Michal Příbyl, PhD

Práce je zaměřena na vývoj elektrochemického mikrofluidního senzoru pro imunoafinitní detekci proteinových molekul. Elektrochemická detekce je založena na monitorování redoxní reakce katalyzované enzymem HRP (horseradish peroxidase) cyklickou voltametrií. Enzym je obvykle vázán na detekční (sekundární) protilátky a v přítomnosti peroxidu vodíku katalyzuje oxidaci řady organických sloučenin (substrátů). Pro uvedený účel byl zkonstruován mikrofluidní čip z plexiskla se třemi zlatými mikroelektrodami o šířce 100  $\mu\text{m}$ . Vyvinutý mikrofluidní čip byl nejprve testován při monitorování redoxní přeměny ferro/ferricyanid v roztoku  $\text{KNO}_3$ . Byla získána kalibrační křivka závislosti elektrochemického signálu na koncentraci ferro/ferricyanidu. V dalším kroku byl zkoumán biochemický systém obsahující volný enzym HRP, hydrochinon jako enzymový substrát a peroxid vodíku jako oxidační činidlo. Cílem je získání kalibrační závislosti elektrochemického signálu na koncentraci volného enzymu v reakční směsi. Následovat budou experimenty s imobilizovaným enzymem, které již budou napodobovat chování reálného imunoanalytického senzoru.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

## **Měření a vyhodnocení experimentálních dat pro modelování tepelného rozkladu pevných materiálů**

Autor: Jiří Ira  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství

Školitel: Doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Znalost reakčního schématu společně s kinetickými parametry (aktivační energie, pre-exponenciální faktor, řád reakce) tepelné degradace je nezbytná pro matematické modelování pyrolýzy pevných materiálů. Kinetické parametry modelu se vyhodnocují na základě termogravimetrické analýzy. Analýza byla provedena pro zkušební vzorky borovice a buku ve dvou atmosférách (vzduch, dusík) při rychlostech zahřívání 5 K/min, 15 K/min a 25 K/min. Hlavním cílem této práce bylo vyhodnotit získaná data pomocí tzv. isokonverzních metod. Kvůli značným zjednodušením použitým v těchto metodách slouží získané výsledky především jako počáteční odhad pro další vyhodnocování kinetických parametrů pomocí pokročilých optimalizačních metod jako jsou např. genetické algoritmy. Dále byla pro stejnou sadu vzorků získána data z kónického kalorimetru při tepelných výkonech zářiče 35 a 50 kW/m<sup>2</sup>. Kónická kalorimetrie poskytuje informace o hmotnostním úbytku a rychlosti uvolňování tepla během hoření. Obdržená data byla srovnána s tabelovanými hodnotami a v budoucnu se využijí k porovnávání výsledků matematických modelů s experimenty.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

## **Metody hodnocení separační účinnosti výplní při destilaci ternárních systémů**

Autor: Martin Isoz  
Ročník: M1  
Ústav: Chemického inženýrství  
Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, PhD.

Dělicí účinnost výplní při destilaci binárních systémů je obvykle charakterizována hodnotou HETP. Výpočet HETP u ternárních systémů více, či méně selhává a je proto nutné metodiku výpočtu modifikovat, nebo přistoupit ke zcela jinému popisu separační účinnosti. V této práci byly použity tři rozdílné přístupy k výpočtu s cílem porovnat získané hodnoty HETP. Výpočet byl proveden na základě koncentračních profilů naměřených při atmosférické destilaci systému methanol-ethanol-propan-1-ol na výplních Intalox-25 a Mellapak 250Y. Získané hodnoty HETP byly vyneseny v závislosti na F-faktoru a byla diskutována jejich shoda. V závěru práce byl nastíněn Maxwell-Stefanův přístup k hodnocení účinnosti výplně, kterým se student bude dále zabývat.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

## **Posouzení spolehlivosti experimentální techniky záměny vstupního plynu pro měření objemového koeficientu přestupu hmoty.**

Autor: Štěpánka Kohoutová  
Ročník: M1  
Ústav: Chemického inženýrství  
Školitel: Doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Práce posuzuje použitelnost experimentální techniky záměny vstupního plynu pro stanovení objemového koeficientu přestupu hmoty ( $k_L a$ ) v poloprovozním mechanicky míchaném fermentoru. Představuje analytické řešení matematického modelu přestupu hmoty mezi plynem a kapalinou, který zahrnuje popis postupného vyplachování zádrže plynu po skokové změně koncentrace ve vstupním plynu. Jsou ukázány "váhové koeficienty" části modelu

popisující rychlost přestupu hmoty (danou hodnotou  $k_L a$ ) a části popisující rychlost vyplachování zádrže plynu (danou dobou prodlení plynu). Srovnání modelu s experimentálními daty ukazuje, že při vyšších frekvencích otáčení míchadel je průběh koncentrace kyslíku v kapalině určován rychlostí vyplachování plynu v zádrži a nikoli rychlostí přestupu hmoty mezi plynem a kapalinou. Metoda záměny vstupního plynu tedy není vhodná pro vyhodnocení vyšších hodnot  $k_L a$  a to ani v mezích potřebných pro návrh průmyslových zařízení.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

### **Příprava kompozitních SiO<sub>2</sub> mikročástic pro cílené vylučování látek**

Autor: Zuzana Kremláčková  
Ročník: M1  
Ústav: Chemického inženýrství  
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Pevné duté porézní mikročástice z oxidu křemičitého jsou ideální pro použití k cílenému vylučování látek. Výhodou jsou především mechanická a chemická odolnost a snadná modifikace povrchu. Cílem této práce je příprava dutých kompozitních mikročástic SiO<sub>2</sub>-Fe<sub>x</sub>O<sub>y</sub> a jejich charakterizace. Dále pak schopnost uzavřít látku do těchto mikročástic a tu následně vyloučit v daném čase. Pro přípravu kompozitních dutých mikročástic byla použita metoda s pomocí kapalné šablony s Fe<sub>x</sub>O<sub>y</sub> částicemi předpřipravenými redoxní reakcí Fe-solí. Po předchozí studii vlivu zabudovaného Fe<sub>x</sub>O<sub>y</sub> na pevnost částic byly připraveny částice s proměnným hmotnostním zastoupením oxidu železato-železitého. Pro získání přehledu o proměnlivosti parametrů v závislosti na podmínkách přípravy byly následně studovány jejich vlastnosti - velikost, morfologie, schopnost indukčního ohřevu ve vnějším elektromagnetickém poli a byly provedeny vylučovací experimenty s modelovou látkou, vitamínem B12. Výsledky provedených experimentů ukazují, že uzavřená látka se ve vodném prostředí pomocí difuze vyloučí v řádu desítek hodin. Pro praktické využití je však nezbytné, abychom byli schopni nesenou látku v částicích uchovat alespoň několik dnů. Současná práce se tedy zabývá studiem možností uzavření modelové látky (vitamín B12) v částicích, tedy uzavření pórů, jednoduchými lipidy, které po zahřátí póry opět uvolní.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

### **Porovnání vlastností čerstvého a vystařeného vzorku automobilového katalyzátoru s ukládáním NO<sub>x</sub>**

Autor: Bc. David Mráček  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství (409)  
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Automobilové katalyzátory během svého provozu podléhají stárnutí, které má za následek postupné zhoršování jejich účinnosti (deaktivaci). Jeden z mechanismů stárnutí probíhá v důsledku teplotního namáhání katalyzátoru, což se projeví změnami ve struktuře katalytické vrstvy – slinutím a zmenšením aktivního povrchu katalytických center. Tato práce se zabývá laboratorním zkoumáním průmyslového katalyzátoru s ukládáním a redukcí NO<sub>x</sub> (typ NSRC) a jeho následným matematickým modelováním. Nejprve byla provedena série měření se vzorky čerstvého katalyzátoru (zápalné křivky oxidace CO a HC, adsorpce a redukce NO<sub>x</sub>, ukládací kapacita



kyslíku). Následně byly stejné experimenty provedeny i s vystařeným vzorkem téhož katalyzátoru. Porovnáním takto získaných dat bylo možné popsat rozdíly v některých důležitých vlastnostech mezi čerstvým a vystařeným vzorkem katalyzátoru a vyhodnotit příslušné parametry matematického modelu.

Sekce: Procesní a systémové inženýrství 2

## **Syntéza, charakterizace a adhezní vlastnosti tepelně-citlivých hydrogelových mikročásteček**

Autor: Anna Pittermannová

Ročník: M1

Ústav: Chemického inženýrství

Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Materiály specificky reagující na změnu vlastností vnějšího prostředí jsou dnes hojně studovány zejména pro jejich potenciální využití v cíleném vylučování aktivních látek. Proto se zabýváme syntézou mikročásteček z termoresponzivního polymeru jenž je schopen měnit své vlastnosti a objem. Kompozitní mikročástečky jsou složeny z termoresponzivního hydrogelu poly-N-isopropyl-akrylamidu (PNIPAMu), z nanočásteček oxidu železa a z nanočásteček oxidu křemičitého. Syntéza takto strukturovaných kompozitů byla prováděna pomocí metody inverzní Pickeringovy emulzní polymerace. Pro budoucí uplatnění kompozitních mikročásteček jako nosičů aktivních látek je nezbytně nutné, abychom dokázali předem odhadnout místo, na které se přichytí. Proto se zabýváme studiem adhezních vlastností mikročásteček. Adhezní vlastnosti se studovaly při různých teplotách, při různých objemových průtocích a na různých typech substrátu. Substráty byly voleny tak, ať jsou zastoupené jak hydrofilní tak hydrofobní povrchy. Ke studiu adhezních vlastností byla využita průtočná cela s definovaným rychlostním profilem proudící tekutiny. Míra adheze byla vyhodnocována jako procento ulpělých částic na jednotkové ploše substrátu v závislosti na průtoku kapaliny.

Sekce :            Procesní a chemické inženýrství 2

## **Ověření schopnosti houby *Irpex lacteus* kolonizovat nosič Mutag BioChip TM a jeho využití v biofiltrech** **Využití nosiče Mutag BioChip TM v bioreaktorech pro úpravu textilních odpadních vod**

Autor:            Petra Zygulová

Ročník:           M2

Ústav:            Ústav chemického inženýrství

Školitel:         Prof. Ing. Pavel Hasal, CSc.

Tato práce se zabývá experimentálním testováním schopnosti houby *Irpex lacteus* kolonizovat nosič Mutag BioChip TM a ověřit možnost využití tohoto nosiče pro odbarvování textilních barviv. V rámci této práce byla použita následující barviva: Remazolová brilantní modř R a Reaktivní oranž 16. Součástí práce je popis provedených odbarvovacích pokusů ve stacionárních baňkových kulturách nejen s nosičem Mutag BioChip TM, ale i s pěnovým nosičem Filtren TM. Pro experimentální odbarvování byla použita výše zmíněná barviva s počáteční koncentrací 200 mg.dm<sup>-3</sup>. Druhou část této práce tvoří popis experimentálního měření v nově navrženém probublávaném reaktoru s výplní z nosiče Mutag BioChip TM. V tomto reaktoru byly provedeny odbarvovací pokusy s barvivem Remazolová brilantní modř

R o počátečních koncentracích 300 a 200 mg.dm<sup>-3</sup>. V této práci jsou ilustrovány výsledky obou experimentálních modifikací.

## Sekce: *Procesní a chemické inženýrství 3*

**Datum a místo konání:** 25.11. 2011 v 8: 30 v posluchárně B03

**Počet účastníků:** 10

8:30	Kolda Jan	Dynamický model transportních procesů v koloně pro inverzní plynovou chromatografii
8:50	Kotala Tomáš	Technologické aspekty zmenšování měřítka v mikrofluidních zařízeních z polymerních substrátů
9:10	Matuška Petr	Sorpce a difúze v polymerech měřená na základě dynamiky tlakové odezvy
9:30	Nistor Andra	Příprava a charakterizace nanopěn
9:50	Roder Pavel	Měření objemového koeficientu přestupu hmoty v plynné fázi na strukturovaných výplních při absorpci
10:20		<i>přestávka</i>
10:40	Skala Martin	Recording and processing of oxygen probes' signal
11:00	Štěrbák Martin	Srovnávací studie vlivu metody přípravy lipozomů na stabilitu a kinetiku vylučování enkapsulované látky
11:20	Vostal Radek	Ověření vhodnosti rozšíření korelace pro výpočet objemového koeficientu přestupu hmoty v aerované míchané nádobě pro zvětšování měřítka
11:40	Vrána Jiří	Charakteristiky redoxní průtočné baterie
12:00	Zuček Karel	Příprava tenkých vrstev elektrorozprašováním pro aplikace v energetice

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

## **Dynamický model transportních procesů v koloně pro inverzní plynovou chromatografii**

Autor: Jan Kolda  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Alexandr Zubov

Inverzní plynová chromatografie (iGC) je experimentální metoda umožňující charakterizaci difúzního transportu v porézních částicích. Naměřená data z iGC jsou zpracovávána modelem podle van Deemtera nebo přímým srovnáním naměřených a simulovaných koncentračních pulsů. Experimenty s laboratorní iGC kolonou prováděné za různých tlaků ukázaly, že žádný v současné době dostupný model nedokáže interpretovat difúzi probíhající paralelně jak v pórech, tak v pevné fázi polymerních částic. Proto je vyvíjen více-škálový model prostorově trojrozměrné rekonstruované 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. V současné verzi modelu byl opuštěn původní předpoklad vazkého (Stokesova) toku a Navierovy-Stokesovy rovnice jsou tak řešeny v plné formulaci. Vyvinutá metodika je aplikována na simulaci např. kapilární chromatografie (kapilára s vnitřní stěnou pokrytou adsorbentem) nebo disperze koncentračního pulzu na izolované porézní částici polymeru.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

## **Technologické aspekty zmenšování měřítka v mikrofluidních zařízeních z polymerních substrátů**

Autor: Tomáš Kotala  
Ročník: M2  
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  $\mu\text{m}$ . Mikrofluidní zařízení mají již 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 200  $\mu\text{m}$  lze poměrně snadno vyrobit např. mikrofrézováním. Pro některé aplikace je však potřeba vyrobit kanály užší (šířka  $\sim 10^1 \mu\text{m}$ ), kdy takto vyrobená zařízení lze využít např. ke studiu systému elektrolytická dioda, nebo jako model jednotlivého póru v membráně apod. Snížení charakteristických rozměrů mikrokanálů o řád přináší řadu komplikací při výrobě mikrozařízení. Některé metody jsou již za limitem použitelnosti (mechanické mikroobrábění), další vyžadují úpravy a velmi pečlivé provedení (např. tepelné slinování). V rámci této práce byly studovány nové možnosti výroby úzkých mikrokanálů a jsou popsány a diskutovány jeho jednotlivé kroky. Zde navržený postup využívá UV litografie, mikrostrukturální leptání kovového substrátu, které využívá řízení reakce díky polo vsádkovému systému, vtačování za tepla a tepelné slinování.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

# **Sorpce a difúze v polymerech měřená na základě dynamiky tlakové odezvy**

Autor: Petr Matuška  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Josef Chmelař

Sorpce a difúze v polymerech jsou procesy s velkým významem pro výrobu polymerů a jejich aplikace. V rámci této práce byla zásadně přestavěna a otestována aparatura pro měření dynamiky tlakové odezvy („pressure-decay“), která je vhodná pro měření difúzních koeficientů a sorpčních rovnováh nízkomolekulárních látek v polymerech. Kromě popisu nové konstrukce aparatury bude též představena metodika pro vyhodnocování rovnovážných naměřených dat. Aparatura „pressure-decay“ je vhodná pro vzorky ve formě částic i filmů a je schopna měřit do teplot 200°C a tlaků 3 MPa. Díky vysoké maximální teplotě je možné měřit též děje probíhající v polymerních taveninách. Tato data jsou využívána k určení binárních interakčních parametrů pro stavovou rovnici PC-SAFT (Perturbed-chain statistical associating fluid theory). Z měření dynamiky tlakové odezvy lze také vyhodnocovat základní morfologické parametry porézních částic polyolefinů a zkoumat mechanismy difúze v semi-krytalických polymerech.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

## **Příprava a charakterizace nanopěn**

Autor: Andra Nistor  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Juraj Kosek, Klára Smolná

Nanopěny jsou polymerní pěny s velikostí buněk 10 – 500 nm a s celkovou porozitou nad 90%. Díky své struktuře nabízejí oproti standardním polymerním materiálům vynikající dielektrické, tepelné, zvukové a rázové izolační vlastnosti. Tím se nanopěnám otevírají možnosti využití nejen ve stavebnictví a v automobilovém průmyslu, ale i v dalších průmyslových odvětvích. V rámci příspěvku nejdříve vysvětlíme, jaké typy struktur umožní dosáhnout zlepšení izolačních vlastností, a poté diskutujeme různé způsoby přípravy požadovaných struktur. Příprava nanopěn je stále ve fázi výzkumu. Cílem této práce je navázat na znalosti získané v literatuře, zvolit vhodnou průmyslově aplikovatelnou metodu a sestavit aparaturu pro přípravu nanopěn. Zároveň se tato práce zabývá možnostmi charakterizace morfologie nanopěn pomocí rentgenové mikro-tomografie ( $\mu$ -CT) a mikroskopie atomárních sil (AFM).

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

## **Měření objemového koeficientu přestupu hmoty v plynné fázi na strukturovaných výplních při absorpci**

Autor: Pavel Roder  
Ročník: M2  
Ústav: Chemického inženýrství

Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, Ph.D.

Cílem práce bylo změření objemového koeficientu přestupu hmoty ( $k_G a$ ) na strukturovaných výplních při absorpci  $\text{SO}_2$  ze vzdušiny do roztoku  $\text{NaOH}$ . Měření bylo provedeno na výplních Mellapak M250Y od firmy Sulzer a RSP250 od firmy Raschig s geometrickou plochou  $250\text{m}^2/\text{m}^3$ . Pro dané výplně byly změřeny hydraulická data a v závislosti na transportních charakteristikách bylo provedeno porovnání výplní z procesního hlediska. Koncentrace  $\text{SO}_2$  byly měřeny na IR spektrometru Sick S710 na rozsahu 5 – 3000ppm s relativní přesností 3%. Byl vyhodnocen vliv průtoků kapalné fáze v rozsahu  $B = 5\text{--}80\text{ l/min}$  a průtoků plynné fáze v rozsahu  $u_G = 0,5\text{--}2,0\text{ m.s}^{-1}$  na objemový koeficient přestupu hmoty  $k_G a$ . Průtoky fází byly voleny tak, aby byly splněny podmínky, při kterých běžně probíhají absorpce i destilace.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

## **Recording and processing of oxygen probes' signal**

Autor: Martin Skala

Ročník: B2

Ústav: Ústav chemického inženýrství

Školitel: doc. Dr. Ing. Moucha Tomáš

The work modernises the experimental technique of measuring of the volumetric mass transfer coefficient between gaseous and liquid phase in a pilot-plant fermentor. In this case the measuring of oxygen concentration in liquid phase is recorded by using oxygen probes. Particular contribution of this work is the development of software on Control Web 2000 platform. This software allows to read and to process the signal of oxygen probes. The probe signal is led through an A/D convertor and then saved in a PC. Recorded data are used for calculation of parameters of observed process e.g. the time constant of transient characteristics of probe or the mass transfer coefficient.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

## **Srovnávací studie vlivu metody přípravy lipozomů na stabilitu a kinetiku vylučování enkapsulované látky**

Autor: Martin Štěrbák

Ročník: B3

Ústav: chemického inženýrství

Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Lipozomy jsou duté částice, zpravidla o velikosti 30 nm – 5 $\mu\text{m}$ , tvořené fosfolipidovou dvojrůstvou, jejichž použití spočívá v (cílené) dopravě a uvolňování enkapsulované látky. Existuje mnoho metod přípravy lipozomů, přičemž vlastnosti výsledné částice mohou být ovlivněny zvolenou metodou přípravy. Cílem práce je porovnat vybrané metody z hlediska výsledné velikosti, distribuce a stability připravených částic a účinnosti enkapsulace modelové látky. Zde použité lipozomy byly připraveny z dipalmitoylfosfatidylcholinu pomocí Banghamovy a Mozafariho metody. Banghamova metoda spočívá v přípravě tenkého fosfolipidového filmu, který je následně hydratován, což vede ke vzniku lipozomů. Mozafariho metoda využívá ke tvorbě částic hydratace fosfolipidů v roztoku glycerolu za zvýšené teploty. K homogenizaci a zvýšení účinnosti enkapsulace je v obou metodách používána extruze. Byl sledován vliv počtu extruzních cyklů na střední velikost a distribuci částic za použití

dynamického rozptylu světla. Do lipozomů byla enkapsulována modelová látka 5(6)-karboxyfluorescein. Byla porovnána účinnost enkapsulace částic připravených výše uvedenými metodami. Následně byla studována kinetika vylučování při různých teplotách a dlouhodobá stabilita připravených částic.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

## **Ověření vhodnosti rozšíření korelace pro výpočet objemového koeficientu přestupu hmoty v aerované míchané nádobě pro zvětšování měřítka**

Autor: Radek Vostal  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Doc. Dr. Ing. Tomáš moucha

Cílem práce bylo ověřit vhodnost rozšíření klasické korelace pro výpočet objemového koeficientu přestupu hmoty  $kLa$  v aerované míchané nádobě pro zvětšování měřítka. Byla zde zpracována měření z poloprovozní nádoby o vnitřním průměru 0,59 m a z laboratorní nádoby o vnitřním průměru 0,29 m. Obě měření byla provedena pro míchadla se šikmými lopatkami 45°, s čerpacím účinkem nahoru (PBU), dolů (PBD), pro míchadlo Lightnin (LTN) a pro míchadlo Techmix s čerpacím účinkem nahoru (TXU). Postup byl následující:

Získané hodnoty  $kLa$  z nádob obou velikostí byly korelovány v závislosti na postupné rychlosti aeračního plynu a celkové energii disipované ve vsádce. Ověřovaný způsob popisu obou souborů dat spočíval v rozšíření původní rovnice o člen zahrnující závislost na velikosti zařízení a sice člen úměrný obvodové rychlosti lopatek. Jako měřítko přiléhavosti korelací byla vzata směrodatná relativní odchylka dat vypočtených od dat naměřených a upravený korelační koeficient.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

## **Charakteristiky redoxní průtočné baterie**

Autor: Jiří Vrána  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Marek Bobák, Ph.D., Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Zvyšující se produkce elektrické energie z obnovitelných zdrojů, snaha o efektivnější využití stávajících elektrických přenosových soustav a požadavky koncových zákazníků na kvalitu a stabilitu dodávek elektrické energie jsou pravděpodobně jedny z hlavních důvodů zvyšující se poptávky po spolehlivých systémech pro ukládání elektrické energie ve stacionárních úložištích. Jako jeden z vhodných systémů, který umožňuje účinné ukládání a následné uvolňování elektrické energie se jeví redoxní průtočná baterie. Podstatou funkce systému je vratná oxidace a redukce probíhající ve dvou elektrolytech oddělených iontovým spojením, které zajišťuje iontově propustná membrána. Jedním z typů redoxních průtočných baterií je vanadová redoxní baterie, kde jsou reagujícími iontovými páry kationty  $VO_2^+/VO^{2+}$  a  $V^{3+}/V^{2+}$ . V této práci se zabýváme sestavením vanadové průtočné baterie a přípravou elektrolytů z oxidu vanadičného. Vhodným uspořádáním součástí baterie (objem elektrolytů, koncentrace reagujících iontů, plocha baterie, počet článků a průtok elektrolytů) lze docílit

požadovaných parametrů (množství uložené energie, výkon, napětí) daného stacionárního energetického úložiště. Byly proměřeny a interpretovány základní charakteristiky sestavené baterie.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 3

## **Příprava tenkých vrstev elektrorozprašováním pro aplikace v energetice**

Autor: Karel Zuček  
Ročník: M1  
Ústav: Chemického inženýrství  
Školitel: Doc. Ing. Juraj Kosek, Ing. Jiří Maršálek

Elektrozprašování se nedávno vyvinulo v jednu z konkurenceschopných metod k přípravě a současné depozici nanočástic a nanostrukturovaných vrstev. Tyto materiály mohou mít výjimečné vlastnosti, které nacházejí uplatnění v různých oblastech jako např. energetika, katalýza, medicína,... Efektivní výroba těchto materiálů je ovšem klíčová pro jejich široké praktické využití. Metoda elektrorozprašování skýtá několik výhod. Investiční i provozní náklady jsou velmi nízké, nanášení vrstev je dostatečně rychlé a zvýšení produkce může být jednoduše realizováno paralelizací procesu. V naší výzkumné skupině bylo nedávno navrženo a zkonstruováno takovéto elektrorozprašovací zařízení. Cílem této práce bylo připravit vybrané anorganické nanostrukturované vrstvy a diskutovat možné aplikace v energetice. Energetickými aplikacemi máme na mysli jak získávání, tak ukládání energie.