

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Datum a místo konání: 23.11. 2012 v 9:00 v posluchárně BIII

Počet účastníků: 7

9:00	Březina Jan	Stanovení NO a NO₂ při emisních testech osobních automobilů na vozidlovém dynamometru
9:20	Ferkl Pavel	Modelování pro optimalizaci morfologie tepelně-izolačních materiálů nové generace
9:40	Helebrantová Lucie	Tvorba a využití simulačních modelů separačních jednotek v rafinérských provozech
10:00	Leskovjan Martin	3D modelování katalytických reaktorů pro konverzi automobilových výfukových plynů
10:20		<i>přestávka</i>
10:40	Seifert Michal	Studium adheze bubliny za stacionárních podmínek
11:00	Skala Martin	Optimalizace výkonu chladičího bubnu
11:20	Šafránek Jaroslav	Návrh adsorpčního zařízení pro odstraňování nečistot z procesní vody

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Stanovení NO a NO₂ při emisních testech osobních automobilů na vozidlovém dynamometru

Autor: Březina Jan
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Cílem této práce je ověření stanovitelnosti škodlivých emisí NO a NO₂ při použití současné metodiky a instrumentace emisních testů osobních automobilů. Teoreticky získané výpočty jsou porovnány s experimentálními daty, získanými v Emisní laboratoři ŠKODA AUTO a.s. První část práce je zaměřená na sestavení jednoduchého modelu pro teoretický výpočet rychlosti homogenní oxidace NO na základě kinetických dat z odborné literatury. Posouzení vlivu této reakce na stanovení NO₂ při emisních testech a určení problematických míst měřícího systému z hlediska stanovení koncentrace NO₂. Druhá část práce se zabývá ověřením získaných výsledků z první teoretické části pomocí syntetické směsi NO+O₂/vzduch a reálného výfukového plynu.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování pro optimalizaci morfologie tepelně-izolačních materiálů nové generace

Autor: Pavel Ferkl
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Richard Pokorný, Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Zbytečným nákladům na vytápění budov lze předejít použitím vhodných tepelně-izolačních materiálů. Tyto bývají nejčastěji vyrobené z polymerních pěn, obvykle na bázi polystyrenu nebo polyuretanu. Optimalizace izolačních vlastností polymerních pěn je ekonomicky výhodná jak pro výrobce izolačních materiálů – pro produkci shodně izolující pěny je potřebné menší množství materiálu, tak pro konečné zákazníky – nižší pořizovací cena izolačních materiálů, případně vyšší úspory tepla při stejné pořizovací ceně. Ukazuje se, že výrazným milníkem v této oblasti může být výroba tzv. nanopěn, jejichž vnitřní struktura je tvořena buňkami o velikosti do 1 μm. Takové pěny výrazně potlačují oba základní způsoby přenosu tepla, které se v polymerních pěnách uplatňují, tedy tepelné vedení (kondukcí) i sálání (radiací). S ohledem na tyto jevy je nutné v pěně optimalizovat velikost buněk, jejich tvar, porozitu, distribuci pevné fáze, volbu materiálů atd. Za tímto účelem jsou v této práci vyvíjeny a aplikovány nové modely popisující kombinované sdílení tepla vedením a sáláním v prostorově 3D heterofázových systémech.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství.

Tvorba a využití simulačních modelů separačních jednotek v rafinérských provozech

Autor: Lucie Helebrantová
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc.RNDr. Tomáš Vaněk, CSc.

V současné době roste v celém Iráku poptávka po ropných produktech, zejména po benzínech a motorové naftě. S ohledem na tuto skutečnost rafinérie Salahuddin I&II v Baiji reflektují navýšením kapacity zpracovávané ropy na 130% designované kapacity, a to tak, aby se minimalizovaly investiční náklady na potřebnou rekonstrukci. Než se k této rekonstrukci přistoupí, je třeba vypracovat studii, která bude jasně vytyčovat možnosti navýšení kapacity a v neposlední řadě zhodnocení těchto možností, a to jak z technické, tak i ekonomické stránky. Tato práce se zabývá především tvorbou simulačního modelu v programu Aspen HYSYS, a to konkrétně jednoho z důležitých provozních souborů – jednotky atmosférické destilace a redestilace. Tento model bude v budoucnu využit k provedení potřebných analýz pro navýšení kapacity rafinérií a identifikaci případných „úzkých profilů“. Práce je zpracována ve spolupráci s firmou TECHNOEXPORT, a.s.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

3D modelování katalytických reaktorů pro konverzi automobilových výfukových plynů

Autor: Martin Leskovjan
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V moderních automobilech jsou z důvodu lepšího průběhu teplot katalyzátory umísťovány blíže k motoru, avšak kvůli nedostatku místa a poměrně ostrým ohybům na výfukovém potrubí dochází často k nerovnoměrné distribuci plynů na vstupu do monolitu. V těchto případech nepopisuje 1D model reálný systém s dostatečnou přesností a je potřeba využít komplexnějšího přístupu. Práce se zabývá vlivem geometrie potrubí před monolitickým katalyzátorem na jeho funkci. Jako modelový případ je studován katalyzátor s periodickou adsorpcí a redukcí NO_x (NSRC). Simulace jsou prováděny v prostředí 3D-CFD softwaru, který je přes rozhraní propojen s 1D modelem kanálku naprogramovaným ve Fortranu a zkompilem do podoby knihovny. V rámci této práce byl sledován dynamický vývoj rychlostních, teplotních a koncentračních profilů během periodického přepínání mezi chudou a bohatou směsí (fáze adsorpce a fáze redukce NO_x). Ukazuje se, že potrubí s ohybem 90° před vstupem do katalyzátoru vede ke značně nerovnoměrnému rozdělení toku a mezi jednotlivými kanálky monolitu mohou být velké rozdíly. To může komplikovat i řízení regenerace katalyzátoru.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Studium adheze bubliny za stacionárních podmínek

Autor: Michal Seifert
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Adheze bubliny na povrch pevné částice je děj, ke kterému dochází běžně v přírodě i v mnoha průmyslových aplikacích. Příkladem mohou být vícefázové reaktory, probublávané kolony nebo separátory pracující na principu flotace. Při adhezi bubliny nejprve dochází k přetržení tenkého kapalného filmu mezi bublinou a částicí, poté se vytváří třífázové rozhraní (TPC). Mezi klíčové parametry popisující tvar bubliny přisedající na povrch pevné částice patří průměr TPC, rychlost posunu TPC a smáčecí úhel bubliny. Vzhledem k značné dynamice děje se pro sledování adheze bubliny používají vysokorychlostní kamery. Cílem této práce je vytvoření metodiky pro studium adheze stacionární bubliny na horizontální povrch pevné částice. Experimentální zařízení je uspořádáno tak, aby byl eliminován vliv kinetické energie bubliny při jejím volném pohybu kapalinou. Pro popis adheze bubliny byl vytvořen nový software v prostředí MATLAB, který z nasnímaných obrazových dat měří průměr třífázového rozhraní a kontaktní úhly. Výsledky práce by měly přispět k lepšímu popisu vícefázových toků a interakcí bublin a částic.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Optimalizace výkonu chladicího bubnu

Autor: Martin Skala
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Práce je řešením dílčího problému při sestavování celkového modelu procesu: průchod materiálu chladicím bubnem. Jedná se o vytvoření modelu pohybu sypkého materiálu v chladicím bubnu (bubnové sušárně) se zvedací vestavbou ve směru kolmém na postup materiálu bubnem. Model umožňuje vyšetření vlivů geometrie, rozměru a počtu kapes na výkon bubnu. Dále model pracuje i s celkovou zádrží, což dovoluje určit nejen optimální návrh z pohledu požadovaného maximálního zatížení ale i posouzení změny chladicího výkonu při zatížení nižším.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Návrh adsorpčního zařízení pro odstraňování nečistot z procesní vody

Autor: Jaroslav Šafránek
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, Ph.D.

Náplní této práce je sestavit model adsorpční kolony, která bude sloužit k odstraňování stopových nečistot z procesní vody vznikajících v technologii sloužící k měření transportních charakteristik výplní adsorpčních a desorpčních kolon. Pro model kolony je důležité stanovení adsorpční izotermy, která vyjadřuje rovnováhu mezi adsorbovaným a volným adsorbátem. Pro účely našeho modelu je použita Freundlichova adsorpční izoterma. Dále je nutné znát transportní charakteristiky, které byly v této práci podobně jako konstanty Freundlichovy izotermy odhadnuty na základě literárních dat. Cílem práce je návrh vhodných parametrů kolony (výška a průměr lože). Jako adsorbent je použito zrněné aktivní uhlí Silcarbon K835. Tento návrh bude proveden na základě výsledků simulací jejího chování při adsorpci polutantu a regeneraci adsorbentu horkou vodou.

Sekce: *Procesní a chemické inženýrství 1*

Datum a místo konání: 23.11. 2012 v 9:00 v posluchárně B139

Počet účastníků: 8

9:00	Gorný Damian	Použití tiskové hlavy jako nástroje pro produkci mikročastic a jejich aplikace
9:20	Jakubec Martin	Příprava mikročastic s hydrofobním jádrem pomocí rozprašovacího sušení s třífázovou tryskou
9:40	Jankuj Petr	Biodegradace textilních barviv s využitím imobilizované houby <i>Irpex lacteus</i> v probublávaném bioreaktoru
10:00	Kohoutová Štěpánka	Korelace objemového koeficientu přestupu hmoty ve fermentorech
10:20		<i>přestávka</i>
10:40	Navrátil Vít	Optimalizace výroby kovových mikrostruktur
11:00	Novák Matěj	Výzkum nebiologické chemotaxe pro využití v mikro a nanochemii
11:20	Šnajdr Ivo	Studium elektrod pro sekundární baterie zinek-vzduch
11:40	Vrána Jiří	Příprava a studium vlastností elektrolytu pro vanadovou redoxní baterii

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Použití tiskové hlavy jako nástroje pro produkci mikročastic a jejich aplikace

Autor: Damian Gorný
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Cíl práce spočívá v přípravě alginátových mikročastic pomocí technologie ink-jet, tedy za použití tiskové hlavy schopné s vysokou frekvencí generovat mikroskopické kapičky konzistentní velikosti. Alginát je želírující látka, která se používá především v potravinářském průmyslu, avšak v našem případě slouží jako matice pro imobilizaci vnitřních komponent tzv. chemických robotů. Pro přípravu mikročastic byly použity tiskové hlavy o průměru kapiláry 80 a 30 μm . Bylo zjištěno, že nejvýraznější vliv na velikost připravovaných částic mají tlak v zásobníku tištěné tekutiny a napětí přivedené na piezoelektrický element v tiskové hlavě. Další důležitý parametr je viskozita tištěné kapaliny. V našem případě musí být vzorky pro větší hlavu do viskozity 75 mPa.s a 20 mPa.s pro menší. Pro tiskovou hlavu s průměrem 30 μm je alginát upravován pomocí TiO_2 fotokatalyzátoru pod UV lampou z důvodu snížení viskozity vzorku tím, že zkrátíme délku polymerního řetězce. Připravené částice mohou obsahovat též imobilizované kvasinky, lipozomy a nanočástice železa a SiO_2 , které jsou uzavřeny v alginátu vápenatém a poskytují mu dodatečné funkční vlastnosti využitelné např. v cíleném uvolňování léčiv či dekontaminaci těžko dostupných prostředí.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Příprava mikročastic s hydrofobním jádrem pomocí rozprašovacího sušení s třífázovou tryskou

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

Celá řada potravinářsky či farmaceuticky významných látek (např. aroma, enzymy, léčiva či vitaminy) má hydrofobní charakter a je s vodou téměř nebo zcela nemísitelná. Často je však žádoucí tyto látky dopravit na místo jejich určení skrze vodné prostředí. Cílem této práce je výše zmíněný typ látek enkapsulovat do hydrofilních polymerních nosičů, které by byly schopny je cíleně dopravit a vyloučit na určené místo. Za tímto účelem byly pomocí rozprašovacího sušení a inovativní třífázové trysky připraveny mikročástice s hydrofobním jádrem (emulze typu o/w obsahující enkapsulovanou látku) a hydrofilní polymerní slupkou (přírodní polymer chitosan), a byl studován vliv parametrů přípravy částic na jejich vlastnosti (velikost, struktura, složení). Struktura částic byla studována pomocí 3D fluorescenční konfokální mikroskopie, rozložení velikosti částic pomocí laserové granulometrie a složení částic pomocí FT-IR spektroskopie. Kinetika vylučování enkapsulované látky z nosičů byla studována pomocí uv-vis spektroskopie jako příprava pro budoucí *in vivo* aplikace.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Biodegradace textilních barviv s využitím imobilizované houby *IrpeX lacteus* v probublávaném bioreaktoru

Autor: Petr Jankuj
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Pavel Hasal, CSc.

Textilní průmysl v současné době produkuje velké množství odpadních vod, vznikajících především při procesu barvení tkanin. Tyto odpadní vody obsahují kromě velkého množství anorganických solí také mnoho barevných sloučenin. Současně používané procesy degradace barviv jsou ekonomicky značně nákladné a proto se hledají nové způsoby jejich rozkladu. Jednou z možností je využití mikroorganismů produkujících enzymy, které proces biodegradace značně usnadňují. Práce se zabývá konstrukcí probublávaného bioreaktoru pro imobilizaci houby *IrpeX lacteus*. Základem bioreaktoru byla cylindrická nádoba se středovou konstrukcí pro upevnění výplně sloužící k imobilizaci mikroorganismu. Reaktor byl navržen pro vsádkový režim, lze ho však snadno upravit i pro režim kontinuální. Po změření vybraných charakteristik reaktoru, jako je zádrž plynu nebo tlakové ztráta, bylo provedeno měření biodegradace barviva. Proces byl proveden vsádkově s využitím barviva. Reaktivní oranž 16. Následně byl použit i reálný vzorek odpadní vody z textilního průmyslu. Při měření stupně odbarvení barviv byla regulátorem udržována konstantní hodnota pH a byla sledována aktivita enzymů lakázy, manganperoxidázy a ligninperoxidázy, které se účastní biodegradace barviv.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Korelace objemového koeficientu přestupu hmoty ve fermentorech

Autor: Štěpánka Kohoutová
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Téma práce spadá do rámce výzkumu závislosti transportních charakteristik v mechanicky míchaných aerovaných nádobách na jejich měřítku. Pozornost je zaměřena na objemový koeficient přestupu hmoty mezi plynem a kapalinou - kLa . Dosud byla zpracována data z měření v nádobách laboratorního měřítka, kde byly použity různé typy míchadel, a data z měření v nádobě poloprovozního měřítka, kde byly použity Rustonovy turbíny. Cílem této práce je zpracovat transportní charakteristiky měřené v poslední době v poloprovozní nádobě s dalšími typy míchadel. Porovnáím s daty měřenými dříve v laboratorním měřítku bude popsána závislost těchto charakteristik na velikosti zařízení. Budou prezentována data pro míchadla: Rustonova turbína, Techmix-up, Techmix-down, Lightning a Pitched blade-down. Části názvů míchadel "up" a "down" znamenají míchadla s čerpacím účinkem směrem vzhůru a dolů.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Optimalizace výroby kovových mikrostruktur

Autor: Vít Navrátil
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jaroslav Kotowski

Cílem práce je optimalizace pracovního postupu výroby kovových mikrostruktur, které jsou následně používány jako razítka. Základní materiály při výrobě razítka jsou Polymethylmethakrylát (PMMA), fotorezist SU8 a polydimethylsiloxan (PDMS). PDMS je elastomer, který je často používán pro výrobu mikrofluidních struktur, z důvodu nízkých nákladů na výrobu a snadné a jednoduché manipulace. Mikrostruktury vytvořené ve fotorezistu SU8 jsou přeneseny do PDMS pomocí metody zvané dvojí odlévání (double-casting). Po závěrečném přenesení struktur do PMMA, jsou takto vzniklé struktury pokoveny kombinací naprašování a elektrodepozicí. Výsledkem tohoto postupu je razítka, které se používá při výrobě mikrofluidních struktur. Cílem práce je optimalizace daného postupu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Výzkum nebiologické chemotaxe pro využití v mikro a nanochemii

Autor: Matěj Novák
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Chemotaxe je definována jako orientovaný pohyb objektu podél chemického gradientu. Podobně jako zvířata, která dokážou pomocí čichu určit rostoucí koncentraci některých látek ve vzduchu a lokalizovat tím zdroj potravy, mají například i mikroorganismy své způsoby, jak se pohybovat v okolí za účelem získání živin, úniku před hrozbou nebo splnění určitého úkolu. Principy, podle kterých chemotaxe probíhá, jsou různé a dají se využít při přepravě uměle vytvořených mikro- a nanočástic. Cílem naší práce je prozkoumat tyto procesy a využít je k efektivnímu transportu látek do míst, kde provedou cílový úkol nebo například změni svou strukturu. Námi zkoumaný mechanismus je pohánění částic nebo kapek ke kyselému pH pomocí gradientu povrchového napětí podél částice. Byl pozorován orientovaný pohyb kapek obsahujících kyselinu 2-hexyl dekanovou v mikrofluidních kanálcích s různou geometrií a jejich shlukování na volných plochách. Do kapek byl dále přidáván chitosan, který se vysráží v zásaditém prostředí a v kyselém se rozpustí a uvolní enkapsulované látky (schopnost vylučovat látky z chitosanu v závislosti na pH byla ověřena na uv/vis spektrofotometru). Praktické využití studia chemotaxe tohoto typu je např. při čištění těžko dostupných míst, kdy jsou kapky schopny samy vyhledat cílovou lokalitu a tam řízeně vyloučit aktivní látku.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Studium elektrod pro sekundární baterie zinek-vzduch

Autor: Ivo Šnajdr
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D., Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Primární baterie zinek-vzduch se používají již od roku 1970 jako levný zdroj energie s vysokou energetickou hustotou. Bateriový článek zinek-vzduch je založen na vratné reakci kovového zinku s kyslíkem za vzniku oxidu zinečnatého ZnO. Použití zinko-vzduchové baterie jako sekundárního článku je limitováno zejména vysokými přepětími na vzduchové elektrodě, které vedou ke snížení energetické účinnosti, a také problémy na zinkové elektrodě: evolucí vodíku (na úkor tvorby zinku), růstem dendritů (vedoucím až ke zničení článku) a vodíkovou korozí. Funkční sekundární baterie zinek-vzduch by mohla najít uplatnění v mnoha oborech, například v informačních a komunikačních technologiích a v automobilovém průmyslu. Cílem této práce je nalézt řešení problémů spojených právě se zinkovou elektrodou. Jednou z cest je použití příměsí hydroxidu kovů II.A skupiny (Mg, Ca, Ba), které jsou schopny vytvářet zinečnatany. V případě přítomnosti některého z těchto hydroxidů dochází k polapení $Zn(OH)_4^{2-}$, vznikající při vybíjení, do jeho struktury za vzniku příslušného zinečnatanu, který je méně rozpustný v elektrolytu než ZnO, a tím k účinnému zabránění migrace zinečnatých iontů. Sekundární baterie je charakterizována metodou cyklické voltametrie.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Příprava a studium vlastností elektrolytu pro vanadovou redoxní baterii

Autor: Jiří Vrána
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Klára Smolná, Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D., Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Celosvětovým trendem posledních let v energetice je prudký růst produkce elektřiny z obnovitelných zdrojů a podpora energetické koncepce vedoucí k účinnější distribuci elektřiny (např. tzv. chytré sítě). Oboje je úzce spojeno s vývojem nových zařízení pro lokální ukládání elektrické energie. Nová úložiště elektrické energie jsou rovněž důležitá pro zajištění kvality a stability dodávek elektřiny koncovým zákazníkům. Vanadová redoxní průtočná baterie (VRPB) je jedním z vhodných systémů pro stacionární ukládání energie. Mezi výhody tohoto konceptu patří zejména kapacita regulovatelná objemem elektrolytů, vysoká účinnost ukládání energie a velmi rychlá doba náběhu. Koncept VRPB byl úspěšně ověřen v naší laboratoři. Byla sestavena a otestována funkčnost pětičlánekové baterie. Dalším krokem při vývoji zařízení je návrh dostatečně účinného a ekonomicky výhodného postupu pro přípravu elektrolytu. Cílem této práce je návrh, sestavení a otestování několika možných zařízení pro přípravu elektrolytu z oxidu vanadičného. Jako velice výhodným řešením se jeví membránový elektrolyzátor, který kromě kontinuální přípravy elektrolytu umožňuje vyrovnávat stav nabití provozních elektrolytů. Vlastnosti připravených elektrolytů byly studovány pomocí spektroskopie ve viditelné oblasti a cyklické voltametrie.

Sekce: *Procesní a chemické inženýrství 2*

Datum a místo konání: 23.11. 2012 v 9:00 v posluchárně B141b

Počet účastníků: 7

9:00	Arvajová Adéla	Reakce CO, uhlovodíků a NO _x na oxidačním katalyzátoru automobilových výfukových plynů
9:20	Dundálek Jan	Příprava a charakterizace bifunkčních vzduchových elektrod
9:40	Isoz Martin	Experimentální studie toku kapaliny po nakloněné desce
10:00	Matuška Petr	Difúze v polymerech měřená na základě dynamiky tlakové odezvy
10:20		<i>přestávka</i>
10:40	Rygl Adam	Příprava mikrocelulárních polymerních pěn pomocí vysokotlakého CO ₂
11:00	Sládek Viktor	Povrchová úprava alginátových částic a studium jejich vlastností
11:20	Smrčka David	Studium kinetiky reaktivní granulace pro výrobu detergentů

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Reakce CO, uhlovodíků a NO_x na oxidačním katalyzátoru automobilových výfukových plynů

Autor: Adéla Arvajová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

U klasických benzínových motorů dochází k oxidaci CO a nespálených uhlovodíků (HC) a současně redukci oxidů dusíku (NO_x) na trojcestném katalyzátoru. To je možné pouze díky udržování vyváženého stechiometrického poměru vzduch:palivo. Vznětové (dieselové) motory spalují palivo za přísunu většího množství vzduchu (chudá směs), což vede k nižší spotřebě paliva, ale na druhé straně vzniká problém s nedostatečnou redukcí NO_x. V přebytku kyslíku pak funguje běžný katalyzátor pouze jako oxidační. V rozmezí teplot 150-300°C sice může v závislosti na aktuálních koncentracích CO a HC docházet k částečné redukci NO_x, ale produktem této neúplné redukce bývá často N₂O. Tato práce zkoumá dosahované konverze CO, HC a NO_x a selektivitu redukce NO_x na oxidačním katalyzátoru v závislosti na teplotě a složení směsi. V laboratorním reaktoru je provedena řada pomalých teplotních ramp pro různá složení vstupního plynu, při kterých se sledují výstupní koncentrace NO, NO₂, N₂O, CO, HC. Z těchto dat je pak vyhodnocena kinetika jednotlivých reakcí a vzájemné inhibiční efekty, které ovlivňují zapálení. Ukazuje se, že rozsah redukce NO_x silně závisí zejména na koncentraci HC a redukce pomocí CO prakticky neprobíhá. Pro simulaci reaktoru je použit 1D heterogenní model s pístovým tokem a pro vyhodnocení kinetických parametrů simplexová optimalizační metoda.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Příprava a charakterizace bifunkčních vzduchových elektrod

Autor: Jan Dundálek
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Josef Chmelař, Ing. Jaromír Pociďič, Ph.D., doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Nové výrobky a inovace v oblasti přenosné elektroniky (notebooků, mobilních telefonů, atd.) a elektromobilů během posledních let kladou stále větší nároky na používaná mobilní úložiště energie, kterými jsou nejčastěji elektrochemické články mající vysokou specifickou energii (Wh/kg) a dostatečný specifický výkon (W/kg). Alternativou k dnes nejpoužívanějším NiMH či Li-Ion akumulátorům by mohly být baterie s otevřenou strukturou, jež jsou schopny konkurovat ať již cenou základních materiálů tak vysokou specifickou energií. Tato zařízení jsou schopna uložit větší množství energie vztažené na jejich hmotnost díky tomu, že jeden z elektrodových materiálů není obsažen přímo v baterii. Příkladem jsou zinko-vzduchové články, kde v alkalickém prostředí dochází k oxidaci zinku vzdušným kyslíkem. Pro sekundární zinko-vzduchové baterie je potřeba bifunkčních vzduchových elektrod, které pomocí vhodného katalyzátoru umožňují redukci kyslíku při vybíjení a jeho zpětné uvolňování při nabíjení. Cílem práce je návrh a příprava bifunkčních vzduchových elektrod na základě vypracované literární rešerše a jejich následná charakterizace pomocí vhodných elektrochemických metod.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Experimentální studie toku kapaliny po nakloněné desce

Autor: Martin Isoz
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, Ph.D.

Pro pochopení procesů sdílení hmoty v plněných kolonách je nutné porozumět hydrodynamice toku kapaliny po výplních. Moderní strukturovaná výplň je však systémem stále ještě příliš komplikovaným na to, aby bylo možné jej použít přímo. V práci proto bylo provedeno zjednodušení problému až na úroveň filmového toku kapaliny po hladké skloněné desce. Dále byl studován speciální případ toku, tok typu potůček. Cílem práce bylo změřit velikost mezifázové plochy (l) – (g) pro tento případ toku, pro různé kapaliny a úhly sklonění desky. Byl sepsán program umožňující automatické vyhodnocení experimentálních dat a studovány vlivy různých faktorů, zejména úhlu sklonění desky, povrchového napětí, viskozity a objemového toku kapaliny na velikost měřené plochy mezifázového rozhraní.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Difúze v polymerech měřená na základě dynamiky tlakové odezvy

Autor: Petr Matuška
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Josef Chmelař, Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Difúze v polymerech je proces s velkým významem pro výrobu polymerů a jejich aplikace. V rámci této práce byla přestavěna a otestována aparatura pro měření dynamiky tlakové odezvy („pressure-decay“), která slouží k měření difúzních koeficientů nízkomolekulárních látek v polymerech. Kromě popisu nové konstrukce aparatury bude též představena metodika pro vyhodnocení naměřených difúzních dat a jejich teplotních závislostí. Aparatura „pressure-decay“ je vhodná pro vzorky ve formě 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. Z měření dynamiky tlakové odezvy lze také vyhodnocovat základní morfologické parametry porézních částic polyolefinů a zkoumat mechanismy difúze v semi-krytalických polymerech. Výsledky získané v rámci této práce byly též porovnány se staršími daty naměřenými pro jiný typ polyethylenu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Příprava mikrocelulárních polymerních pěn pomocí vysokotlakého CO₂

Autor: Adam Rygl
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Andra Nistor, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

V současnosti dostupné komerční polymerní pěny obsahují buňky o velikosti větší než 100 μm . Oproti tomu velikost buněk v mikro- (a nano-) celulárních pěnách je menší než 10 μm (respektive 100 nm). Jelikož zmenšením velikosti buněk pod 100 μm se rapidně snižuje tepelná vodivost pěny, nacházejí polymerní mikro- a nanopěny uplatnění hlavně jako tepelně izolační materiály, dále pak jako zvukové či dielektrické izolanty s malou spotřebou materiálu a mimořádnými mechanickými vlastnostmi oproti konvenčním pěnám. Tato práce se zabývá optimalizací vypěňovacího procesu s cílem připravit mikrocelulární pěny. Namísto běžně užívaných organických nadouvadel se pro přípravu mikro- a nanopěn používá oxid uhličitý, a to zpravidla v superkritickém stavu. Tato práce popisuje vyvinutou experimentální metodiku od přípravy polystyrenových filmů pomocí vytahování (tzv. dip coating) na aparatuře vlastní konstrukce, přes vypěňování v tlakové cele několika technikami (např. teplotně či tlakově inicializované vypěňování) až po charakterizaci morfologie především pomocí mikro-tomografie (mikro-CT).

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Povrchová úprava alginátových částic a studium jejich vlastností

Autor: Viktor Sládek
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Alginátové mikročástice lze použít jako reservoárů pro cílené doručování účinných látek, jako nosiče imobilizovaných enzymů či mikroorganismů, nebo jako „umělé buňky“ s vnitřní strukturou organel. Alginátový hydrogel sám o sobě však není dostatečně odolný vůči změnám v okolním prostředí (pH, teplota, atd.). Cílem práce proto bylo připravit mikročástice alginátu s povrchovou vrstvou oxidu křemičitého, která by zvýšila jejich stabilitu a umožnila další funkcionalizaci povrchu např. pro cílenou adhezi. Vrstva oxidu křemičitého byla připravena dvěma metodami - „sol-gel“ a „layer-by-layer“. Takto upravené částice byly charakterizovány konfokální a elektronovou mikroskopií, dále byla studována jejich stabilita v prostředích o různém pH, iontové síle a teplotě, a jejich mechanická odolnost. Důležitým parametrem je též rychlost difuze skrze vrstvu oxidu křemičitého a alginát. Vrstva oxidu křemičitého propůjčuje částicím schopnost ovlivňovat difusi a další vlastnosti pouze pasivně. Proto je naším dalším cílem schopnost aktivně ovlivňovat difusi, čehož se snažíme docílit zapojením responsivních polymerů (na změnu pH, teplotu, vlnovou délku světla, chemický signál) do uměle vytvořené struktury nanočástic oxidu křemičitého a polyelektrolytů. Do budoucna budeme dále upravovat částice ve směru specifického rozpoznávání a adsorpce.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Studium kinetiky reaktivní granulace pro výrobu detergentů

Autor: David Smrčka
Ročník: M2
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 práscích 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 platnost byla ověřena sérií experimentů. Kinetické experimenty byly rozšířeny o zkoumání kinetiky formování granulí v závislosti na velikosti primárních uhličitanových částic a době granulace. Prezentovány budou distribuce velikosti granulí v závislosti na výše zmíněných proměnných. Struktura částic byla zkoumána elektronovou mikroskopií a rentgenovou tomografií.

Sekce: *Procesní a chemické inženýrství 3*

Datum a místo konání: 23.11. 2012 v 9:00 v posluchárně B03

Počet účastníků: 8

9:00	Fojtíková Romana	Využití elektrosprejovacího procesu pro přípravu superkapacitorů
9:20	Hulík Radim	Dynamika a selektivita redukce NOx v automobilovém katalyzátoru typu NSRC
9:40	Macháč Václav	Konstrukce kolony se smáčenou stěnou
10:00	Pittermannová Anna	Specifická bioadheze modifikovaných silikových nanočástic
10:20		<i>přestávka</i>
10:40	Schneider Patrik	Experimentální studium měknutí polyethylenu
11:00	Šoltys Marek	Příprava dutých silikových nanočástic povrchově modifikovaných magnetitem
11:20	Václavík Marek	Příprava porézních polystyrenových mikročástic
11:40	Zíka Jan	Příprava a charakterizace tuhých lipidových nanočástic

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Využití elektrosprejovacího procesu pro přípravu superkapacitorů

Autor: Romana Fojtíková
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Maršálek, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Stále se zvyšující energetické nároky spojené s rychlým rozvojem elektrických zařízení (elektromobilů, mobilních telefonů atd.) jsou důvodem k poptávce po mobilních uložistích schopných dodávat vysoký výkon. Takovými uložisti mohou být též superkapacity. Tato zařízení se vyznačují vysokou specifickou kapacitou a krátkými, řádově sekundovými nabíjecími časy. Kapacita superkapacitorů je přímo úměrná měrnému povrchu elektrod, a proto jsme pro jejich přípravu zvolili metodu elektrorozprašování. Tato metoda umožňuje připravovat nanočástice různých oxidů kovů s velice úzkou distribucí jejich velikostí. Dávkováním roztoku prekursorů požadovaných nanočástic do kapiláry a následnou aplikací elektrického pole vysokého napětí je vytvořen sprej generující mikroskopické aerosolové částice, které se v důsledku působení elektrostatických sil dispergují až na nanočástice. Takto lze nanášet nanostrukturované vrstvy na různé substráty, v našem případě MnO₂ na hliníkovou fólii, jež slouží jako základní konstrukční prvek (elektroda) pro superkapacity. Provedli jsme charakterizaci připravených vrstev pomocí různých metod (cyklická voltametrie, Ramanova spektroskopie, ...). Naším cílem je další zvyšování námi dosažené specifické kapacity (100 F/g) a následný návrh výroby superkapacitorů pomocí paralelizace elektrosprejů.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Dynamika a selektivita redukce NO_x v automobilovém katalyzátoru typu NSRC

Autor: Radim Hulík
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Úsporné vznětové motory spalují palivo za přísunu většího množství kyslíku než motory zážehové. Nižší spotřeba paliva je však vykoupena problémem s emisemi oxidů dusíku (NO_x). Pro splnění nejpřísnějších emisních limitů a účinnou redukcí NO_x je nutné zařadit za standardní oxidační katalyzátor ještě speciální deNO_x katalyzátor. Tuto funkci může zastávat katalyzátor s ukládáním NO_x, jehož činnost spočívá v periodické adsorpci a následné rychlé redukci nahromaděných oxidů dusíku. Ta probíhá za přebytku redukčních činidel, čehož se dosahuje řízeným krátkodobým obohacením palivové směsi. Tato práce sleduje dynamický průběh výstupních koncentrací NO_x, NH₃ a N₂O za periodického provozu průmyslového katalyzátoru s ukládáním NO_x, a to při teplotách v rozmezí 150°C až 500°C za použití redukovadel CO, HC, H₂, a to jak samostatně, tak i ve směsi. Měření jsou prováděna v laboratorním reaktoru se syntetickými plyny. V závislosti na aktuálních provozních podmínkách jsou vyhodnoceny integrální konverze a selektivity redukce NO_x. Je diskutována dynamika výstupních koncentrací během bohaté fáze, kdy reaktorem postupuje redukční fronta a výstupní signál reaguje na změnu vstupu s podstatným zpožděním. Takto naměřené data mohou sloužit pro správné nastavení řídicí jednotky.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Konstrukce kolony se smáčenou stěnou

Autor: Václav Macháč
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. František Rejl, Ph.D.

Rektifikace je jeden z tradičních a nejrozšířenějších průmyslových separačních procesů. Moderní přístup k návrhu rektifikačních kolon představuje tzv. „rate-based“ modelování. Pro použití tohoto přístupu je nezbytně nutné znát hodnoty koeficientů přestupu hmoty. Jelikož přímé určení koeficientů přestupu hmoty při destilaci není možné, byla skupinou Sdílení hmoty na ÚCHI VŠCHT Praha vyvinuta tzv. „profilová metoda“ určování transportních koeficientů k_{Ga} a k_{La} . K ověření smysluplnosti koeficientů získaných profilovou metodou je nyní nutné porovnat výsledky získané při rektifikaci s výsledky získanými při absorpci ve stejném experimentálním zařízení. K tomuto účelu byla zvolena právě kolona se smáčenou stěnou, která má při použití různých systémů a pro různé průtoky stále stejnou mezifázovou plochu. Hlavní část kolony tvoří skleněná vertikální trubka o délce 1,4 m a vnitřním průměru 2,5 cm. Cílem této práce je navrhnout a otestovat distributor kapaliny, který vytvoří film o stejné intenzitě toku po celém vnitřním obvodu kolony. Správná funkce distributoru je nezbytným předpokladem k zajištění konstantní mezifázové plochy.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Specifická bioadheze modifikovaných silikových nanočástic

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

Pro použití kompozitních termoresponzivních mikročástic jako nosičů aktivních látek je důležité znát bioadhezní vlastnosti jejich povrchu, jenž je tvořen modifikovanými silikovými nanočásticemi. Z tohoto důvodu se zabývám zkoumáním specifické adheze silikových nanočástic. Silikové nanočástice byly připraveny pomocí Stöberovy metody. Aby je bylo možné sledovat konfokálním mikroskopem, byly obarveny fluorescenčním roztokem. Na povrch nanočástic byla následně navázána specifická a nespecifická protilátka. Adhezní vlastnosti byly zkoumány na speciálních podložních sklíčkách modifikovaných antigenem, jenž je komplementární ke specifické protilátce navázané na částicích. Interakce jednotlivých typů částic na podložní sklíčko s antigenem byla sledována v adhezní cele s dobře definovaným laminárním tokem vody. Procento částic přilnutých na antigen bylo vyhodnoceno z obrazu z konfokálního mikroskopu pomocí obrazové analýzy. Byly provedeny experimenty s nemodifikovanými nanočásticemi, s částicemi se specifickou protilátkou a s částicemi s nespecifickou protilátkou jako negativní kontrola. Byla proměřena závislost procenta navázaných částic na objemovém průtoku uvnitř adhezní cely, což umožnilo odhadnout adhezní sílu založenou na interakci antigen-protilátka.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Experimentální studium měknutí polyethylenu

Autor: Patrik Schneider
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Josef Chmelař, Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Měknutí polymerů je velmi významný problém při polymeracích v plynně-disperzních reaktorech. Měknutí posiluje tendence k aglomeraci a ulpívání částic ve fluidních reaktorech či odplynovacích věžích, což může vést až k odstavení celé výrobní linky a velkým ekonomickým ztrátám. Určení teploty měknutí je tudíž nezbytné pro průmyslovou výrobu. V této práci je teplota měknutí určována pomocí techniky laserové dilatometrie. Tato aparatura umožňuje studium měknutí nejen na vzduchu, ale též v organických atmosférách (ethylen, hexan) za tlaků až 30 bar. Využívána je též nukleární magnetické resonance (NMR), na které je pomocí experimentů Free induction decay (FID) a Hahn-Echo charakterizována pohyblivost řetězců. Na základě naměřených teplot měknutí studujeme vliv krystalinity polymerních vzorků, typu atmosféry a sorpce penetrantů. Pozorován je růst teploty měknutí s krystalinitou a její pokles vlivem sorpce (bobtnání), což je v souladu s teoretickými předpoklady. K interpretaci pozorovaných jevů přispívá též srovnání výsledků získaných z NMR experimentů a příslušných teplot měknutí.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Příprava dutých silikových nanočástic povrchově modifikovaných magnetitem

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

Cílem práce bylo připravit povrchově modifikované duté silikové nanočástice (100 – 500 nm) s oxidem železitým, které mohou sloužit jednak jako vnitřní zásobníky reaktantů v tělech chemických robotů, ale také jako autonomní nosiče pro enkapsulaci a cílené vylučování účinných látek. Porézní siliková stěna propůjčuje nanočásticím mechanickou odolnost a umožňuje regulovat rychlost difuze látek z a do vnitřního prostoru částice. Oxid železitý díky svým magnetickým vlastnostem umožňuje s částicemi manipulovat s pomocí vnějšího magnetického pole, lokálně ovlivňovat teplotu radiofrekvenčním ohřevem a vizualizovat částice pomocí magnetické rezonance (MRI). K přípravě nanočástic byla použita emulzní metoda. Kyselina olejová byla míchána za pokojové teploty v roztoku ethanolu. Za konstantního míchání byl přidán (3-aminopropyl)ethoxysilan a tetraethoxysilan, jejichž hydrolyzou a polykondenzací vznikl oxid křemičitý. Pro povrchovou úpravu jsme použili dvě metody: 1) magnetické částice byly přidány během procesu přípravy křemičitých nanočástic; 2) magnetické částice byly vysráženy v již hotových nanočásticích. Charakterizace vlastností produktu byla provedena skenovacím elektr. mikroskopem (SEM), transmisním elektr. mikroskopem (TEM), metodou dynamického rozptylu světla, radiofrekvenčním ohřevem a Brunauer-Emmett-Tellerovou metodou analýzy velikosti pórů (BET). Obě metody přípravy byly porovnány z hlediska jejich vlivu na difusní vlastnosti částic a jejich schopnost radiofrekvenčního ohřevu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Příprava porézních polystyrenových mikročastic

Autor: Marek Václavík
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Porézní materiály mají své uplatnění v mnoha oborech. Důležitou roli hrají také při separaci směsí – konkrétně v kapalinové chromatografii. Tato práce popisuje přípravu polystyrenových mikročastic, tzv. mikroclusterů, definované velikosti, tvaru a vnitřní struktury, zabývá se jejich charakterizací a také použitím v chromatografických kolonách. Výchozím materiálem jsou polystyrenové nanočástice, jež podléhají kontrolovanému shlukování (agregaci) v míchaném reaktoru za dvou různých podmínek. V prvním případě jsou vlastnosti mikročastic ovlivněny pouze rychlostí míchání reakční směsi, dochází totiž k ustavení rovnováhy mezi růstem agregátů a jejich lámáním v důsledku proudění tekutiny. Takto vzniklé částice mají nepravidelný tvar. Podstatou druhé metody je příprava inverzní emulze vody v silikonovém oleji. Shlukující se nanočástice jsou uzavřeny do kapek vody, které mají ze své podstaty kulový tvar. Tím je ovlivněn i výsledný tvar mikročastic.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Příprava a charakterizace tuhých lipidových nanočastic

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

Tuhé lipidové nanočástice jsou sférické částice o velikostech v řádu stovek nanometrů, skládají se z lipidových jader stabilizovaných vrstvou surfaktantu a jsou obvykle dispergovány ve vodě nebo vodném roztoku surfaktantu. Biodegradabilita, snadné metody přípravy bez použití organických rozpouštědel a možnost vylučování předem inkorporované hydrofobní látky pomocí změny teploty z nich činí vynikající kandidáty nosičů účinných látek. Cílem této práce je prozkoumat možnosti přípravy tuhých lipidových nanočastic jednou z méně používaných metod, vysokorychlostní homogenizací, a zmapovat vliv procesních parametrů na vlastnosti výsledných disperzí. 500 mg palmového oleje (teplota tání 35 °C) bylo přidáno do cirkulujícího vodného roztoku surfaktantů (směs lecitin:Tween 60, 1:1, celkem 100 mg) o objemu 300 ml. Byl systematicky mapován vliv všech relevantních procesních parametrů na vlastnosti disperze. V odebraných vzorcích byla distribuce částic měřena metodami statického a dynamického rozptylu světla. Různými postupy se podařilo připravit stabilní nanočástice s relativně úzkou distribucí velikosti a střední velikostí od 150 do 500 nm. Potvrdil se předpoklad, že zvýšení intenzity homogenizace příznivě ovlivňuje kvalitu disperze.