

Sekce : Chemical Engineering I

## **Two-dimensional manipulation strategies for magnetic microtransporters**

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

This work proposes an electromagnetic actuation system using a set of four iron core solenoids (with holding power of 750 N) for separation and precise navigation of micro-objects (50 - 200  $\mu\text{m}$ ) which can realize two degrees of freedom motion on a liquid-air interface. The research is leading to an automatic manipulation with magnetic micro-transporters and non-magnetic objects via attachment to and subsequent release from the transporters by position based control algorithm.

The magnetic micro-transporters, kerosene micro-droplets containing iron-oxide nanoparticles, were fabricated and transferred into a reservoir, which was placed between the solenoids. Variety of reservoirs were casted from polydimethylsiloxane and agar gel while printing masks on a 3-D printer in search for the best possible experimental setup. With manual control of the magnetic field, successful separation of multiple droplets from each other and navigation of particular droplet to a given position were shown. Parametric study of the micro-object movement in controlled magnetic field was conducted while investigating dependence on x- and y-coordinates, concentration of the iron nanoparticles, size of the droplet and applied voltage. Collected data are essential for a development of an automatic actuation system.

Sekce : Chemical Engineering I

## **Aggregation of liposomes and release kinetics**

Autor: Jan Haša  
Ročník: B2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D; Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D

Liposomes are small hollow particles created by phospholipid bilayer that are able to encapsulate a hydrophilic content. This effect is essential for use of liposomes in the field of targeted medicine administration.

In our research, liposomes are prepared by hydration method using dipalmitoylphosphatidylglycerol combined with cholesterol to improve resistance of the bilayer. Due to the method we use, the concentration of liposomes in our liquid is insufficient and the size of particles is around 100 nm. To increase the concentration, the repulsion between particles is decreased by adding salt into the dispersion of liposomes. This results in aggregation of small particles into clusters with diameter 400-800 nm. The salt concentration needed, ranges between 600 mM and 1000 mM, which is 4-6,5 times higher than typical concentration of physiological solution (154mM). In case of pure DPPG liposomes 97% of content was released.

However, we have determined that liposomes made of DPPG: cholesterol rate 8:1 and 2:1 are more stable while aggregating and release of content stays below 10%.

Sekce : Chemical engineering I

## **Triboelectric charging of polyethylene – experimental study**

Autor: Bc. Simon Jantač  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Powder particles undergo various friction contacts as they are transported in pneumatic conveying industrial systems, e.g., in the fluidized-bed polymerization reactor. The contacts of particles with a device wall cause the electrons on the mating surfaces to redistribute. The phenomenon known as the triboelectric charging results in severe operational problems and safety risks. In our work the 'cascade method' apparatus, i.e., the slide followed by the Faraday's cage, was utilized to observe the particle-wall charging of polyethylene powder in the friction contact with various materials. The dependence of the acquired charge on the following parameters has been determined: humidity, slide surface roughness and material of the slide (glass, aluminium and polyethylene). The humidity influences the charging substantially more than the choice of the slide material. We have observed significant charging also when two same materials were in the friction contact in disagreement to obsolete theories of triboelectric series. The maximum (saturated) charge was determined by the repeated experiments for each pair of the material and of the slide. Also, the charging dynamics for each such a case was observed. This work contributes to a better understanding of the triboelectric charging and provides data for the validation of mathematical models.

Sekce : Chemical Engineering I

## **Selectivity of NO<sub>x</sub> reduction in NO<sub>x</sub> storage catalyst monolith (NSRC)**

Autor: Bc. Dickson Daniel Owusu Kofi  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Petr Kočí, PhD.

Nitrogen oxides (NO<sub>x</sub>) removal from lean-burn exhaust emission is one of the major challenges in environmental catalysis. NO<sub>x</sub> storage reduction catalyst (NSRC) is currently regarded as one of the most practical technologies for NO<sub>x</sub> removal in automobile exhaust gas. Several nitrogen compounds can be produced during the regeneration phase in periodically operated NO<sub>x</sub> storage and reduction catalyst for conversion of automobile exhaust gases. Depending on the regeneration length, temperature and gas composition, the main products that can be formed are N<sub>2</sub>, NO, N<sub>2</sub>O and NH<sub>3</sub>.

This research focuses on the experimental evaluation of the NO<sub>x</sub> reduction and selectivity towards the main products (N<sub>2</sub>, NO, N<sub>2</sub>O and NH<sub>3</sub>) within a short rich phase (3 and 6 seconds). An industrial sample of NSRC is employed in nearly isothermal micro reactor for this experiment. The experiments are performed in the temperature range 150-500°C in the presence of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O, using H<sub>2</sub>, CO and C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> as reducing agents. The experiments are designed to obtain suitable data that can be used for mathematical modelling and prediction of NO<sub>x</sub> reduction selectivity under varying operation conditions.

Sekce : Chemical Engineering I

## **Measurement of power consumption in stirred vessels**

Autor: Bc. Inês Mendonça  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

The knowledge of power input in stirred tank reactors is decisive for a successful scale-up, operation and design of stirred tank reactors. The power input in such vessels is predicted using empirical correlations. To ensure their reliability the correlations should be based on a broad range of operational conditions. The measurements were carried in a pilot-plant vessel and moreover results from laboratory vessel were used. Different types of impellers and their combinations were used including radial, axial and combined liquid flow impellers. Solution of the commercial thickener Sokrat 44 was used as a liquid phase to represent a viscous batch. The power input was measured for various single-, double- and triple-impeller configurations and for different frequencies and several gas flow rates. Gassed and ungassed power inputs were measured. It is shown that upper impellers have higher gassed power input than the bottom one. Correlation equations describing behaviour of particular impellers were evaluated for a viscous batch and for a non-coalescent batch. In addition separate correlations for bottom and upper section were presented. We believe that these correlations can be used for prediction in an industrial scale apparatuses, under wide range of operational conditions.

Sekce: Chemical Engineering I

## **Bubble behaviour under presence of non-ionic surfactants**

Autor: Giulia Nannetti  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

The global consumption of plastics materials is increasing and its recycling is no longer a choice but a needs. To have a good plastics recovery a high degree of separation is required and new techniques are being developed. The froth flotation, used effectively for mineral ore separation, is studying now to gain the maximum efficiency also in flotation of plastics materials. This method is based on selective adhesion of bubbles on more hydrophobic surfaces. During the flotation process, several flotation agents including frothers and wetting agents are used and here the surface active agents (surfactants) belong to the most important group.

The core of this study is to analyse how the presence of surfactants affects the bubble adhesion process. The experiments were done with the non-ionic surfactant pentaethylene glycol monododecyl ether and these data were compared with results obtained for other non-ionic surfactant (Triton X-100). The experiments were carried out using a free rising bubble technique, capturing the bubble adhesion using a high speed camera. The wetting dynamics (three-phase contact line expansion, dynamic surface tension, bubble and drop contact angles) were measured for different surfactant concentration and the important influence of critical micelle concentration was found.

Sekce : Chemical engineering I

## **Study of the mechanism of decanol chemotaxis**

Autor: Bc. Matěj Novák  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Biological chemotaxis is a crucial feature of living organisms, because it represents the ability to locate sources of nutrition and to move towards them. Various synthetic systems have also exhibited signs of chemotactic behavior. The common denominator of these systems is a transfer of chemical into mechanical energy, induced by a concentration gradient of another added substance. In the presented work, we analyzed autonomous movement of decanol droplets on a glass substrate, covered by a thin layer of sodium decanoate solution. The droplets exhibit the ability to move repeatedly towards additions of NaCl, to find the addition source in a maze structure or to transport reactive substances in the process. This type of artificial chemotaxis could be utilized to transport cleaning agents to otherwise inaccessible internal surfaces of machines. Furthermore, a hypothesis was formulated, explaining the mechanism of oriented chemotaxis in the studied system. Since a gradient of surface tension in the vicinity of the droplet seems to contribute to the movement, another surfactant solution, namely sodium dodecyl sulfate, was tested for chemotactic abilities with  $\text{NH}_4\text{Cl}$  acting as trigger of the movement instead of NaCl. The results, obtained in this research, could find an application in future design of microfluidic devices or artificial "chemical robots".

Sekce : Chemical Engineering I

## **Composite Lipid/ $\text{Fe}_3\text{O}_4$ / $\text{SiO}_2$ Sub-micron Particles for Controlled Release of Active Substances**

Autor: Marek Šoltys  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, PhD.

The goal was to prepare surface modified hollow porous magnetic silica nanoparticles (400-600 nm) with iron oxide and lipid layer on top. For the synthesis of the nanoparticles an emulsification method using cetyltrimethylammonium bromide and tetraethoxysilane was used. 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 silica nanoparticles, which have negative surface charge. Characterisation of the resulting nanoparticles was done by transmission electron microscopy (TEM), dynamic light scattering (DLS), electrophoretic light scattering (ELS), electro-magnetic heating, Brunauer-Emmett-Teller (BET) surface area analysis with pore size analysis, release kinetics of a model substance and a heat induced hydrolysis of loaded ester was measured. Further, a lipid layer was formed around the particles and it's effect on diffusion rate of a loaded substance from the particles was studied.

Sekce : Chemical Engineering

## **Preparation and performance of multi-layer Lean NO<sub>x</sub> trap catalysts**

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

Lean NO<sub>x</sub> trap (LNT) catalyst is an effective tool for removal of nitrogen oxides (NO<sub>x</sub>) from automotive exhaust gas. The NO<sub>x</sub> are stored on the active sites and then reduced, which is controlled by periodical changing of the air/fuel ratio. The LNT needs to be combined with other types of catalysts (e.g. DOC for oxidation of CO and hydrocarbons) and there is an effort to combine them in a single monolith reactor. However, when the catalyst layers coated on the walls of monolith channels are too thick, the overall efficiency is influenced by diffusion limitations. Whereas the chemical formulations of the catalysts have been finely tuned by the manufacturers, the role of the transport has not been fully investigated.

This work is focused on preparation of model LNT catalysts coated on flat metal foils, where the uniformity and thickness of the layers are well controlled. The active LNT layers were overcoated with additional layers (either inert or DOC) as the ultimate objective is to examine the effect of gas transport on the catalyst performance. The samples were characterised and tested in a laboratory reactor for oxidation reactions and NO<sub>x</sub> storage and reduction.

Sekce : Chemical Engineering I

## **Ultrathin biocompatible coatings of fluorescent diamonds**

Autor: Jan Vávra  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Mgr. Petr Cígler Ph.D.

Diamond nanoparticles are being thoroughly studied as a promising non-toxic material for fluorescent imaging. The combination of superior physical and chemical properties of diamond and its size in the range of tens of nanometers make these particles a viable option for such applications. In contrast to fluorescent proteins and other organic fluorescent dyes which suffer from photobleaching, nanodiamonds are extremely photoresistant and well suited to be used for long-term imaging. Fluorescent diamond nanoparticles are perfectly capable to be used for imaging of living cells in vitro. However, once these particles are introduced into more complex living organisms, an issue of biocompatibility rises. Although the bare nanodiamond particles are chemically inert, they suffer from aggregation in biological environment. Here, we addressed this issue by deposition of self-assembled phospholipid bilayers on diamond nanoparticles. These structures can be made to resemble lipid cell membrane of almost all living organisms and should be ignored by the immunity system. The growth of these supported lipid bilayers has been studied on very few materials, silica being one of them. We developed a method to grow silica shells of controlled thickness on the surface of nanodiamonds. The formation of supported phospholipid bilayers on these silica-coated nanodiamonds has been confirmed using fluorescent assay and their stability has been tested in series of buffer solutions.

Sekce : Chemické inženýrství II

## **Vliv provozních podmínek na reakce v trojcestném automobilovém katalyzátoru**

Autor: Bc. Jan Březina  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Petr Kočí, PhD.

Z důvodu neustále se zvyšujícího počtu automobilů a zpřísňujících se emisních limitů je nutné vyvíjet účinnější technologie redukující množství škodlivin ve výfukových plynech. Tato práce je zaměřená na experimenty mapující vliv hlavních provozních parametrů (teplota a složení výfukového plynu, poměr palivo:vzduch) na reakce v trojcestném automobilovém katalyzátoru. Tento typ katalyzátoru se používá zejména pro benzínové spalovací motory. Měření jsou prováděna pomocí směsi plynů simulující reálné výfukové plyny. Vzorek katalyzátoru je umístěn v přesně definovaném temperovaném reaktoru. Průběh experimentu je řízen automaticky podle předem připravené matice zadání. Pozornost je věnována nejen dosahovaným konverzím hlavních sledovaných škodlivin (CO, uhlovodíky, oxidy dusíku – NO<sub>x</sub>), ale také selektivitě reakcí. To se týká hlavně redukce NO<sub>x</sub>, kde mohou na katalyzátoru za určitých podmínek vznikat vedlejší produkty N<sub>2</sub>O a NH<sub>3</sub>. Získané znalosti jsou využívány pro další vývoj, výběr vhodného typu katalyzátoru, nastavení řídicí jednotky motoru automobilu, apod. Správné nastavení řízení pracovního režimu motoru je klíčové pro splnění emisních limitů EURO.

Sekce: Chemické inženýrství II

## **Modelování řízeného vylučování látek ze strukturovaných mikročástic**

Autor: Tereza Herinková  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Zdeněk Grof, Ph. D.

Důležitý a zároveň obtížný úkol mají vědečtí pracovníci, kteří se při své práci pohybují ve světě mikroskopických rozměrů. Tímto úkolem je dopravit určitou reaktivní nebo nestabilní látku na místo určení a zabránit dané látce, aby působila nebo podlehla svému rozkladu dříve, než se dostane na požadované místo. Jednou z možností jak toto uskutečnit je v mikročásticích dopravit na místo určení stabilní prekurzory a ve správném čase spustit chemickou reakci, jejímž produktem je požadovaná látka, a dále řídit rychlost průběhu reakce. Při návrhu mikročástice by to znamenalo experimentálně ověřit nespočet kombinací různých podmínek, za kterých tato reakce probíhá, a zvolit optimální kombinaci. Avšak ve světě výpočetní techniky to znamená pouze přepsání několika čísel, kdy zbytek práce za nás provede počítač. Vytvářený program má sloužit jako nástroj, který ukáže, jak nejlépe volit podmínky reakce, aby její průběh co nejlépe vyhovoval našim požadavkům. Pomocí matematického modelování sledujeme vliv různých parametrů (například velikost částice, teplota, difuzní koeficient) na průběh vylučování látky.

Sekce : Chemické inženýrství II

## **Detekcia fluorescenčných nanočastíc v biologických tkanivách**

Autor: Bc. Denisa Lizoňová  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, PhD.

Rakovina je jedným z ochorení rozšírených na celom svete. Len v roku 2012 na rakovinu zomrelo viac ako 8 miliónov ľudí. Súčasná liečba cytostatikami v mnohých prípadoch neodpovedá všetkým požiadavkám modernej medicíny. Je drahá a má nespočetné množstvo vedľajších účinkov (vypadávanie vlasov, ťažkosti tráviaceho traktu, nauzea a i.), pretože cytostatiká nedokážu rozpoznať rakovinné bunky od zdravých.

Veľkú nádej do oblasti liečby rakoviny vnáša myšlienka cieleného transportu liečiv- spôsobu liečby, ktorý dokáže selektívne pôsobiť na konkrétne bunky, či tkanivá. Nosiče, ktoré dopravujú liečivo priamo k nádoru a v tomto mieste budú schopné vylúčiť účinnú látku, sú aj objektom predkladanej práce. Tento prístup totiž značne znižuje množstvo nežiadúcich účinkov a zvyšuje efektivitu samotnej liečby ochorenia.

Aby nosiče- nanočastice dokázali rozpoznať rakovinnú bunku, boli modifikované špecifickou protilátkou (IgG M75), ktorá sa viaže s receptormi prítomnými na membráne tejto bunky. Pridanie fluorescenčného značenia a magnetitových nanočastíc umožňuje detekciu s využitím optických metód (konfokálna mikroskopia, fluorescenčná spektrometria) aj MRI. Práca sa zameriava na detekciu kompozitných nanočastíc v tkanivách orgánov laboratórnych myší.

Sekce : Chemické inženýrství II

## **Nebiologická chemotaxe – charakterizace systému dekanol-dekanoát-sůl**

Autor: To Quyen Nguyenová  
Ročník: B2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Jitka Čejková, PhD.

Chemotaxe je pohyb biologických systémů (hlavně buněk) ve směru chemického gradientu. Například bílé krvinky jsou schopné vyhledat nebezpečné cizorodé látky na základě chemického gradientu, který je vytvořen chemickými látkami vylučujícími se z cizorodých látek. Nedávno byl objeven systém dekanol-dekanoát-sůl, který tuto schopnost buněk simuluje (v prostředí dekanoátu se pohybuje kapka dekanolu v gradientu soli). Cílem předložené práce je tento systém charakterizovat a to z hlediska vlivu substrátu na chemotaxi a typu soli na rychlosti pohybu kapky dekanolu. Nebiologická chemotaxe je významná jako potencionální mechanismus pro cílené doručování účinných látek. V rámci práce též je ukázána možnost přepravy látek či menších objektů.

Sekce : Chemické inženýrství II

## **Mikroporézní polystyrenové pěny připravené metodou spinodální dekompozice**

Autor: Bc. Adam Rygl  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Mikroporézními pěny rozumíme takové pěny, jejichž velikost pórů je menší než 10  $\mu\text{m}$ . Podle struktury je dělíme na pěny s uzavřenými a otevřenými póry. Pěny s otevřenými póry mají potencionální využití jako nosné struktury v adsorpčních kolonách, v tkáňovém inženýrství, jako membrány v separačních procesech či zlepšené zvukové izolátory. V této práci se zabýváme přípravou mikroporézních polystyrenových (PS) pěn pomocí tepelně indukované fázové separace (spinodální dekompozicí) na aparatuře vlastní výroby. V závislosti na zvolených podmínkách lze připravovat pěny s otevřenou, částečně otevřenou či zcela uzavřenou strukturou pórů, a s póry různých velikostí, což dává velké potencionální využití v mnoha oblastech. Polymer je nejprve rozpuštěn ve vhodném rozpouštědle nad kritickou teplotou systému a v blízkosti kritického složení. Roztok je následně prudce ochlazen, v důsledku čehož dojde k fázové separaci a k zamrznutí rozpouštědla, které se odstraní lyofilizací. Systematicky jsme studovali vliv vybraných podmínek na strukturu PS pěn, kterou jsme charakterizovali rtuťovou porozimetrií a SEM. Podařilo se nám připravit pěny s porositou větší než 80 % a s póry menšími než 10  $\mu\text{m}$ . Dále byl v této práci vypracován návrh aparatury sloužící k měření bodů zákalů (bodů tvořících binodálu), která umožní další optimalizaci vypěňovacího procesu.

Sekce : Chemické inženýrství II

## **Vplyv parametrov elektrosprejovania na morfológiu a fotodegradačnú aktivitu tenkej vrstvy TiO<sub>2</sub>**

Autor: Milan Solík  
Ročník: B2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Oxid titaničitý ako netoxický biely pigment nachádza uplatnenie pri výrobe náterových farieb, plastov, papiera či kozmetiky. Tento zdanlivo obyčajný biely prášok však disponuje aj fotokatalitickými vlastnosťami, ktoré umožňujú rozklad nebezpečných látok. Fotokatalitickú aktivitu TiO<sub>2</sub> ale významne ovplyvňuje veľkosť častíc a morfológia nanosenej vrstvy, preto je treba klásť dôraz na prípravu tohto materiálu. Tu sa uplatňuje metóda elektrorozprašovania, ktorá pri nízkych investičných i prevádzkových nákladoch umožňuje jednoducho generovať submikrónové častice, ktorých depozíciou vznikajú rôzne štruktúry tenkej vrstvy.

Cieľom tejto práce bolo detailné štúdium morfológie vrstiev oxidu titaničitého produkovaných elektrosprejovaním pri rôznych depozičných podmienkach. Fotokatalitická aktivita pripravených vrstiev TiO<sub>2</sub> bola stanovená pomocou degradačných experimentov, pri ktorých boli rozkladané toxické farbivá.



Sekce : Chemické inženýrství II

## **Dynamika adheze bubliny v přítomnosti ionických surfaktantů**

Autor: Bc. Helena Suchanová  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

V mnoha průmyslových procesech se setkáváme s interakcí bublin s pevnými částicemi. Příkladem mohou být probublávané kolony, vícefázové reaktory nebo flotace, která je využívána k separaci plastů, uhlí i minerálních rud. Klíčovým krokem je zde úspěšnost adheze bubliny na pevnou částici. Adheze je výrazně ovlivněna přítomností flotačních činidel, což jsou např. pěniče nebo smáčedla. Cílem této práce je zjištění vlivu povrchově aktivních látek (surfaktantů) na proces adheze bubliny. I malé množství těchto látek významně snižuje povrchové napětí, ovlivňuje smáčení pevného povrchu a tedy i pravděpodobnost a průběh adheze. Tato práce se věnuje vlivu ionických surfaktantů, které mají na své hydrofobní části kladný nebo záporný náboj. Průběh adheze bubliny na hydrofobní povrch byl snímán vysokorychlostní kamerou a pomocí obrazové analýzy byly vyhodnoceny smáčecí úhly a průměr třífázového rozhraní. Rovněž bylo měřeno dynamické povrchové napětí. Pro oba typy surfaktantů byl pozorován významný vliv koncentrace surfaktantu a zcela atypické chování okolo kritické micelární koncentrace.

Sekce : Chemické inženýrství II

## **Charakterizace porézní katalytické vrstvy v mikroměřítku**

Autor: Marie Vyhlídková  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D

V automobilovém katalyzátoru prochází výfukové plyny soustavou paralelních kanálků na jejichž stěnách je nanášena porézní katalytická vrstva. V moderních vícevrstvých katalyzátorech může docházet k difúznímu omezení konverze reaktantů. Tato práce se zabývá detailním modelováním struktury katalytické vrstvy a určením difúzního koeficientu. Katalytická vrstva se skládá z porézních částic různé velikosti, které tvoří mezi sebou póry v řádu mikrometrů. Existuje několik možností jak tyto struktury digitalizovat (např.: SEM + rekonstrukce, TEM či CT) – všechny tyto metody jsou však velice časově a finančně náročné. Tato práce využívá matematickou simulaci formování struktury z naměřené distribuce velikosti částic a statistických deskriptorů jako jsou distribuce velikosti pórů, dvoubodová korelační funkce a lineal path function. Použité statistické deskriptory vystihují různé parametry katalytické vrstvy potřebné pro správné vyhodnocení difúzního koeficientu a jedním z úkolů práce je posoudit, které z nich jsou klíčové pro zpřesnění rekonstrukce katalytické vrstvy a tím i přesnější určení difúzního koeficientu.

Sekce : Chemické inženýrství III

## **Selektivita redukce NO<sub>x</sub> v automobilovém katalyzátoru**

Autor: Michal Janda  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Petr Kočí, PhD.

Produkty katalytické redukce NO<sub>x</sub> ve výfukových plynech automobilů jsou N<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub> a N<sub>2</sub>O. Bohatá palivová směs vede k vyšší koncentraci redukčních činidel (H<sub>2</sub>, CO, HC) a selektivě na NH<sub>3</sub>, kdežto chudá směs je charakterizována přebytkem kyslíku a vznikem N<sub>2</sub>O. Byla provedena série měření v laboratorním reaktoru při teplotách od 150° do 400° C a testována strategie pro řízení provozních podmínek tak, aby bylo dosaženo vysoké selektivity na N<sub>2</sub>.

Sekce : Chemické inženýrství III

## **Studium vlivu elektrického pole na systém dvou nemísitelných vodných fází**

Autor: Bc. Elvira Khafizova  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Ing. Michal Příbyl, PhD.

Dvoufázové systémy se segmentovaným tokem jsou v mikrofluidice využívány například pro uskutečňování chemických či biochemických reakcí nebo pro výrobu mikročástic. V mnoha aplikacích se využívá dvoufázový systém typu voda-organické rozpouštědlo, který však nebývá vhodný pro bioaplikace, například z důvodu denaturace proteinů. Řešení tohoto problému nabízí využití segmentovaného toku dvou vodných fází.

Cílem této práce je studium vlivu elektrického pole na systém dvou nemísitelných vodných fází vytvořených ze směsi tvořené polyethylenglykolem se střední molekulovou hmotností 4000 g/mol a vodným roztokem hydrogenfosforečnanu draselného a dihydrogenfosforečnanu draselného s hodnotou pH=7. Experimentálně bylo pozorováno, že malá kapka jedné fáze plovoucí na hladině fáze druhé se v přítomnosti stejnosměrného elektrického pole pohybuje. Směr pohybu lze ovlivnit polaritou elektrického pole. V této práci bude prezentována studie zabývající se závislostmi rychlosti pohybu kapky na poloze v měřící cele. Bude též vyhodnocena reprodukovatelnost experimentů a diskutován charakter získaných závislostí.

Sekce : Chemické inženýrství III

## **Characterization of hydrophobic polymeric coating produced by electrospray**

Autor: Jiří Kolář  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Hydrophobic or superhydrophobic coatings are currently intensively studied as a very attractive topic with many applications. An ability of the coated material to repel water impart anti-corrosion, anti-biofouling, anti-icing and self-cleaning properties, which are demanded not only in industrial branches but also in everyday life. Most of the nowadays available highly hydrophobic materials are based on fluorinated alkylsilanes, which exhibit both bioaccumulative and toxic properties. An alternative to these materials is polystyrene, which is cheap, nontoxic and has low polarity. The hydrophobic coatings based on polystyrene can be easily produced by electrospray, which excels in generation of small particles together with controlled layer morphology. This work was focused on preparation of hydrophobic polystyrene coatings using electrospray to study dependence of contact-angle on layer morphology. Samples of the coatings were characterized by SEM and tested to determine resistance against weather condition and mechanical deterioration.

Sekce : Chemické inženýrství III

## **Čerpání kapalných kovů na základě Lorentzovy síly v mikrofluidních zařízeních**

Autor: Petr Kovář  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: prof. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

Cílem naší práce je prozkoumat vlastnosti eutektické směsi galia a india, která je za normálních podmínek v kapalném stavu, možnosti jejího využití a použití Lorentzovy síly jako možného způsobu čerpání v mikrofluidních zařízeních. V úvodním experimentu jsme ověřili vliv působení elektřiny v magnetickém poli na chování tekutiny a potvrdily teoretické předpoklady o jejím vlivu na pohyb tekutiny. V práci jsou dále diskutovány další možnosti využití této slitiny.

Sekce : Chemické inženýrství III

## **Využití TD-NMR pro studium sorpčních procesů v polymerech**

Autor: Bc. Patrik Schneider  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polymery jsou v současnosti jedním z nejrozšířenějších druhů materiálů, a přesto stále nejsou zcela objasněny souvislosti mezi jejich strukturou a vlastnostmi (např. morfologickými, mechanickými či sorpčními). Vlastnosti polymerních materiálů jsou tak stále předmětem experimentálního studia a naším cílem je vyvíjet metody jejich měření vhodné pro praktické využití v průmyslu. V této práci jsme se zaměřili na studium sorpčních procesů v polyetylenu a polyuretanu s využitím nukleární magnetické rezonance v časové doméně (TD-NMR). Finanční nenáročnost této metody a rychlost nedestruktivní analýzy široké škály vzorků je skvělým předpokladem pro uplatnění v komerční i vědecké sféře. Tato studie se zaměřila jak na sorpci v kapalině tak i na sorpci v plynné fázi, přičemž studium sorpce plynů pomocí TD-NMR je nová a neprozkoumaná metoda, která dosud nebyla publikována v literatuře. V průběhu sorpce se mění relaxační časy jednotlivých fází v polymeru a tyto změny byly vyhodnoceny jako časové závislosti. Následným proložením těchto závislostí vhodným modelem byly odhadnuty difúzní koeficienty.

Sekce : Chemické inženýrství III

## **Příprava a charakterizace kompozitních glukonových mikročástic schopných radio-frekvenčního ohřevu**

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

Alternativou k syntetické přípravě mikročástic pro enkapsulaci a řízené uvolňování účinných látek je izolace vhodných mikročástic z přírodních zdrojů a jejich následná modifikace, která dodá materiálu další funkce a zvýší jeho atraktivitu pro následné využití. Cílem předložené práce je příprava a charakterizace kompozitních magnetických glukonové mikročástic pro řízené vylučování účinné látky „na dálkové ovládání“ pomocí radiofrekvenčního ohřevu. Glukonové mikročástice byly získané sérií izolačních kroků z kvasinek a jejich čistota byla zkoumána infračervenou spektrometrií. Takto připravené částice byly modifikovány koprecipitací solí  $\text{FeCl}_3$  a  $\text{FeCl}_2$  v zásaditém prostředí, což vedlo ke vzniku kompozitního materiálu. Za pomoci UV-Vis spektrometrie a gravimetrie byla určena koncentrace železitých iontů v připraveném materiálu. Pomocí statického rozptylu světla byla sledována distribuce velikostí částic, která byla porovnána s mikroskopií. Povrch připraveného materiálu byl zkoumán pomocí optické a skenovací elektronové mikroskopie. Účinnost radio-frekvenčního ohřevu byla vyhodnocena pomocí měření změny teploty suspenze připravených částic ve vodě. Posledně zmíněná vlastnost bude dále studována se záměrem její aplikace na dálkově ovládanou difuzi modelové látky do prostředí.

Sekce : Chemické inženýrství III

## **Nanoparticle deposition during electrospraying – Modeling of electrostatic interactions**

Autor: Anna Zítková  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Electrospraying is a method employing the electric field for the creation of nanoparticles. Sprayed particles disintegrate thanks to their high surface charge density and the evaporation of a solvent and their final size is in the range of tens of nanometers. The deposition of nanoparticles allows preparing thin films from different materials and main applications are in electro-engineering. Electrospraying is a simple and cheap method, in which morphology of the deposited layer of nanoparticles depends on voltage, temperature, distance between nozzle and substrate etc. Our model is focused on the evolution of the layer morphology. The motion of nanoparticles is controlled by electric field between charged nozzle and the grounded substrate. Local distribution of electric potential is influenced by the moving and deposited nanoparticles. Besides equations of motion we have to solve the 3D Poisson equation for electric potential in each step of the simulation and thus we obtain the actual force acting on nanoparticles. Model considers also other forces, such as van der Waals or Stokes interactions. Output of the model is the dynamic simulation of nanoparticle deposition and is employed to study how spraying conditions affect the morphology of the film.

Sekce : Chemické inženýrství III

## **Interakcia lipozómov s polyelektrolytom: Prvý krok k lipozomovému nanolegu?**

Autor: Bc. Martina Živčáková  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D

Lipozómy sú malé duté častice tvorené fosfolipodovou dvojvrstvou. Veľkosť unilamelárnych lipozómov sa pohybuje od desiatok až po stovky nanometrov. V súčasnosti sa využívajú v medicíne ako nosiče liečiv: vo vnútri môžu niesť hydrofilné aktívne látky a v ich membráne hydrofóbne látky.

V súčasnosti sú známe lipozomálne systémy, ktoré umožňujú prenášať jednu látku. Naším cieľom je vytvoriť systém tzv. „nanolega“, ktorý by nám umožnil enkapsulovať, transportovať a „doručovať“ i viac látok naraz, a za tým účelom pozostával z viacerých zložiek: lipozómov, spojiva a ďalších zložiek (napr. spúšťače, ktoré zariadia vypúšťanie aktívnej látky).

Prvým krokom k tomuto cieľu sú kompozity lipozómov s polyelektrolytom. Zvoleným systémom bol DPPG a chitosán. Veľkosť pripravených lipozómov bola 100 nm, použitý chitosán bol nízkomolekulárnej hmotnosti (Sigma 448869). Zmiešaním lipozómu a chitosánu v určitých definovaných pomeroch sme získali agregáty o stredných veľkostiach (200 nm – 20  $\mu$ m). Potom sme sledovali vylučovanie enkapsulovanej látky, konkrétne karboxyflourosceinu z týchto agregátov, študovali sme ich štruktúru pomocou konfokálnej mikroskopie a skúmali vplyv zmeny pH na ich štruktúru a stabilitu.

Sekce : Chemické inženýrství IV

## **Studium adheze kompozitních mikročastic ve 3D rozlišeném prostředí**

Autor: Bc. Jakub Dvořák  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D

Kompozitními mikročasticemi nazýváme částice tvořené více materiály s velikostí v řádu desítek mikrometrů. Většinou jsou vnitřně strukturovány ve formě jádra, obalu, nebo vnitřních kompartmentů. V současnosti se hojně využívají v mnoha aplikacích, jelikož jejich kompozitní struktura usnadňuje dosažení specifických funkcionalit, jako například schopnost biospecifické adheze, radiofrekvenčního ohřevu či termoresponzivní změně objemu. Při syntéze těchto částic je kromě samotného návrhu syntézy také podstatné studium jejich chování. V mnoha případech tato studie probíhá jen v živých organizmech a je zaměřená zejména na funkčnost získaných částic než na jejich adhezni vlastnosti, které mohou významně ovlivňovat výslednou funkcionalitu mikročastic.

Tato práce se zabývá adhezí kompozitních Alginát/SiO<sub>2</sub>/FeO<sub>x</sub> mikročastice ve 3D rozlišeném prostředí. Pro adhezni testy byly vybrány vrstvy z Akrylonitril-Butadien-Styrenu s různou vnitřní strukturou a samotná adheze byla sledována při různých průtocích za pomoci zobrazovací techniky MRI (Zobrazování pomocí magnetické rezonance). Bylo zjištěno, že částice se ve vrstvách usazují v monovrstvě podél celé vrstvy. Jejich množství závisí na rychlosti průtoku částic vrstvou a rychlosti průtoku vody na jejich odmývání.

Sekce : Chemické inženýrství IV

## **Analýza vlastností segmentovaného toku pomocí lokálního měření impedance**

Autor: Kateřina Ježková  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Jiří Lindner, Ph.D.

Segmentovaný tok je jednou z intenzivně studovaných mikrofluidních aplikací; malé rozměry průtočného kanálku umožňují vznik stabilních kapalných disperzí, kdy velikost a vzdálenost jednotlivých segmentů dispergované fáze je prakticky stejná, čehož lze s výhodou využít v řadě aplikací jako je např. příprava nanočastic definovaných vlastností.

Pro detailní popis dějů v mikrokanálku je potřeba mj. znát velikost a rychlost pohybu segmentů dispergované fáze. To lze zjistit například přímým pozorováním, pokud fáze vykazují rozdíly v absorpaci či fluorescenci, což se dá realizovat přidávkem vhodné stopovací látky. Cílem této práce je ověřit funkčnost jiné metody pro charakterizaci segmentovaného toku, a to metody založené na rozdílné impedanci fází v poli střídavého elektrického proudu. Výhodou této metody je, že je nedestruktivní a nevyžaduje průhledný mikrokanál či přidavek jiné složky. V rámci práce byl vyroben a sestaven dle dodaných návrhů mikrofluidní čip s polem zlatých mikroelektrod. Dále byla sestavena měřicí aparatura a ověřena základní funkčnost čipu, včetně měření provedeného na dvofázovém systému dvou nemísitelných kapalin se spojitou organickou fází.

Sekce : Chemické inženýrství IV

## **Štúdium evolúcie morfológie polyuretánových pien s pomocou metód matematického modelovania**

Autor: Iveta Kršková  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polyuretánové peny majú využitie v rôznych sférach priemyslu. Významné sú predovšetkým ich tepelno-izolačné vlastnosti, ktorými sa vyznačujú tvrdé peny s nízkou hustotou a uzavretými bunkami. Vypeňovanie je zložitý proces a v závislosti na výslednej štruktúre sa mechanické a izolačné vlastnosti pien významne menia. Napríklad vytekanie polyméru zo stien do stratov (miesto styku stien) je nežiadúce, pretože môže dôjsť k otvoreniu ciel prípadne až ku kolapsu celej peny. Cieľom modelovania utvárania morfológie pien je nájsť optimálne podmienky vypeňovania, aby sme dostali penu s požadovanými vlastnosťami.

V našej práci je modelovaný rast bublinky riadený difúziou plynu z polyuretánovej reakčnej zmesi, pričom dochádza k prenosu hmoty a hybnosti medzi plynnou a kvapalnou fázou. Bublinka je ohraničená polymérnym plášťom kondenzovanej fáze s určitým množstvom vopred rozpusteného plynu. Ďalší plyn vzniká v dôsledku chemickej reakcie. Viskozita polyméru reakčnej zmesi postupne rastie v dôsledku vytvrdzovacej reakcie. Výstupným parametrom je polomer vyrastenej bublinky, ktorý vypovedá o konečnej veľkosti ciel v pene. Následné vytekanie polyméru zo stien do stratov, je popísané Reynoldsovou rovnicou a dáva nám údaj o výslednej hrúbke steny.

Sekce : Chemické inženýrství IV

## **Využití metody disipativní částicové dynamiky pro modelování emulzních systémů**

Autor: Pavel Kupka  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Disperze jsou emulze dvou a více nemísitelných kapalných složek, které se objevují při výrobě mnoha produktů, např. mléčných výrobků, čokolády, plastů a kosmetických přípravků. Jejich popis je složitý a mnoho jevů ještě stále není spolehlivě objasněno. Jedním z takových jevů je koalescence. Experimentálně je velice obtížné ji pozorovat, protože probíhá mezi objekty velmi malých rozměrů. Jako užitečný nástroj pro výzkum koalescence v emulzních systémech se jeví matematické modelování.

Disipativní částicová dynamika (DPD) je stochastická simulační metoda vhodná pro simulace kapalných a plynných systémů. Metodu DPD lze využít pro simulaci široké škály problémů na meso měřítku. Velikost jedné diskretní jednotky je zhruba několik molekul jedné fáze (např. voda, olej).

V této práci jsme provedli simulaci difúzních vlastností dvojsložkové kapalně směsi. Dále jsme modelovali fázovou separaci a pohyb surfaktantů v emulzi. V oblasti difúze jsou výsledky našeho modulu ve shodě s teoretickým popisem Einsteinovou-Stokesovou rovnicí. V současné době je model DPD adaptován na simulaci tvorby micelárních struktur, koagulaci a koalescenci.

Sekce : Chemické inženýrství IV

## **Vliv porozity a distribuce velikosti pórů na difuzivitu v nanosené katalytické mikrovrstvě**

Autor: Patrik Labík  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Petr Kočí, PhD.

Porézní katalytická vrstva v automobilových katalyzátorech se připravuje nanášením suspenze částic na steny keramického monolitu. Vrstvy tlusté přes sto mikrometru mohou difúzně omezovat konverzi. Naší snahou je stanovit vliv struktury na difuzivitu plynu v této vrstvě. Práce se zabývá úpravou distribuce velikosti mikročástic nosiče katalyzátoru a jejich nanášení do tenkých vrstev tak, aby bylo možné kontrolovat tloušťku, porozitu, distribuci velikostí pórů a transportní vlastnosti katalytické vrstvy, které přímo ovlivňují konverze reaktantu. Strukturální informace o připravených vzorcích jsou stanovovány pomocí rastrovací elektronové mikroskopie, laserové difrakce, porozimetrie a chemisorpce. Výsledky poslouží pro matematické predikce difuzních koeficientů bez nutnosti přípravy katalytické vrstvy. Projekt je realizován ve spolupráci s průmyslovým partnerem Johnson Matthey se zaměřením na aplikace při oxidaci automobilových výfukových plynů.

Sekce : Chemické inženýrství IV

## **Studium kinetiky nukleace obtížně rozpustné účinné látky Dabigatran**

Autor: Marie Prajzlerová  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, PhD.

Cílem této práce bylo sledovat chování obtížně rozpustné účinné látky v roztoku. Obtížně rozpustná látka je připravena ve formě tuhé disperze, především jako glass solution, kdy je účinná látka ve formě amorfů rozdispergována v polymerní amorfni matrici, což sice zvýší její rozpustnost, ale vzniká riziko jejího přesycení a následné precipitace. Velikost zprecipitovaných částic je rozhodující v souvislosti s opětovným rozpuštěním vyniklé sraženiny. Pokud jsou částice ve velikosti desítek nanometrů, mohou se znovu rozpustit a účinná látka se tedy může v těle vstřebat. Zkoumanou účinnou látkou je Dabigatran Mesylat, patříci do 2. třídy BSC (Biopharmaceutical Classification System). Precipitace účinné látky byla dosažena pomocí pH titrace a distribuce velikost částic byla měřena pomocí Zetasizeru fungujícího na principu dynamického rozptylu světla. Byl zkoumán vliv dvou různých polymerů, Kollidonu a Soluplusu, na inhibici precipitace a také vliv na velikost částic precipitátu při různém poměru účinné látky a polymeru. Výsledkem práce je zjištění, že polymer Soluplus zvládne v kombinaci s Dabigatranem tvořit částice do 100nm, kdy Soluplusu musí být alespoň 7:1 vůči Dabigatranu, zatímco s Kollidonom byly částice v řádech stovek nanometrů a naopak, při vyšších koncentracích polymeru vzhledem k Dabigatranu částice neustále rostly.



Sekce : Chemické inženýrství IV

## **Tisková hlava 3D tiskárny pro vytlačování roztavených plastů**

Autor: Bc. Alexandr Romanov  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: prof. Ing. Šnita Dalimil, CSc.

Tato práce je zaměřena na stadium tiskové hlavy 3D tiskárny (extruder). Extruder byl odpojen z 3D tiskárny BFB-3000 a připojen na stojan pro další výzkum. Studium je zaměřeno na pozorování vytlačování roztavených plastů z tiskové hlavy. Jedním z cílů práce byla možnost provést ovládání rychlosti vytlačování materiálů a nastavení teploty trysky.

Tisková hlava byla připojena k počítači a řízena programem MATLAB. Pomocí programu byla nastavena vhodná rychlost otáčení motoru pro pohyb materiálu. Teplota trysky je regulovaná pomocí regulátoru teploty. Výsledkem práce byly mimo jiné snímky kamery vytlačovaného materiálu při různých nastavených teplotách trysky a rychlosti motoru.

Sekce : Chemické inženýrství IV

## **Regenerace zinku pro palivové články zinek-vzduch – vliv transportních podmínek**

Autor: Bc. Ivo Šnajdr  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D.

V posledních letech roste poptávka po vysokokapacitních mobilních úložištích elektrické energie pro použití v elektromobilech. Zatím se využívají lithiové baterie a postupně se začínají uplatňovat i palivové články. Nejvýznamněji je studován článek vodíkový, jenž ale kvůli nízké účinnosti a vysokým nákladům na jeho konstrukci není ekonomicky atraktivní. Alternativou k vodíkovému článku je palivový článek zinek-vzduch. Zde jako palivo slouží levný a dostupný zinek, který se za přítomnosti vzdušného kyslíku oxiduje na anodě za vzniku oxidu zinečnatého. Energetická náročnost regenerace (redukce  $Zn^{2+}$  na  $Zn^0$ ) významně určuje celkovou energetickou účinnost ukládání energie do zinku. Z předcházející studie se jeví alkalická elektrolyza jako nejúčinnější metoda pro regeneraci zinku s energetickou účinností jednoho cyklu dosahující až 48%.

Cílem této práce je detailní studium redukce zinku. Práce se zaměřuje na pochopení vlivů transportních podmínek na morfologii deponovaného zinku, neboť za různých podmínek depozice tvoří zinek odlišné struktury. Tvar deponovaných struktur hraje důležitou roli při následném zpracování a ovlivňuje vybíjecí vlastnosti palivového článku. Získané informace budou zásadní pro návrh laboratorní jednotky elektrolyzéry.

Sekce : Chemické inženýrství V

## **Softening of polyethylene: effect of molecular weight and polymer density**

Autor: Aleš Ďuriš  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polymer softening is a process which contributes to the reactor wall sheeting in the manufacturing process of polymers. Sheetting poses a big problem in fluidized bed reactors in which polymers are produced, since it can lead to the shut-down of the reactor, which is connected with large economic losses. It is therefore important to identify conditions at which the softening will not occur. In this contribution, the theory behind the softening process is discussed, as well as the expected results. We present the experimental method which is used to measure the softening temperature along with the apparatus used for the experiments. We measured the softening of polyethylene samples with different molecular weights and polymer densities in the atmosphere of air, under the pressure of 1 bar. Samples in several groups with similar densities were compared. We observed the increase of the softening temperature with increasing molecular weight and with increasing crystallinity. These results are in agreement with our theoretical expectations. Alternative means of data evaluation were also critically evaluated in order to find potentially more suitable methods of data interpretation.

Sekce : Chemické inženýrství V

## **Srovnávací studie metod přípravy alginátových mikročastic s ohledem na miniaturizaci**

Autor: Bc. Damian Gorný  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D

Technologie InkJet je metoda, která dokáže pomocí tiskové hlavy s vysokou frekvencí generovat mikroskopické kapičky, z nichž je následně iontovou gelací možné vytvořit mikročástice. Cíl práce spočívá ve srovnání dvou tiskových hlav s kapilárami o průměru 80  $\mu\text{m}$  a 20  $\mu\text{m}$  a nalezení spodního limitu velikosti částic, které lze těmito tiskovými hlavami ještě spolehlivě produkovat. Byla provedena studie vlivu klíčových procesních parametrů (např. tlak, napětí) a vlastností tisknuté kapaliny (povrchové napětí, viskozita) na proces tvorby kapiček a na velikost a tvar výsledných mikročastic. Jako vstupní roztok byl použit 1% roztok alginátu sodného, který byl pro menší tiskovou hlavu upravován fotolýzou (UV záření +  $\text{TiO}_2$  katalyzátor), čímž došlo v závislosti na délce osvitů ke zkrácení řetězců alginátu a tím pádem ke snížení viskozity při zachování celkové koncentrace, jež je nutná pro zachování mechanických vlastností výsledných gelových částic. Dále se práce zabývá možnostmi, jak dosáhnout menších částic například použitím laseru v aparatuře a odparem části rozpouštědla za letu.

Sekce : Chemické inženýrství V

## **Experimentální studie difúze ethylenu v polyethylenu za reálných průmyslových podmínek**

Autor: Bc. Kateřina Haškovcová  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polyethylen (PE) je jednou z nejvýznamnějších komodit současného chemického průmyslu. Znalost difuzivity monomeru v PE je velice důležitá při jeho výrobě (ovlivňuje rychlost polymerace) a také při následném odplynění reziduálního monomeru, což je krok významný z hlediska bezpečnosti. V naší laboratoři měříme difuzivitu pomocí aparatury „pressure-decay“, která je založena na měření časového vývoje tlaku po jeho skokové změně. V rámci této práce byly studovány kompaktní filmy i porézní částice PE s různými vlastnostmi a pro vyhodnocení difuzních koeficientů byla vyvinuta komplexní metoda, která mimo jiné zahrnuje bobtnání a teplotní roztažnost polymeru. Výsledky této práce shrnují vliv morfologie PE, teploty a tlaku (resp. koncentrace) na transport ethylenu v PE. Naměřené difúzní koeficienty korespondují s daty z literatury a též s předchozími výsledky z naší výzkumné skupiny. Pozorované trendy pak souhlasí s teoretickými předpoklady. Všechny experimenty byly provedeny za průmyslově relevantních podmínek, takže naměřená data jsou přímo využitelná pro optimalizaci stávajících nebo návrh nových výrobních procesů.

Sekce : Chemické inženýrství V

## **Příprava mikrostrukturovaných agregátů pro in situ produkci nestabilních látek rozprašovacím sušením**

Autor: Vojtěch Klimša  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, PhD.

Jedním z problémů současné farmacie je neefektivnost doručení aktivní látky z důvodu vysokého naředění během transportu spojené s vysokou reaktivitou a krátkým poločasem rozpadu. Cílem této práce je překonat tento problém a navrhnout způsob, jak produkovat účinnou látku v dostatečném množství a kontrolovaným způsobem in situ, tj. přímo na místě určení z neaktivního prekursoru. Jako modelový systém pro realizaci konceptu "laboratoř v částici" (angl. Lab-in-a-particle) byl zvolen systém enzym-substrát, kdy je enzym (lakáza) imobilizován v jednom typu mikro-nosičů a substrát (ABTS) v druhém typu, lišícím se povrchovým nábojem. Řízenou agregací těchto dvou typů nosičů v roztoku pak lze poskládat výsledný mikročasticový reaktor. Pro tvorbu částic byly zvoleny bio-polymery alginát sodný a chitosan a pro enkapsulaci metoda rozprašovacího sušení nekonvenční třífázovou tryskou. Objektem prezentované práce je experimentální studie, mapující vliv procesních parametrů na strukturu a stabilitu připravených mikročastic, specifickou aktivitu imobilizovaného enzymu, rychlost tvorby a charakter aglomerátů v závislosti na pH, iontové síle roztoku a poměru použitých částic.

Sekce : Chemické inženýrství V

## **Termodynamické chování polyetylenu v plynných a kapalných médiích**

Autor: Lenka Krajáková  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Roční produkce polyetylenu (PE) je téměř 100 Mt. Při výrobě PE hrají významnou roli jeho termodynamické vlastnosti, které jsou úzce spjaty se semi-krystalickou strukturou. Kinetika polymerace i následného odplynění výrazně závisí na sorpci monomerů a dalších nízkomolekulárních látek a jejich difúzi přes vrstvu vznikajícího polymeru, přičemž sorpčně-difúzní děje probíhají pouze v amorfní fázi semi-krystalického polymeru. Pro vyhodnocení rozpustnosti a difúze látek v PE je nutno změřit nabobtnalý objem částice, který ovlivňuje difúzní dráhu či vztahovou sílu při gravimetrických měřeních. Proto byly vedle sorpčních měření prováděny za pomoci video-mikroskopie v tlakové cele také bobtnací experimenty, jejichž výstupem je vývoj velikosti částice PE v závislosti na tlaku penetrantů. V uplynulých letech byla naměřena sorpční data pro plynné penetranty, ale až doposud chybí jakákoliv relevantní data o sorpci kapalných penetrantů do PE, která jsou zásadně důležitá pro průmyslové „slurry“ polymerace. V práci představujeme nově vyvinutou a optimalizovanou metodiku měření a vyhodnocení sorpčních, difúzních a bobtnacích experimentů v systému PE-kapalina. Současně představíme prvotní výsledky měření využitelné nejen pro publikaci, ale také pro procesní model spolupracujícího výrobce polyolefinů.

Sekce : Chemické inženýrství V

## **Hoření těkavých kapalin – experiment a modelování**

Autor: Bc. Eva Roučková  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Těkavé kapaliny jsou častou příčinou lokálních požárů jak menších rozměrů v domácnostech, chemických laboratořích, dopravních prostředcích, tak i velkorozměrových v průmyslové sféře. Nebezpečnost hořlavých kapalin zvyšuje jejich snadná dostupnost například ve formě pohonných látek (benzín, nafta), kapalných organických čisticích prostředků, ředidel a rozpouštědel. V bezpečnostním inženýrství se v současné době stále více využívají matematické modely požárů (počítačové simulace) pro odhad chování požárů jednak z důvodu prevence a jednak při vyšetřování příčin požárů. Předkládaná práce se zabývá zjištěním rychlosti hoření těkavé látky a teploty v okolí plamene jak experimentálně, tak pomocí CFD modelu řešeném v simulačním programu FDS6. Byla zjištěna dobrá shoda všech parametrů mezi experimentem a modelem.

Sekce : Chemické inženýrství V

## **Příprava a charakterizace mezoporézních katalyzátorů**

Autor: Matěj Slavíček  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Porézní materiály nacházejí široké využití jako nosiče katalyzátorů, dále také v cílené dopravě léčiv a obrazové analýze. Materiály MCM-41 a SBA-15 na bázi siliky (porézní  $\text{SiO}_2$ ) mají dlouhé, rovnoběžné, válcové póry s velmi úzkou distribucí velikostí pórů a pravidelným uspořádáním, proto se používají jako vhodný studijní materiál. Při jejich přípravě vznikají póry v podobě micel tvořených polymerem a surfaktantem, které jsou následně odstraněny. Velikost pórů (micel) jsme kontrolovaně upravovali v rozmezí 3 až 12 nm, abychom zjistili, jaký vliv má velikost póru na velikost krystalu katalytického kovu. Kovový nikl v pórech jsme připravili impregnací, sušením, kalcinací a redukcí. Rentgenovou difrakcí a transmisí elektronovou mikroskopií byla sledována velikost a tvar krystalů niklu. Velikost krystalů se ve většině případů zvětšovala s rostoucí velikostí pórů.

Sekce : Chemické inženýrství V

## **Metodika určování konstant elektrochemických reakcí pro matematický model**

Autor: Bc. Viktor Vodrážka  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemického inženýrství  
Školitel: doc. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Elektrochemické reakce jsou matematicky dobře popsány pro makroskopické systémy pomocí Nernstovy a Butler-Volmerovy kinetiky elektrochemických reakcí. Při použití mikroelektrod nejsou tyto popisy ovšem zcela přesné. Tato práce se zaměřuje na experimentální měření jednoduché elektrochemické reakce v roztoku  $\text{K}_2\text{SO}_4$  na zlatých mikroelektrodách a vytvoření matematického modelu, který by kinetiku této reakce popsal. K vytvoření takového modelu je nutno pochopit probíhající děje na povrchu mikroelektrod a matematicky je popsat. Pak může být model využit k určení odpovídajících konstant dané reakce, které jsou důležité pro další studium probíhajících dějů. Dále může být tento model využit k popisu pohybu elektroaktivních částic v roztocích při elektrochemických dějích, jako je například elektroforéza, elektroosmóza.