

Složení komisí pro SVK 2013 na FCHI

Sekce: **Matematické modelování v chemickém inženýrství (B III, 9:00)**

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Členové: Ing. Martin Kohout, Ph.D.
Ing. Jan Hronza, Ph.D. (Ricardo)
Ing. Martin Hubička, Ph.D. (Lovochemie)
Ing. Michal Vonka
Ing. Richard Pokorný

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 1 (B 139, 9:00)**

Komise:

Předseda: Prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Členové: Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D.
zástupce sponzora (Mondi)
Ing. František Plát, Ph.D. (Škoda Auto)
Ing. Pavel Beránek
Ing. Jaroslav Kotowski

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 2 (knihovna B141b, 9:00)**

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Dalimil Šnita, Ph.D.

Členové: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.
zástupce sponzora (Momentive)
Ing. Tomáš Jindra, Ph.D. (Pure Bohemia)
Ing. Josef Chmelař
Ing. Martin Ullrich

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 3 (B03, 9:00)**

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Členové: Ing. Otto Hadač, Ph.D.
Ing. Marek Bobák, Ph.D. (Membrain)
Ing. Lucie Rottrová (Chemoprojekt Nitrogen)
zástupce sponzora (Medicem)
Ing. Libor Labík

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Datum a místo konání: 22.11. 2013 v 9:00 v posluchárně BIII

Počet účastníků: 8

9:00	Konopka Ladislav	Modeling of triboelectrification in polymer systems
9:20	Kubová Petra	Předpověď pohybu osob při požární evakuaci
9:40	Leskovjan Martin	Simulace stárnutí automobilového katalyzátoru pro adsorpci a redukci NO_x
10:00	Pelc Václav	Návrh procesního simulátoru v prostředí jazyka MATLAB
10:20		<i>přestávka</i>
10:40	Pospíšil Martin	Modelling of diffusion and capillary condensation in percolating network system
11:00	Sládek Viktor	Software for virtual tablet dissolution testing
11:20	Voclová Malvína	Mathematical modelling of foam formation by spinodal decomposition mechanism
11:40	Zitková Anna	Modelování depozice nanočástic při elektrozprašování

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modeling of triboelectrification in polymer systems

Autor: Bc. Konopka Ladislav
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

In everyday life we often come in contact with electrostatic charge located on the surfaces of materials. Triboelectrification, i.e., charging by the friction is considered to be the crucial phenomenon, causing the charge separation most frequently. Triboelectrification is observed also for objects made of the same material. Although triboelectrification is a ubiquitous feature of industrially important dry particulate systems, its origin is regrettably understood only poorly. Charging is very complex problem (with the true physical base in quantum mechanics), affected by many parameters of the system, the material and the environment and it is difficult to correctly interpret experiments even in system like polymer reactor with particles of the same material. Thus mathematical modeling has to be involved as a tool for better understanding. Mathematical model including particle-particle and particle-wall interactions in fluidized-bed polymer reactor with consequent triboelectric charging was developed. The Discrete Elements Method based on Newton's force law is utilized. Since solid polymer particles in the gas-dispersion reactor are considered, the particles motion and mechanics is influenced and described by elastic contact, adhesion, friction and electrostatic effects. Presented model thus provides better insight into unwanted processes like sheeting or particle aggregation taking place in the polymerization reactor.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Předpověď pohybu osob při požární evakuaci

Autor: Bc. Petra Kubová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Předkládaná práce je zaměřena na předpověď pohybu osob z prostoru zasaženého požárem pomocí počítačového simulačního programu FDS+Evac. Evakuace osob z objektu zasaženého požárem je velmi důležitá problematika, která přímo vede k ochraně lidských životů. Pohyb a chování lidí během požární evakuace může být ovlivňován jak požárem samotným, tak psychickými reakcemi na stresovou situaci. Zvolenou modelovou situací je požár v 5.NP studentské koleje VOLHA v Praze. Evakuační model obsahuje algoritmus výběru únikového východu jedinců, jehož vstupními parametry jsou hustota kouře, toxicita spalin a viditelnost dostupných únikových východů. Hlavním cílem této práce je parametrická studie vlivu těchto parametrů na chování osob při evakuaci a výběr únikového východu.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Simulace stárnutí automobilového katalyzátoru pro adsorpci a redukci NO_x

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

Automobilové katalyzátory během svého provozu podléhají stárnutí, které vede k postupné zhoršování jejich účinnosti (deaktivaci). Jedním z faktorů ovlivňujících stárnutí katalyzátoru je teplotní namáhání, což se projevuje změnami ve struktuře katalytické vrstvy – slinutím a zmenšením aktivního povrchu katalytických center. Tato práce navazuje na laboratorní měření průmyslového vzorku katalyzátoru s ukládáním a redukcí NO_x (typ NSRC) a zabývá se jeho ztotožněním s 1D matematickým modelem. Nejprve byly vyhodnoceny série měření se vzorky čerstvého katalyzátoru (zápalné křivky oxidace CO a HC, adsorpce a redukce NO_x, ukládací kapacita kyslíku). Následně byly stejné experimenty vyhodnoceny i s vzorkem téhož katalyzátoru ke konci předepsané životnosti. Porovnáním vyhodnocených dat bylo možné kvantifikovat rozdíly mezi čerstvým a deaktivovaným vzorkem katalyzátoru. Model najde uplatnění při navrhování systémů pro ošetření automobilových spalin v průmyslové praxi.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Návrh procesního simulátoru v prostředí jazyka MATLAB

Autor: Bc. Václav Pelc
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

V současné době existuje na trhu řada procesních simulátorů. Většinou se jedná o komerční produkty, jejichž licenční poplatky jsou velmi vysoké. Obsluha takovýchto programů vyžaduje kvalifikovaný personál. Pro řešení jednodušších nebo speciálních úloh je často výhodnější vývoj vlastního simulačního software, který může být navíc uzpůsoben pro konkrétní účely. Cílem práce je adaptace již existující beta verze procesního simulátoru vyvinutého v Matlabu. Upravený simulační program bude demonstrován porovnáním řešení smyčky reaktoru s recyklem klasicky („ručně“) a v prostředí Matlabu. Předkládané řešení je ovšem možné použít i na podstatně složitějších úloh.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelling of diffusion and capillary condensation in percolating network system

Autor: Martin Pospíšil
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Mgr. Alexandr Malijevský, Ph.D; Prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Microporous materials are utilized in broad spectrum of applications. One field of interest is controlled transport and targeted release of substances encapsulated in particles with microporous walls. Diffusion creep starts to occur as the result of concentration gradient between inner and outer environment when such particle is put in aqueous environment as long as the sufficient fraction of the pores is continuously filled by liquid. However, the diffusion creep diminishes with appearance of discontinuities of liquid in the pores, while at some critical point (percolation threshold) the diffusion stops effectively. Such discontinuities result from capillary condensation. Pore surface could be modified to be responsive to exogenous stimuli (e.g. temperature-responsive polymer brush) thus making the diffusion controllable. Aim of this project is to construct a model describing percolation in microporous particle wall. The framework of the model is bond percolation problem, where the porous system is represented by 3-D graph: network (site) of cells (vertices) connected via channels (bonds). Capillary condensation is then represented by fraction of the open channels. Theoretical results from the project will be further used as a basis for practical laboratory experiments.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Software for virtual tablet dissolution testing

Autor: Sládek Viktor
Ročník: B3
Ústav: Laboratoř chemické robotiky
Školitel: Prof. Ing. Štěpánek František, Ph.D.

In pharmaceutical industry, design of tablet formation process is a costly procedure consuming substantial amount of active pharmaceutical ingredients (API) and requiring a lot of time as well. The tablet structure determines the kinetics of API release which can be experimentally characterized and reported in the form of a release curve. However, the problem of determining the tablet structure which would match the required release curve cannot be solved in an explicit way but requires to produce and test many tablets with different structure. The goal of this project is to create a mathematical model able to determine dissolution behavior of given tablet characterized by its shape, spatial distribution of components and other physical properties determining interaction with solvent. The procedure starts with the selection of tablet geometry from the library of basic shapes which is then used for simulations of swelling and solvent diffusion through the tablet. The simulation is based on DEM methodology, where the tablet is discretized into elements described by their position, radius, and composition. The project also contains web based user interface which controls the simulation back-end and allows easy access for any user.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Software for virtual tablet dissolution testing

Autor: Malvína Voclová
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Michal Vonka, Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polymeric foams have many diverse applications including heat or sound insulation and impact absorption. Open-cellular foams with cell size smaller than 10 μm exhibit both excellent heat and sound insulation properties. Such foams can be prepared not only by a standard approach utilizing blowing agents, but also by spinodal decomposition route suppressing the nucleation during rapid cooling of the initial homogeneous mixture of polymer and a suitable solvent. Mathematical modelling of the foam formation by spinodal decomposition is based on Cahn-Hilliard model and involves: (i) Flory-Huggins equation with temperature-dependent interaction parameter describing the thermodynamics, (ii) diffusion of species driven by the gradient of chemical potential, and (iii) Landau-Ginzburg functional describing the local penalty function for phase interfaces. The temperature vs composition phase diagram involving binodal and spinodal curves for upper-critical solution temperature case were constructed for the considered system of polystyrene and cyclohexane. The model allows understanding of the open-cellular foam formation and the influence of various parameters on the resulting foam morphology. The model also serves for the optimization of the foam formation and thus obtaining the micro-structured foams with superior thermal and sound insulation properties.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování depozice nanočástic při elektrorozprašování

Autor: Anna Zítková
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Martin Kroupa, Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Elektrozprašování je metoda rozptylování kapaliny pomocí elektrického pole. Kapičky se díky vypařování rozpouštědla a silnému elektrickému poli postupně rozpadají na malé částice. Touto metodou se dají vyrábět velmi tenké vrstvy nanočástic z různých materiálů. Jejich využití je velmi široké především v oblasti energetiky, lze je využít např. pro výrobu superkapacitorů či fotovoltaických článků. Vlivem podmínek jako jsou teplota, napětí, apod. vznikají při depozici nanočástic vrstvy o různé struktuře. Náš model popisuje dynamiku pohybu částic při depozici na desku a rovněž počítá intenzitu elektrického pole a v závislosti na ní elektrickou sílu, která působí na jednotlivé částice. Zahrnutý jsou rovněž další síly, které působí mezi částicemi a mezi částicí a okolním prostředím. Výsledkem je dynamický model depozice částic ve dvou prostorových dimenzích. Pomocí tohoto modelu lze simulovat např. vliv již deponovaných částic na částice dopadající a vznik nerovnoměrností při nanášení. Program použijeme i pro studium vlivu dalších podmínek při rozprašování na vznik různých struktur deponovaných vrstev.

Sekce: *Procesní a chemické inženýrství 1*

Datum a místo konání: 22.11. 2013 v 9:00 v posluchárně B139

Počet účastníků: 7

9:00	Čermochová Viktorie	Remote Manipulation with Micro Lablets
9:20	Fojtíková Romana	Příprava a charakterizace superkapacitorů na bázi MnO₂
9:40	Novák Matěj	Termoresponsivní nebiologická chemotaxe pro využití v mikro a nanochemii
10:00	Podivínská Martina	Bobtnání polyolefinových částic
10:20		<i>přestávka</i>
10:40	Polezhaev Petr	Optimalizace výroby zlatých mikroelektrod metodou UV litografie
11:00	Rygl Adam	Příprava a charakterizace nano- a mikroporézních polymerních pěn
11:20	Sopoušek Jan	Superparamagnetické nanočástice - optimalizace přípravy z hlediska maximální účinnosti pro radiofrekvenční ohřev

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Remote Manipulation with Micro Lablets

Autor: Viktorie Čermochová
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Aleš Zdražil, Ph.D.

Our project is a part of a joint collaboration which will lead to the design and fabrication of lablets (100 μm) - programmable microscale electronic chemistry forming a bridge between electronic and chemical computing.

Our part in the project is manipulation and assembly of lablets. We are working with the lablets formed from a polymer (Ordyl FP415) of which one side is coated with 2-4 μm thick gold layer. The remote manipulation of the lablets will be carried out by attaching oil microdroplets containing iron oxide nanoparticles (with hydrophobic coating) to the lablets surface. By placing such objects into controlled magnetic field we will be able to navigate the lablets to its destination place.

The initial step of the task was chemical modification of the Au surface in order to make it hydrophobic (more preferential to the oil phase) and preparation of kerosene-in-water (O/W) emulsion stabilized with Tween 80 with dispersed iron-oxide nanoparticles (stabilized with oleic acid) in the oil phase. We will show the successful attachment of the oil microdroplets to the lablets and the lablets' movement towards a magnetic gradient.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Příprava a charakterizace superkapacitorů na bázi MnO_2

Autor: Romana Fojtíková
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D., doc. Dr. Ing Juraj Kosek

Rozvoj elektrických zařízení přináší zvýšenou poptávku po mobilních úložištích elektrické energie. Superkapacitory se ve srovnání s klasickými kondenzátory vyznačují mnohonásobně vyšší specifickou kapacitou a současně ve srovnání s konvenčními sekundárními bateriemi větším měrným výkonem. Díky svým vlastnostem nalézají superkapacitory široké uplatnění v mnoha aplikacích. Pro přípravu elektrod jsme zvolili nenákladnou metodu elektrorozprašování, která umožňuje generovat a nanášet částice oxidu kovů o velikosti několik desítek nanometrů, což se pozitivně projevuje na zvětšování povrchu rozhraní elektroda/elektrolyt. Pomocí elektrospreje vlastní konstrukce jsme nanášeli částice oxidu manganu na ocelovou folii. Takto připravené elektrody byly charakterizovány řadou metod (Ramanova spektroskopie, AFM, SEM, aj.) a jejich následná modifikace pomocí cyklické voltametrie vedla k významnému zvýšení specifické kapacity nanesené vrstvy ($> 100 \text{ F/g}$). Výsledný elektrochemický článek složený z připravených elektrod byl charakterizován metodami chronopotenciometrie a impedanční spektroskopie, přičemž byly pozorovány superkapacitní vlastnosti. Vzhledem k dosaženým výsledkům se metoda elektrorozprašování v kombinaci s použitím oxidu manganu jeví jako efektivní způsob výroby superkapacitorů.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Termoresponsivní nebiologická chemotaxe pro využití v mikro a nanochemii

Autor: Matěj Novák
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jitka Čejková, 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 (tzv. chemických robotů). 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. Předložená práce se zabývá studiem chování kapek dekanolu v dekanoátu sodném, které se po přidání NaCl do systému začínají orientovaně pohybovat k této soli. Chování je zkoumáno v systémech různé geometrie, od Petriho misek až po jednoduché labyrinty. Dále je studován případ, kdy je sůl uzavřena v parafínu a začne difundovat až po využití externího ohřevu, tedy kdy je celý systém navíc termoresponsivní. 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

Bobtnání polyolefinových částic

Autor: Bc. Martina Podivinská
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Klára Smolná, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polyolefiny jsou semi-krystalické polymery, z nichž nejznámější polyetylen (PE) a propylen (PP) představují více než polovinu objemu všech vyráběných plastů. Sorpce monomerních složek v semi-krystalických polyolefinech je důležitým jevem nejen během polymerace, která probíhá v případě katalytické polymerace v plynně či kapalně-disperzních reaktorech, ale i při následném zpracování. Sorpce v semi-krystalických polymerech probíhá výhradně v amorfní fázi a bývá ovlivněna pevně svázanými krystalickými lamelami. Bobtnání polymeru ovlivňuje sorpční proces, například snižuje vliv elasticky omezených řetězců a zvyšuje tak sorpci. Gravimetrická sorpční data jsou korigována na vztakovou sílu, kde významnou složku tvoří i nabobtnalý objem částic. Proto je důležité studovat bobtnací proces odděleně. Změna objemu jednotlivých PE částic byla experimentálně zjištěna pomocí video-mikroskopické aparatury s tlakovou sorpční celou. Tento příspěvek diskutuje: (i) vliv bobtnání PE částic etylenem a 1 hexenem na vyhodnocení gravimetrických dat při různých průmyslově důležitých teplotách, (ii) vliv krystalinity na bobtnání PE částic, a (iii) nevratné bobtnání, které lze pozorovat při sorpci 1-hexenu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Optimalizace výroby zlatých mikroelektrod metodou UV litografie

Autor: Petr Polezhaev
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Lindner, Ph.D.

Mikroelektrody se používají v mikrofluidice např. pro elektrokinetické čerpání a mísení tekutin či elektrochemickou detekci látek. Náročnost jejich výroby s klesajícími rozměry roste. Mikroelektrody se v naší laboratoři vyrábí pomocí UV litografie s využitím leštěné mědi jako obětovaného kovového substrátu. Úspěšnost výroby mikroelektrod s charakteristickým rozměrem menším než 30 μm je však poměrně nízká a zdá se, že závisí na odrazivosti a drsnosti povrchu mědi. Jednou z hypotéz je, že povrch leštěné mědi je pro další zpracování příliš hladký, zvýšení jeho drsnosti leptáním by mohlo zvýšit jeho adhezi v dalších fázích procesu. Cílem této práce bylo nalézt vhodné činidlo pro leptání povrchu mědi, upravit parametry UV litografie (expoziční čas, doba vyvolávání) pro leptaný povrch a posoudit, zda naleptání povrchu přinese pozitivní výsledky. Leptání bylo prováděno v roztoku 1) kyseliny dusičné, 2) persíranu sodného a 3) chloridu železitého. Hotové mikroelektrody byly zkoumány pod mikroskopem a studovány jejich rozměry a případné defekty. Z výsledků plyne, že leptáním a úpravou parametrů litografie lze téměř přesně dodržet žádané rozměry mikroelektrod a omezit tvorbu defektů.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Příprava a charakterizace nano- a mikroporézních polymerních pěn

Autor: Bc. Adam Rygl
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Andra Nistor, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polymerní pěny dělíme podle struktury na pěny s uzavřenými nebo otevřenými póry. Jestliže je velikost pórů menší než 10 μm či dokonce menší než 100 nm, pak nazýváme takovéto pěny mikro- resp. nanopórními. Vzhledem k velikosti pórů a vysoké porositě mají tyto pěny unikátní vlastnosti. Nano- a mikropórní polymerní pěny s uzavřenými póry (buňkami) nachází využití jako tepelné či dielektrické izolanty s výbornými mechanickými vlastnostmi a nízkou spotřebou materiálu. Jejich tepelná vodivost může být až třikrát nižší než u standardních pěn. Naproti tomu pěny s otevřenými póry mají lepší absorpční a zvukově izolační vlastnosti, což je předurčuje k potenciálnímu využití jako nosičů v tkáňovém inženýrství, adsorpčních kolonách či membránách a jako zvukové izolátory. V této práci prezentujeme dosažené výsledky přípravy mikro- a nano-celulárních polystyrenových pěn. Systematicky jsme studovali vliv impregnačních (v superkritickém CO_2) a vypěňovacích podmínek na výslednou strukturu pěn. Optimalizací podmínek se nám podařilo připravit pěny s průměrnou velikostí buněk pod 1 μm . Polystyrenové pěny s otevřenými póry byly vypěňovány metodou teplotně indukované fázové separace, konkrétně tzv. spinodální dekompozicí. Za tímto účelem byla navržena a postavena nová aparatura a dále byly provedeny prvotní experimenty.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Superparamagnetické nanočástice - optimalizace přípravy z hlediska maximální účinnosti pro radiofrekvenční ohřev

Autor: Jan Sopoušek
Ročník: B3
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Mgr Jaroslav Hanuš, PhD.

Práce se zabývá přípravou a charakterizací nanočástic tvořených oxidy železa s citrátovým stabilizačním činidlem. Tyto biokompatibilní nanočástice mohou nacházet uplatnění jak přímo v léčbě pomocí magnetické hypertermie, tak i pro uvolňování aktivních látek, lokálně ovlivnitelného pomocí magnetického pole.

Cílem práce bylo identifikování parametrů, které jsou klíčové pro maximální účinnost částic z hlediska radiofrekvenčního ohřevu, a hlavně nalezení způsobu, jak tyto optimalizované částice připravit. Z rešerše bylo zjištěno, že stěžejní je pravděpodobně velikost částic a že by se tato velikost měla pohybovat někde kolem 15 nm. Práce se pak zaměřila na nalezení vhodných parametrů přípravy pro vytvoření co možná nejhomogenější distribuce částic s požadovanou velikostí. Částice byly připravovány kondenzační reakcí oxidů železa pomocí amoniaku v dusíkové atmosféře, přičemž parametry reakce byly cíleně měněny. Pro charakterizaci částic z jednotlivých vsádek byl použit transmisní elektronový mikroskop a Zetasizer využívající dynamický rozptyl světla, byl stanoven zetapotenciál částic a měrný absorbovaný výkon v radiofrekvenčním poli. Vhodné parametry, které umožňují přípravu nanočástic s velkým měrným absorpčním výkonem byly nakonec úspěšně nalezeny.

Sekce: *Procesní a chemické inženýrství 2*

Datum a místo konání: 22.11. 2013 v 9:00 v posluchárně B141b

Počet účastníků: 7

9:00	Dundálek Jan	Konstrukce zinko-vzduchového palivového článku
9:20	Dvořák Jakub	Tvorba 3D rozlišených vrstev pro sledování adheze pomocí MRI
9:40	Haškovcová Kateřina	Gravimetrické měření sorpčních rovnováh v polymerech
10:00	Janská Petra	Příprava a charakterizace částic sloužících k biologicky řízenému vylučování submikrometrových objektů
10:20		<i>přestávka</i>
10:40	Petrík Juraj	Syntéza a adhézní vlastnosti modifikovaných nanočástic na ADH antigén
11:00	Sznapka Jakub	Selektivní separace kovů z odpadních roztoků
11:20	Šnajdr Ivo	Regenerace zinku pro palivový článek zinek vzduch

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Konstrukce zinko-vzduchového palivového článku

Autor: Bc. Jan Dundálek
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D., Ing. Josef Chmelař, Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Rostoucí ceny pohonných hmot a množící se obavy o zásoby ropy stimulují rozvoj alternativních zdrojů energie pro automobily. Hlavní pozornost je zaměřena na elektrické zdroje energie, kterými jsou zejména palivové články či sekundární baterie. V minulosti se uvažovalo využití vodíkových palivových článků, ovšem nikdy nedošlo k jejich komerční aplikaci ve vozidlech. Alternativou k vodíkové technologii mohou být zinko vzduchové palivové články, které fungují na principu oxidace zinku v alkalickém prostředí vzdušným kyslíkem. Při srovnání s vodíkovými palivovými články dosahuje sice systém zinek vzduch 30krát menší specifickou energii (Wh/kg), ale vyznačuje se vyšší bezpečností, protože zinek netvoří výbušnou směs se vzduchem, dále nižší cenou vzhledem k využití neplatinových katalyzátorů pro redukci kyslíku a také vyšším elektromotorickým napětím. Cílem této práce je sestavení a ověření funkce různých konstrukcí laboratorního zinko vzduchového palivového článku, které byly navrženy na základě literární rešerše.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Tvorba 3D rozlišených vrstev pro sledování adheze pomocí MRI

Autor: Jakub Dvořák
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Nina Sarvašová, Prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Zobrazování pomocí magnetické rezonance (MRI) je nedestruktivní metoda umožňující získat obraz řezu nebo vnitřní struktury zobrazovaného objektu. Je to tedy vhodná metoda pro zobrazování 3D rozlišených porézních vrstev, které mohou být dále použité například jako simulační prostředí pro studium adheze mikročástic v 3D v komplexním prostředí pomocí MRI. Tato práce se zabývá tvorbou 3D rozlišených porézních vrstev určených na výše uvedené typy experimentů. Porézní vrstvy byly vytvořeny metodou pevné matrice tvořené krystaly NaCl v různých velikostních frakcích. Na tvorbu samotných cel byly v této práci využity dva materiály, agar a Polydimethylsiloxan (PDMS). Hydrofilní agar se ukázal být nevhodným pro tvorbu podobných vrstev z důvodu deformace vnitřní struktury po odstranění matrice. Na rozdíl od agaru, PDMS je strukturálně stabilní po odstranění matrice a zachovává si kanálový charakter i za vyšších teplot a tlaků. Z daných důvodů byl pro další experimenty zahrnující modifikaci vlastností získaných 3D rozlišených vrstev a samotnou adhezi vybraných mikročástic použitý PDMS. Modifikace povrchu byla zatím provedena pomocí poly-L-lysinu a bylo zjištěno, že tato modifikace vedoucí k hydrofilitě povrchu způsobila lepší adhezi křemíkových nanočástic.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Gravimetrické měření sorpčních rovnováh v polymerech

Autor: Kateřina Haškovcová
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Josef Chmelař, Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polymery jsou prakticky užitečné materiály, což potvrzuje jejich obrovská roční produkce a množství aplikací. Znalost rozpustnosti nízko-molekulárních látek (zejména monomerů) v polymerech je velice důležitá při optimalizaci jejich výroby (rychlost polymerace) a následného zpracování (např. odplynění produktů). V naší laboratoři používáme k měření sorpčních rovnováh gravimetrickou aparaturu, jejímž základem jsou váhy s magnetickým závěsem. Velkou výhodou této metody je, že můžeme měřit za vysokých teplot (až 400°C) a tlaků (až 350 bar). V rámci této práce byly naměřeny rozpustnosti ethylenu ve: (i) vzorcích houževnatého polypropylenu (hiPP) s různými obsahy kaučukové fáze a (ii) vzorcích polyethylenu (PE) s rozdílnými hustotami. U obou polymerů jsme sledovali závislost rozpustnosti ethylenu na teplotě. U hiPPu nás dále zajímal vliv obsahu kaučukové fáze na rozpustnost a také samotná rozpustnost v této fázi. U PE byl studován především vliv hustoty a změna rozpustnosti při přechodu do taveniny. Získaná data jsou důležitým příspěvkem ke komplexní studii daných materiálů, která zahrnuje též výsledky difúzních a morfologických měření.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Příprava a charakterizace částic sloužících k biologicky řízenému vylučování submikrometrových objektů

Autor: Petra Janská
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Cílem předložené práce je připravit a charakterizovat hybridní mikročástice obsahující živé buňky, které by mohly sloužit k řízenému vylučování submikrometrových objektů. Kvasinky zapouzdřené do mikročástic dokáží nečinně přežít po několik týdnů, po přidavku živin se však začnou buňky dělit, což vede k destabilizaci částice a následnému prasknutí a vyloučení veškerého obsahu. Zapouzdříme-li do takovéto mikrokapsle vedle kvasinkových buněk např. nosič léčiva, pesticidu nebo antibakteriální látky, jsou tyto nosiče uvolněny do prostředí pouze za určitých podmínek (přítomnost živin, vhodná teplota pro růst kvasinek). Jedním ze způsobů, jak enkapsulovat kvasinky do částic, je příprava colloidosomů (částic tvořených monovrstvou koloidních částic) pomocí Pickeringových emulzí. Touto cestou se povrchově upravené koloidní částice samouspořádávají na rozhraní olejné a vodné fáze, čímž stabilizují kapičky dispergované fáze, která obsahuje kvasinky. V této práci byl zkoumán poměr olejné a vodné fáze, koncentrace a povrchový náboj buněk a křemičitých koloidních částic vedoucí ke vzniku stabilní Pickeringovy emulze bez použití povrchově aktivních látek.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Syntéza a adhézne vlastnosti modifikovaných nanočástic na ADH antigén

Autor: Juraj Petřík
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Karcinogén prsníka představuje v světovém meradle nejčastěji diagnostikovanou nádorovou chorobu, která je současně nejčastější příčinou úmrtí žen na rakovinu. Preto je potřeba hledat řešení na léčbu tohto a ďalších ochorení. Jednou z možností léčby môže byť, v blízkej budúcnosti, cieleňé doručovanie aktívnych látok pomocou štruktúrovaných nano- a mikročástic. Bolo dokázané, že nádorové bunky karcinómu prsníka, označované ako MCF-7 majú na svojom povrchu naviazaný antidiuretický hormón (ADH, alebo tiež vazopresín) prostredníctvom transmembránových receptorov spriahnutými s G-proteínmi. Táto väzba bola dokázaná aj pri iných typoch nádorových buniek, napr. pľúcnych alebo prostaty. Cieľom práce bolo overiť adhézne vlastnosti nanočástic modifikovaných protilátkou anti-ADH na špeciálne upravené sklíčko, potiahnuté antigénom ADH, ktoré malo simulovať povrch nádorových buniek. Adhézne experimenty boli uskutočňované v prietokovej cele pri rôznych podmienkach (zmena rýchlosti prietoku, čas pôsobenia) za cieľom zistenia pevnosti špecifickej väzby protilátka – antigén. V budúcnosti by sme chceli aplikovať adhézne experimenty do 3D prostredia, a charakterizovať vlastnosti väzby protilátka - antigén v tomto prostredí.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Selektivní separace kovů z odpadních roztoků

Autor: Jakub Sznepka
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. Dalimil Šnita CSc.

V době stále se rozvíjícího elektrotechnického a fotovoltaického průmyslu roste spotřeba drahých kovů, jako je například zlato, stříbro, indium, galium. Tyto kovy jsou součástí neobnovitelných zdrojů surovin a je zapotřebí jejich opětovná recyklace. Cílem této práce je separace mědi, india a galia z odpadních roztoků pomocí vybraných metod. Byly použity dva postupy – selektivní extrakce a srážení s následným selektivním rozpouštěním. Z laboratorních vsádkových experimentů byla získána rovnovážná data pro selektivní extrakce a srážení kyselinou šťavelovou. Průmyslově je extrakce koncipována jako kontinuální proces, proto byla zkonstruována protiproudá kolona, která by v budoucnu měla být součástí průmyslového pilotního projektu. Nakonec byly oba postupy ekonomicky porovnány z hlediska jejich aplikovatelnosti do reálných provozů.

Regenerace zinku pro palivový článek zinek vzduch

Autor: Bc. Ivo Šnajdr

Ročník: M1

Ústav: Ústav chemického inženýrství

Školitel: Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D., Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Palivové články nacházejí uplatnění především v situacích, kdy je potřeba mobilní zdroj elektrické energie o vysoké kapacitě, například pro elektromobily. Nejdiskutovanějším je vodíkový palivový článek, který je ale vzhledem k nízké účinnosti, vysoké ceně komponent a potřebě rozsáhlé infrastruktury neekonomický a nikdy se nedostal do sériové výroby pro využití v elektromobilech. Jako alternativu lze využít například palivový článek zinek-vzduch, ve kterém se částice zinku oxidují / rozpouštějí na hydroxid zinečnatý za využití vzdušného kyslíku. Tento palivový článek lze znovu nabít během jedné minuty doplněním suspenze zinku.

Cyklická energetická účinnost zinko-vzduchového palivového článku je ovlivněna zejména energetickou náročností zpětného nabití, tj. redukcí Zn^{2+} na Zn^0 . Volba správného postupu regenerace zinkové suspenze je rozhodujícím faktorem, který ovlivňuje celkovou ekonomickou rozvahu palivového článku Zn-vzduch. V práci porovnáme různé metody získání zinku z oxidu zinečnatého: (i) pyrometalurgicky, (ii) hydrometalurgicky (elektrochemicky) a (iii) solární termickou redukcí.

Sekce: *Procesní a chemické inženýrství 3*

Datum a místo konání: 22.11. 2013 v 9:00 v posluchárně B03

Počet účastníků: 8

9:00	Gorný Damian	Inovace metody InkJet a její použití pro vytvoření mikročastic
9:20	Hulík Radim	Změny účinnosti redukce NO_x při stárnutí katalyzátoru NSRC
9:40	Jantač Simon	Experimentální studium elektrostatického nabíjení polymerních částic a filmů
10:00	Khafizova Elvira	Řízená manipulace mikrokapek pomocí elektrického pole
10:20		<i>přestávka</i>
10:40	Krejčí Anna	Predikce příkonu v mechanicky míchaném aerovaném reaktoru
11:00	Schneider Patrik	Charakterizace heterofázových polymerů pomocí TD-NMR
11:20	Šoltys Marek	Synthesis and characterisation of surface modified magnetic hollow silica nanospheres
11:40	Vrána Jiří	Membránový koaxiální elektrolyzér pro přípravu elektrolytů vanadové redoxní průtočné baterie

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Inovace metody InkJet a její použití pro vytvoření mikročastic

Autor: Damian Gorný
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Prof. Ing. František Štěpánek, PhD.

Cílem práce je příprava mikročastic pomocí metody InkJet a inovace této techniky. Technologie InkJet využívá tiskovou hlavu schopnou s vysokou frekvencí generovat mikroskopické kapičky konzistentní velikosti. Tato metoda je velice vhodná pro přípravu mikročastic, které mohou obsahovat několik komponent, řádově i desítek komponent. Tyto částice pak mohou sloužit jako aktivní nosiče léčiv či jiných aktivních látek, které jsou určeny například na cílené čištění těžko dostupných míst.

Vlastní práce spočívá v nastavení a parametrizaci tiskové hlavy. Dále pak zkoumání vlivu matriční kapaliny a to především její viskozity před zesíťováním na gel. Inovace spočívala v přidání laseru do aparatury. Laserový paprsek procházel přes proud generovaných kapek a tím odpařil část vody z kapalného roztoku. Následně byly do částic uzavírány různé látky, například lipozomy, kvasinky, nanočástice železa a B12. Z částic připravených z matričních roztoků o různých viskozitách, ve kterých byl uzavřen vitamín B12, bylo zkoumáno vylučování vitamínu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Změny účinnosti redukce NO_x při stárnutí katalyzátoru NSRC

Autor: Radim Hulík
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Vznětové (dieselové) motory spalují palivovou směs s přebytkem vzduchu (chudá směs), na rozdíl od zážehových motorů, které spalují směs stechiometrickou. Spalování chudé směsi vede k nižší spotřebě paliva, ale také k problémům s emisemi oxidů dusíku (NO_x). Aby byly splněny nejnovější normy (EURO VI) je nutné vybavit dieselové automobily mimo jiné i deNO_x katalyzátorem. Pro tento účel může sloužit katalyzátor s ukládáním NO_x (NSRC), který pracuje na principu periodické adsorpce (delší fáze) a následné rychlé redukce nahromaděných oxidů dusíku pomocí krátkodobého obohacení palivové směsi.

Tato práce porovnává výstupní koncentrace NO_x, NH₃ a N₂O čerstvého a použitého katalyzátoru NSRC v laboratorním reaktoru při provozních teplotách od 150°C do 500°C. Pro měření byly použity syntetické plyny simulující skutečnou směs plynů ve výfukovém potrubí. Pro redukci NO_x byly použity CO, C₃H₆ a H₂, a to jak samostatně tak i ve směsi. Ze získaných dat byly vyhodnoceny selektivity produktů (N₂, NH₃, N₂O) a celková konverze NO_x. Takto získaná data v praxi slouží k návrhu velikosti, umístění a strategie řízení katalytického konvertoru tak, aby byly splněny emisní normy po celou dobu životnosti katalyzátoru.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Experimentální studium elektrostatického nabíjení polymerních částic a filmů

Autor: Simon Jantač
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Maršálek, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Elektrostatické nabíjení polymerních částic a filmů je významným průmyslovým problémem, který stále není zcela prozkoumán a pochopen. Například výroba polyethylenu v plynně-disperzních reaktorech je doprovázena generací elektrostatického náboje, který způsobuje tvorbu aglomerátů a může dojít až k nucené odstávce reaktoru. Tato práce popisuje naši snahu o experimentální studium problematiky elektrostatického nabíjení, vybíjení a regulace. Elektrostatický náboj vygenerovaný různými dobře charakterizovanými procesy je stanovován pomocí indukce ve Faradayově hrnci. Pomocí korónového výboje můžeme dosáhnout limitní povrchovou hustotu náboje na studovaném materiálu. První série experimentů systematicky studovala tribonabíjení stejných materiálů při vzájemném tření (PE, PS, sklo). Experimenty byly navrženy tak, aby byl vždy simulován proces styku částice a stěny. U každého z výše uvedených materiálů jsme pozorovali odlišné chování. Naším cílem je popsat mechanismus nabíjení polymerních částic a filmů a navrhnout, jak při výrobě a uchovávání těchto materiálů snížit elektrostatický náboj. Doposud získané výsledky poukazují na komplikovanost celé problematiky a na potřebu hlubšího základního výzkumu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Řízená manipulace mikrokapek pomocí elektrického pole

Autor: Elvira Khafizova
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. Příbyl Michal, Ph.D.

V biologických a medicínských aplikacích často vzniká potřeba adresovat roztoky či analyty k určitému místu v systému. Toho je možné docílit pomocí elektrokinetických jevů, například pomocí elektroforézy, elektroosmózy či dielektroforézy.

Cílem práce je návrh a výroba mikrofluidního čipu, vhodného pro výzkum adresování rozptýlených kapek do specifických míst mikrofluidního čipu s využitím elektrických polí. Při pokusech se používají vodné roztoky polyethylenglykolu s molekulovou hmotností okolo 4000 g/mol (PEG 4000) a roztok hydrogenfosforečnanu draselného a dihydrogenfosforečnanu draselného o pH=7. Mikročip byl navržen v programu MatLAB a vyroben pomocí frézování, lisování a UV litografie. Ustálený tok mikrokapek v kanálu a generování segmentovaného toku je zajištěno čerpadlem GEMINI 88KD.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Predikce příkonu v mechanicky míchaném aerovaném reaktoru

Autor: Anna Krejčí
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Cílem práce je predikce příkonu míchadel v mechanicky míchaných disperzích kapalina – plyn. Se znalostí potřebného příkonu je možné predikovat průměrná střížná napětí v kapalině a objemový koeficient přestupu hmoty. Příkon míchadel je zejména závislý na otáčkách míchadla, množství přiváděného plynu, typech a velikostech míchadel a geometrickém uspořádání nádoby. Jejich vhodným nastavením lze dosáhnout snížení energetické náročnosti mechanického míchání, a tím úspory nákladů na provoz těchto aparátů. Příkon míchadel je také důležitým faktorem při zvětšování měřítka mechanicky míchaných nádob. Měření příkonu v neaerovaných a aerovaných vsádkách bylo provedeno při různých frekvencích otáček a průtocích plynu, v nádobě jak laboratorního (průměr nádoby T=30 cm), tak poloprovozního měřítka (T=60 cm), pro koalescentní a nekoalescentní kapaliny. Zejména důležité jsou nekoalescentní kapaliny, protože svým chováním odpovídají většině průmyslových vsádek. Pro predikci příkonu v mechanicky míchaných probublávaných nádobách byly sestaveny korelační rovnice zohledňující velikost nádoby a typ použitého míchadla. Tyto rovnice byly také porovnány s literaturou.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Charakterizace heterofázových polymerů pomocí TD-NMR

Autor: Patrik Schneider
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Josef Chmelař, Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Ačkoliv jsou polymery jedním z nejrozšířenějších materiálů a mají široké spektrum aplikací, přesto stále není zcela objasněno jejich vnitřní uspořádání (tj. morfologie). Přitom na morfologii závisí aplikační charakteristiky, ať už mechanické a optické vlastnosti, teplota měknutí či sorpční a difúzně-bariérové vlastnosti. Pro optimalizaci průmyslové výroby a vývoj nových produktů je nutná znalost metod charakterizace morfologie polymerních materiálů. V této práci je charakterizace polymerů prováděna technikou nukleární magnetické rezonance v časové doméně (TD-NMR) pomocí experimentů Free induction decay (FID), Hahn-Echo a Saturation recovery. Hlavní náplní měření bylo zjišťování relaxačních časů a obsahu fází v různých vzorcích polyethylenu (PE). Byly pozorovány změny v obsahu jednotlivých polymerních fází s rostoucí hustotou a pro vzorky PE se střední a nízkou hustotou byla identifikována polymerní fáze, která doposud nebyla popsána v literatuře. Tato nová interpretace morfologie byla založena na porovnání relaxačních časů jednotlivých fází. Dále byla studována sorpce organických látek v polystyrenu a PE. Vlivem sorpce dochází ke změnám pohyblivosti polymerních řetězců, což vede ke změnám relaxačních konstant a umožňuje sledovat sorpční procesy pomocí TD-NMR měření.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Synthesis and characterisation of surface modified magnetic hollow silica nanospheres

Autor: Bc. Marek Šoltys
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Targeted drug delivery with release on demand property is a very promising concept of treating various illnesses (cancer, cardiovascular diseases or diabetes) in the future. Modified hollow mesoporous silica nanoparticles could serve as a delivery vessels of an active substance in this method and could find a wide range of applications in industry as well. The particles could be either autonomous or serve as an inner compartment of larger chemical robots. The goal was to prepare surface modified hollow porous magnetic silica nanoparticles (100 – 300 nm) with composite iron oxide. The final particle should have properties of a living organism except the ability of reproduction and evolution. That means it is capable of movement in the surrounding environment, material exchange and controlled accumulation or release of substances. The nanoparticles were precipitated from (3-aminopropyl)ethoxysilane and tetraethoxysilane at phase interface of water – oleic acid nanoemulsion. An electrostatic bonding method was used to prepare nanoparticles with surface modified by iron oxide. For this, iron oxide nanoparticles with positive surface charge had to be prepared and they were mixed with negatively charged silica nanoparticles. Characterisation of the resulting nanoparticles was done by TEM, DLS, ELS, electromagnetic heating, BET and release kinetics of a model substance was measured.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Membránový koaxiální elektrolyzátor pro přípravu elektrolytů vanadové redoxní průtočné baterie

Autor: Bc. Jiří Vrána
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jaromír Pociďič, Ph.D., Ing. Petr Mazúr, Ph.D., doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Strategicky plánované zvýšení podílu elektřiny z obnovitelných zdrojů v energetickém mixu EU do roku 2020 a podporovaná energetická koncepce účinnější distribuce elektřiny motivují k vývoji nových zařízení pro lokální ukládání elektrické energie. Význam zmiňovaných systémů spočívá v zajištění kvality a stability dodávek proudu odběratelům. Vanadová redoxní průtočná baterie (VRPB) se ukazuje jako vhodný kandidát, výhodou tohoto úložiště je zejména kapacita (kWh) regulovatelná objemem elektrolytů a vysoká účinnost. Doposud bylo během vývoje VRPB v naší laboratoři dosaženo energetické účinnosti 83 % při proudové hustotě 56 mA/cm², což jsou hodnoty přijatelné i pro průmyslové využití systému. Nedílnou součástí vývoje baterie je vývoj zařízení pro přípravu elektrolytů z V₂O₅ metodou reduktivního rozpouštění v H₂SO₄. Cílem práce je návrh, konstrukce a ověření funkčnosti membránového elektrolyzátoru, který navazuje na námi vyvinuté systémy předchozích generací. Inovace spočívá v převodu systému z planparalelní do koaxiální geometrie, čímž lze zásadně snížit investiční náklady zmenšením ploch drahých iontově-výměnných membrán a platinované anody. Funkčnost sestaveného elektrolyzátoru byla ověřena pomocí

galvanostatické elektrolýzy směsi V_2O_5 a roztoku H_2SO_4 , za současného monitorování pomocí konduktometrie a spektroskopie ve vidí.