

Sekce: **Chemical Engineering I (B139)**

Komise:

prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Ing. Jonáš Rejl, Ph.D.

Ing. Ondřej Kareš

Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Ing. Jiří Schöngut, CSc. (Unipetrol)

1	Tommaso Arduini	Measurement of $k_L a$ in pilot-plant stirred vessels
2	Aliye Hazal Koyuncu	Synthesis and Characterization of SiO_2 Nanoparticles Using Microfluidics
3	Gerson Martinez	Dynamic behaviour of Urea-Urease system in a membrane reactor
4	Mária Minichová	Density functional theory as a tool for a calculation of l-g interface properties
5	Boleslav Zahradník	Effect of shell thickness on the properties of fractal aggregates created by physical locking
6	Adam Waněk	Manufacturing of tablets containing two APIs by FDM 3D printing
7	Erik Sonntag	Dissolution Kinetics of Poorly Soluble Injectable Suspension
8	Tereza Bautkinová	Preparation of graphene/polyaniline nanocomposites

Measurement of k_La in pilot-plant stirred vessels

Autor: Bc. Tommaso Arduini
Ročník: M2
Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Fermentation is a unit operation based on mass transfer from a gas phase to a liquid one. So, one key parameter required to study of this process is the volumetric mass transport coefficient. It is possible to calculate it with empirical correlation, based on geometrical and physical characteristics of the system considered. In order to create this kind of correlations, several measurements are required: a pilot-plant vessel was used for this purpose. Data for two and three impellers in different type combination, also with different diameters on the common shaft, was taken in order to guarantee a large validity range of the results. Usually, k_La correlations are based on gassed power input and superficial gas velocity. We tested several correlation types, evaluated their empirical parameters and proposed the correlation shapes suitable for fermenter design, operating and scale-up. The difference between the measured k_La and the predicted one with a correlation is expressed through the standard deviation. In particular this correlation show the lowest standard deviation: $k_La = 0,0055 \cdot (P/V)^{0,7073} \cdot v_s^{0,4748}$ (1); SD = 28,9 %. The Figure 1 below shows the difference between the measured values and the predicted one: Figure 1: Comparison of measured and predicted k_La for correlation 1.

Synthesis and Characterization of SiO_2 Nanoparticles Using Microfluidics

Autor: Aliye Hazal Koyuncu
Ročník: M1
Školitel: Ing. Viola Tokarová, Ph.D.

In recent years, there has been increasing demand for using nanoparticles in biomedical studies. These applications can only be successful with a high degree of control over the process parameters. Nucleation phase and growth of nanoparticles, desired size distribution of particles and their morphology are main objectives of a synthesis process. For further use of nanocarriers towards targeted cells or tissue, the surface modification of nanoparticles is the next step. The aim of this work is the production of uniform silica nanoparticles by the continuous microfluidic system. Silica nanoparticles are produced based on Stöber process in a microchip prepared from PDMS (Polydimethylsiloxane) by a standard soft lithography method. The dispersed phase of the system forms ethanol with reagents (ammonia and TEOS) and the continuous phase is fluorinated oil FC-40. The surface of all microfluidic channels is modified with a silanizing agent (1H,1H,2H,2H-perfluorodecylsilane). Final particle size and morphology are analysed using SEM (Scanning Electron Microscope), TEM (Transmission Electron Microscope) and DLS (Dynamic Light Scattering) are used.

Dynamic behaviour of Urea-Urease system in a membrane reactor

Autor: Gerson Martinez
Ročník: B3
Školitel: Ing. František Muzika, Ph.D.

The objective of this research is to assess the pH dynamic behaviour of Urea-Urease system in a membrane reactor by varying pH of stock solutions, flow rate and concentrations of urea and urease solutions. The urease performs enzyme-catalyzed hydrolysis of urea under acidic conditions to yield ammonia and CO₂. The membrane reactor consists of the main reactor, where the urease with specific pH is fed and the flow-through reservoir, where urea with specific pH is fed. Both the reactor and reservoir were coupled via dialysis membrane Spectra/Por 7 MWCO:1000, both the reactor and reservoir were stirred at 1050 rpm, the pH was monitored using a pH electrode immersed in the reactor part. The system was closed to the atmosphere. According to work of Bánsági, Jr. et al., (2014), J. Phys. Chem. B 118, 6092-6097, pH oscillations can occur in a membrane system loaded with urease when ratio of permeances of H⁺ ions and urea is between 3.3 and 20 towards the H⁺ ions. Our measurement shows the membrane have unequal permeances for both H⁺ and urea, the ratio is 2.7 towards the H⁺ ions. Parameter space has been mapped by marking multiple stationary states and oscillatory regions. pH oscillatory behavior has been found with the difference between minima and maxima ~1.2 pH units.

Density functional theory as a tool for a calculation of l-g interface properties

Autor: Bc. Mária Minichová
Ročník: M2
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Interfacial properties can be often difficult to measure. An alternative approach is to derive all missing information about interfaces from thermodynamics in a self-consistent manner. Density functional theory (DFT) is a powerful tool enabling to calculate thermodynamic properties. The theory works with energy functionals of density functions distributed along spatial coordinate(s). Subsequent minimization of this functionals lead to finding the density profiles which are starting points towards physical properties of systems such as surface tension, etc. In this work we simplified the description of one-component system with (l)-(g) interface as a spatially one-dimensional problem employing Van der Waals equation. DFT was applied to the mentioned system in order to find density profiles. Further steps involved numerical solution of boundary value problem for the nonlinear second order differential equation. As this work is a familiarization with the DFT theory the next step will be a closer approach to real systems and thus a three-dimensional model with a more accurate description of state behaviour of two-component systems to find desired interface properties and thus to participate in a building of the self-consistent model for foaming and other applications.

Effect of shell thickness on the properties of fractal aggregates created by physical locking

Autor: Bc. Boleslav Zahradník
Ročník: M2
Školitel: doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

In this work, porous microparticles, so called microclusters, were prepared by aggregation of polymeric primary particles under completely destabilized conditions. The polymeric nanoparticles have core-shell structure, where the core is formed by highly crosslinked polymethyl methacrylate and the shell is formed by mixture of polymethyl methacrylate and polybutylacrylate, resulting in different mechanical properties of core and shell. The soft character of the shell increases the adhesion of the nanoparticles, resulting in variable mechanical strength of formed microcluster. Main goal of this work was to investigate impact of operating conditions on the mechanical properties of these microclusters. Parameters included in the work are temperature, stirring speed and shell thickness. Analysis of the microcluster properties was done by static light scattering. Creating of microclusters by physical locking method over the chemical polymerization method has several advantages like reduction of aggregation time, reduction of the need to use chemicals and higher flexibility of the process.

Manufacturing of tablets containing two APIs by FDM 3D printing

Autor: Adam Waněk
Ročník: B3
Školitel: Ing. Matěj Novák

3D printing is nowadays fast-growing sector with high perspective in pharmaceutical industry. Large number of pharmaceutical companies is trying to enlarge their traditional ways of producing drugs with techniques based on 3D printing, especially FDM 3D printing (Fused deposition modeling). First achievements were already reached and the first 3D printed drug called Spiritam is available in the USA. The goal of this work is to print tablets by commercial FDM printer that will contain two active pharmaceutical ingredients (APIs). Main advantage of such tablet is dissolution kinetic controlled by designed porosity and internal surface area of the tablet. The spatial concentration of the API in the tablet is also well defined according to required treatment. As a printing material, the FDM 3D printers use filaments that are produced by hot-melt extrusion technique. Mixture of carrier polymers, API and plasticizers were melted together in nozzle of an extruder to produce homogenous filament. Filaments were analyzed and results were compared with fully printable referent filament (obtained from previous project). In the final step two filaments (containing different API) will be used to print a tablet according to model designed in AutoCAD software.

Dissolution Kinetics of Poorly Soluble Injectable Suspension

Autor: Bc. Erik Sonntag
Ročník: M1
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Sustained release injectable suspensions (also called “nanoparticle depot systems”) are relatively new phenomenon in clinical practice. Compare to the conventional treatment methods, these dosage forms provide a number of benefits such as: lower frequency of administration, blood level remains within therapeutic range, etc. These suspensions may be administered in the form of a poorly soluble drug and the release time of the Active Pharmaceutical Ingredient (API) of such medication is dependent on the particle size and the specific surface area of drug particles. The conversion from the insoluble drug to the soluble API occurs through natural mechanisms of the human body (enzymatic hydrolysis). In drug development, it is very important to have reliable method how to evaluate drug dissolution profile in in vitro conditions before clinical trials on animals and humans. For this purpose we have developed a dissolution method that can provide the data of dissolution kinetics. Within this method a parametric study on the laboratory mill was carried out that allows us to prepare suspensions of defined particle size distribution, two analytical methods (HPLC and LC-MS) to determine concentration of API and prodrug were created and a sample preparation procedure was designed.

Preparation of graphene/polyaniline nanocomposites

Autor: Tereza Bautkinová
Ročník: B3
Školitel: Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Graphene has received considerable attention in recent years due to its remarkable thermal, electrical and mechanical properties. Its large surface-to volume ratio makes it a promising option as a filler for polymers. But synthesis of true monolayer graphene provides considerable challenges and can also be extremely costly, therefore an oxidised derivative of graphene - graphene oxide, has attracted attention due to its relative ease of preparation. The functionalities (like hydroxyl, carboxyl, carbonyl and epoxy) also support the uniform distribution of rGO nanosheets in a polymer matrix. Polyaniline is perhaps the most extensively studied conductive polymer due to its relatively simple synthesis, environmental stability, economic viability and its chemical, electrical and optical properties. Combining the excellent properties of graphene with the advantages of polyaniline aims to improve many of the properties of the resulting composite material which might find variable applications for example in supercapacitors, flexible sensors or materials for CO₂ capture.

Sekce: **Chemical Engineering II (B141b)**

Komise:

doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.
Sandra Kordač Orvalho, Ph.D. (UCHP CAS)
Ing. Pavel Ferkl
Ing. Matěj Novák
Ing. David Smrčka (Zentiva)
Ing. Petr Matuška (MSD)

1	Ivana Pivarníková	Synthesis of magnetic nanoparticles for remotely controlled PCR reaction
2	Jan Haša	Pseudo-peptide Grafted Magnetic Nanoparticles
3	Suada Dukaj	Particle Size Effect on Release Kinetics of Drug From Suspension
4	Vladimír Němec	Effect of granulation process parameters on the dissolution of IBU-lactose formulations
5	David Zůza	Design of micro-reaction apparatus for continuous synthesis of silica particles
6	Sarah Akhlasová	Retardation of API dissolution by formulation approaches
7	Jakub Mužík	In situ drug amorphisation by microwave irradiation stabilized by mesoporous silica
8	Vojtěch Klimša	Continuous spray drying with variable inlet formulation - design and optimization

Synthesis of magnetic nanoparticles for remotely controlled PCR reaction

Autor: Bc. Ivana Pivarníková
Ročník: M2
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Owing to their exceptional properties, magnetic iron oxide nanoparticles (MIONs) serve promising applications in molecular biology and biomedical research. Currently, one of the objectives is to investigate the conjugation of MIONs with nucleic acid molecules (DNA/RNA). Such systems can be significant for progress in applications including detecting molecules at very low concentrations or manipulation and targeting by external magnetic field. One of the important techniques in molecular biology is the polymerase chain reaction (PCR), which allows in vitro reproduction and amplification of DNA sequences using DNA polymerase. The combination of MIONs with PCR can have beneficial but also inhibitory effect on the reaction. MIONs are widely used due to their low toxicity, physicochemical stability and ease of preparation. In presented work, dextran coated MIONs were prepared by co-precipitation method and characterized by Dynamic Light Scattering, Transmission Electron Microscopy and Fourier Transform Infrared Spectroscopy. Their heating properties were measured by Radio Frequency heating (RF). Finally, MIONs were used in PCR reaction to define the conditions for an effective PCR in the presence of MIONs and regulate the temperature cycles for PCR by RF heating.

Pseudo-peptide Grafted Magnetic Nanoparticles

Autor: Bc. Jan Haša
Ročník: M1
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

One of the recent challenges drug delivery systems are fronting is endosomal escape which can be prevented by co-delivery of endosomolytic pseudo-peptidic polymers. Co-delivery can be facilitated via various means such as loading the polymer directly inside a carrier or grafting the polymer on the surface of the delivery system components. Our focus turned to magnetic nanoparticles which can be employed in drug delivery systems as carriers, release triggers, contrast agent in magnetic resonance or for navigating the drug delivery system by magnetic field. In this work, a method of preparation of magnetic nanoparticles grafted with endosomolytic PP75 is described. Firstly, the surface chemistry that facilitates the grafting was studied and a standard operating protocol was optimized. The influence of the preparation method on the size distribution, colloidal stability, zeta-potential and pH responsiveness of the particles was studied.

Particle Size Effect on Release Kinetics of Drug From Suspension

Autor: Suada Dukaj
Ročník: M2
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Intramuscular depot formulations are considered as a way of providing constant plasma levels of a drug over extended periods of time and improving patient compliance. The principle of a depot formulation in the form of a suspension is based on the intramuscular injection of a poorly water-soluble drug, whereby the particles gradually dissolve and release the drug into systemic circulation. One of the modalities to improve the efficiency of a sustain release injectable suspensions of a poorly soluble drug into systematic circulation is to control the particle size distribution of the formulation. It is the main key parameter which controls the kinetic release of a drug delivery system. The aim of the present study is to investigate the properties of different size fractions in order to delineate how particle size governs the release profile. In order to describe the behaviour of single particle in drug dissolution, Noyes – Whitney equation was used to develop a mathematical model. This model will be used to extend the prediction of mono particle size class and later for the whole particle size distribution for understanding the mechanism and designing of drug release particles.

Effect of granulation process parameters on the dissolution of IBU-lactose formulations

Autor: Vladimír Němec
Ročník: B3
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

The aim of the study is to create a method, which allows the processing of a powder mixture of ibuprofen and lactose by high shear granulation in a laboratory scale granulator. Mapping of the parametric space and optimization of the granulation process are two crucial points, thus various experimental set-ups will be examined (i.e. batch volumes and different impeller speed). Granules will be prepared from different size fractions of ibuprofen and lactose. Powders for granulation will be prepared by sieving and the chosen fractions will be used for the size effect study. The produced granulate will be characterized by measuring particle size distribution, liquid to solid ratio necessary for achieving a properly granulated batch, and granule strength. The granulated powders will serve as a material for a further study of granule microstructure, content uniformity, dissolution and tableting.

Design of micro-reaction apparatus for continuous synthesis of silica particles

Autor: David Zůza
Ročník: B3
Školitel: Ing. Tokárová Viola, PhD.

Silica particles are subject of intense research in the last 20 years especially, because they are thermally and chemically stable and can be prepared in various shapes and sizes with a porous structure. One of the possible utilizations is their use as drug carriers for an oral drug delivery where some variants are FDA approved. However, usual batch preparation methods of silica with high porosities usually lead to polydispersity of final particles. Transferring the synthesis into a flow-through device with higher control over hydrodynamic conditions could lower the polydispersity and provide a continuous production process. This can be done using a CSTR, a plug-flow reactor or even a microfluidic chip. However, it is necessary to take into account a wide spectrum of parameters that needs to be set, such as reaction stoichiometry, reaction time and hydrodynamic conditions. In this work, a system for continuous preparation of silica microparticles with high porosity (800 m²/g) is designed and tested. After considering all aspects described above, several reactor designs are proposed and 3D printed from ABS. Synthesized silica microparticle in purposefully-designed reactors are characterized by optical microscopy, scanning electron microscopy and static light scattering.

Retardation of API dissolution by formulation approaches

Autor: Bc. Sarah Akhlasová
Ročník: M1
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

The goal of generic pharmaceutical development is a production of dosage form bioequivalent with original drug product. Mostly, alternative solid form (polymorph or amorphous form) of active pharmaceutical ingredient (API) is used, due to the patent protection of the original. Various solid forms differ in physical - chemical properties, e.g. in dissolution behavior of API, which is one of the most important properties of the drug product. Fast API dissolution can lead to the failure of the developed prototype in bioequivalence study and moreover endanger patient safety. Thus, there is a need to retard the dissolution rate of API, if chosen API solid form has faster dissolution than is required. In this work, the retardation is done by appropriate formulation of the drug product. Polymers with promising properties for retardation were chosen and simulation of wet granulation with API in small scale, followed by the dissolution of granulates to study polymers capability of retardation was performed. Later, various technologies of manufacturing of drug product – direct compression, roller compaction, high-shear and fluid bed granulation were studied to determine the impact of the technology on the retardation. So far, some of the polymers showed the retardation of API dissolution.

In situ drug amorphisation by microwave irradiation stabilized by mesoporous silica

Autor: Bc. Jakub Mužík
Ročník: M2
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

A common issue in the pharmaceutical industry is low solubility and dissolution rate of Active Pharmaceutical Ingredients (APIs). The dissolution rate might be significantly enhanced by changing state of the matter from crystalline to amorphous one. Carriers or stabiliser such as polymer or porous materials, which can absorb or lock the molecules of API in its structure, are used to keep amorphous state of the API. Powders composed from ibuprofen as model API and mesoporous silica micro-particles as a carrier were experimentally investigated for in situ amorphization of ibuprofen by microwave (MW) radiation. As a source of microwaves commercially available MW oven was used and characterized. The MW power input and composition of the tablets (excipients/ibuprofen) were tested with respect to the melting point of ibuprofen (78°C). The changes of the crystalline structure before and after MW treatment were analysed by X-Ray Diffractometry (XRD) and Differential Scanning Calorimetry (DSC). Dissolution profiles of samples were evaluated by HPLC. Scanning electron and optical microscopy were used for the particle structure characterization. For further scale-up fabrication a fluid amorphizator was constructed and experimentally tested.

Continuous spray drying with variable inlet formulation - design and optimization

Autor: Bc. Vojtěch Klimša
Ročník: M2
Školitel: Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

Spray drying is one of the most known unit operations for the production of powder materials and because of short contact times also one of least likely to damage heat-sensitive components. Therefore, it is widely used in pharmaceutical and food industry. The focus of this study is to design and optimize a system that converts conventional batch-wise spray drying operation into continuous one with the minimal risk of product cross-contamination. The proposed set-up allows time-efficient screening of products with various composition. For this task, a custom designed valve was developed along with a procedure allowing effective cleaning of separation cyclone during the run. Finally, the experiment was carried out to demonstrate the feasibility of modification and degree of cross-contamination across all sample fractions.

Sekce: **Chemické inženýrství I (BS9)**

Komise:

doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.
Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.
Ing. Mária Zedníková, Ph.D. (UCHP CAS)
Ing. Lenka Krajáková
Ing. Marek Šoltys
Ing. Jiří Čech, Ph.D. (Škoda Auto)
Bc. Peter Urbánek (Denwell)
Mgr. Tomáš Chaloupka

1	David Tichý	Předkoncentrace a separace v mikrofluidním čipu s gradientem elektrického pole
2	Jakub Strnad	Elektrochemická charakterizace homogenních iontově-výměnných membrán
3	Ondřej Navrátil	Manufacturability of core-shell particles made by alginate encapsulation
4	Petr Jelínek	Příprava zlatých nanočástic a jejich agregátů
5	Michaela Mikešová	Metodika stanovení složení elektrolytu vanadové průtočné baterie
6	Ondřej Dupal	Vliv elektrického pole na rovnovážné koeficienty v systémech dvou nemísitelných vodných fází
7	Martin Bureš	Modelování transportních procesů v kation-výměnných membránách pro vanadové redoxní průtočné baterie
8	Patrik Bouřa	Příprava a charakterizace nových mikrocelulárních polymerních pěn

Předkoncentrace a separace v mikrofluidním čipu s gradientem elektrického pole

Autor: David Tichý
Ročník: B3
Školitel: doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Mikrofluidní zařízení nachází v poslední době široké uplatnění v oblasti point-of-care diagnostiky, tedy při konstrukci kompaktních diagnostických přístrojů pro domácí použití, bez nutnosti laboratorního zázemí. Mezi zmíněné nástroje patří například přenosné glukózoové nebo těhotenské testy. Tato práce se zaměřuje na konstrukci elektrokinetického mikrofluidního zařízení vhodného pro předkoncentraci a separaci biomolekul a zkoumá jeho vlastnosti. K předkoncentraci dochází v průtočném mikrofluidním kanálku díky aplikaci elektrického pole s nelineárním profilem zajištěným dvěma iontovými membránami. Místo předkoncentrace záporně nabitých biomolekul je kontrolováno vloženým napětím a použitým průtokem. Testy byly provedeny s molekulami fluoresceinu, jejichž roztok byl 20 minut pumpován do mikrofluidního čipu a byla zaznamenávána poloha a tvar vzniklého předkoncentrovaného pásu. Byl zkoumán vliv rozdílných hodnot průtoků a aplikovaného napětí na pozici a tvar vytvořeného zakoncentrovaného pásu. Tyto parametry byly porovnány pro tři různé geometrie použitého kanálku, dva kónické a jeden rovnoběžný.

Elektrochemická charakterizace homogenních iontově-výměnných membrán

Autor: Jakub Strnad
Ročník: B3
Školitel: doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Homogenní iontově-výměnné membrány se používají v elektrodialyzérech jako permselectivní médium zajišťující vlastní požadovanou separaci iontů v elektrickém poli. Při porovnání s heterogenními iontově-výměnnými membránami, které obsahují značné množství iontově nevodivého materiálu, jsou homogenní membrány tvořeny pouze iontově selektivním materiálem a tedy obecně vykazují lepší separační vlastnosti ovšem často na úkor mechanické a chemické stability. V našem projektu se zaměřujeme na pochopení základních rozdílů v chování homogenních a heterogenních iontově výměnných membrán v elektrickém poli. Jedním ze zásadních pozorovaných rozdílů je jejich odlišná reakce na přítomnost nabitých biopolymerů, které způsobují zanášení membrán. V této experimentální práci provádíme chronopotenciometrickou charakterizaci membrán, která umožňuje studovat časový vývoj napětí na membráně při konstantním vloženém elektrickém proudu. Z naměřených dat se poté vyhodnocují tzv. transientní časy, které se porovnávají s teorií založenou na Sandově rovnici. Ta umožňuje odhadnout množství mikroheterogenní membrány, což je podíl membrány, která aktivně nepřispívá k vlastnímu odsolení. Tento příspěvek bude zaměřen na prezentaci experimentálních dat a diskuzi získaných výsledků.

Manufacturability of core-shell particles made by alginate encapsulation

Autor: Ondřej Navrátil
Ročník: B3
Školitel: Ing. Aleš Zadrazil, Ph.D.

Moderní lékové formy s cíleným uvolňováním umožňují efektivnější využití účinné látky v organismu, kdy je látka uvolněna pouze v žádaném místě účinku a tím jsou minimalizovány nežádoucí systémové účinky. Tyto formy výrazně snižují množství použitých materiálů, neboť minimalizují ztráty vzniklé ve vnitřních procesech organismu. Existuje široké spektrum lékových forem s tímto mechanismem, jako jsou tablety s retardovaným uvolňováním nebo rychle rozpadavé tablety. Zde navrhovaná forma umožňuje uložení API do alginátových mikrokapslí se strukturou jádro-slupka. Cílem této práce je výzkum produkce alginátových částic s následnou analýzou jejich vlastností. Částice byly vyráběny enkapsulátorem BÜCHI B-395 PRO, kdy vznikaly frekvenčním rozrušováním laminárního toku tekutiny proudícího skrze soustřednou soustavu vnější a vnitřní trysky variabilních rozměrů. Vytvořené částice byly následně polymerizovány v roztoku CaCl_2 procesem externí cross-polymerace. Byla provedena parametrická studie zkoumající vliv velikosti trysek, frekvence vibrací a její amplitudy nebo průtoku roztoků na tvarovou uniformitu částic a efektivitu procesu. Na výsledných částicích byly následně testovány různé způsoby sušení a zkoumána jejich použitelnost a skladovatelnost.

Příprava zlatých nanočástic a jejich agregátů

Autor: Petr Jelínek
Ročník: B3
Školitel: doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

Zlaté nanočástice jsou intenzivně zkoumány pro své optické a elektrické vlastnosti. Důležitou výhodou je též biokompatibilita, pro kterou je možné použít nanočástice zlata v lékařské diagnostice nebo k cílenému transportu léčiv, kterému napomáhá i snadná modifikace jejich povrchu. Unikátní vlastnosti lze využít i v některých analytických metodách, jako je například povrchově zesílená Ramanova spektroskopie, jejíž princip je založen na jevu povrchové plasmonové rezonance. Turkevichova metoda přípravy zlatých nanočástic je výchozí metodou této práce. Úpravou iontové síly roztoku během syntézy lze dosáhnout cíleného shlukování vznikajících nanočástic, a připravit tak zlaté agregáty. Cílem této práce je příprava a optimalizace podmínek přípravy agregátů požadovaných velikostí a tvarů. Byly připraveny fraktální a kulové agregáty v závislosti na množství přidané soli. Primární nanočástice byly charakterizovány metodou dynamického rozptylu světla (DLS), agregáty pomocí rastrovacího elektronového mikroskopu (SEM).

Metodika stanovení složení elektrolytu vanadové průtočné baterie

Autor: Michaela Mikešová
Ročník: B3
Školitel: Ing. Jaromír Pociďič, Ph.D.

Elektrická energie je neodmyslitelnou součástí našich každodenních aktivit, a proto je nutné ji nejen efektivně vyrábět, ale zároveň i uchovávat. K ukládání velkého množství elektrické energie je za potřebí specifických řešení. Vanadová redoxní průtočná baterie patří mezi perspektivní typy stacionárních úložišť, dokladem budiž instalace řady pilotních systémů tohoto typu. Energie je zde uchovávána v elektrolytech tvořených vanadovými ionty rozpuštěnými ve vodném roztoku kyseliny sírové. Složení elektrolytů zásadním způsobem ovlivňuje technické a ekonomické parametry baterie, jako je hustota energie, účinnost provozu, životnost a v neposlední řadě i cena. Analýza složení elektrolytů je proto esenciální pro vývoj účinných, bezpečných a životných baterií. Cílem této práce je vyvinout jednoduchou, levnou a zároveň robustní metodiku stanovení obsahu jednotlivých složek v elektrolytu. Stanovení obsahu jednotlivých vanadových iontů bylo prováděno potenciometrickou titrací. Jako titrační činidlo byl použit manganistan draselný. Vyvinutá metodika je důležitá nejen pro studium procesů uvnitř vanadové baterie, ale i pro následnou průmyslovou aplikaci těchto baterií, kdy je třeba myslet na likvidaci a recyklaci technologie po ukončení provozu.

Vliv elektrického pole na rovnovážné koeficienty v systémech dvou nemísitelných vodných fází

Autor: Ondřej Dupal
Ročník: B3
Školitel: prof. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Tato práce je věnována stanovení rovnovážných rozdělovacích koeficientů reakčních složek v systémech dvou nemísitelných vodných fází v závislosti na intenzitě vloženého stejnosměrného elektrického pole. Zvoleným systémem dvou nemísitelných vodných fází je směs polyethylenglykolu 4000, fosforečnanových solí a vody. Pro stanovení rovnovážných rozdělovacích koeficientů bylo sestaveno zařízení z plexiskla obsahující dvě elektrodové komory pro zdrojové elektrody, které jsou po stranách, a dvě měřicí komůrky opatřené měřícími elektrodami. Měřicí komůrky jsou od sebe odděleny dialyzační membránou. Mezi měřícími komůrkami a elektrodovými komorami jsou umístěny iontově-výměnné membrány. V systému dvou nemísitelných vodných fází je rozpuštěna kyselina fenyloctová. Po ustavení rovnováhy jsou vzorky obou fází odpipetovány do měřících komůrek. Systematicky je zkoumán vliv intenzity vloženého elektrického pole a doby působení elektrického pole na změny koncentrace kyseliny fenyloctové v obou fázích. Koncentrace kyseliny fenyloctové je určována pomocí kapalínové chromatografie. Získané výsledky budou použity k vývoji integrovaných mikrobioreaktorů-mikroseparátorů pro přípravu antibiotik nebo jejich prekurzorů.

Modelování transportních procesů v kation-výměnných membránách pro vanadové redoxní průtočné baterie

Autor: Martin Bureš
Ročník: B3
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Jednou z alternativ k uskladnění energie jsou vanadové průtočné redoxní baterie pracující na principu přečerpávání elektrolytů oddělených membránou skrz elektrody. Membrány musí být propustné pro vodíkové ionty, které přenáší náboj. Zároveň však jsou propustné i pro vanadové kationty, což je velmi nežádoucí a snižuje účinnost baterie. Dalším nežádoucím jevem je vznik osmotického tlaku a transport vody skrz membránu. V této práci se snažíme tyto jevy popsat a pomocí matematického modelu simulovat. Vycházíme ze dvou základních představ o tocích membránou. První předpokládá membránu jako homogenní prostředí, kde ionty a voda difundují skrz. Druhou je představa membrány jako porézního prostředí s rovnými kanálky, kterými tečou ionty s rozpouštědlem. V modelu zahrnujeme jak dynamiku, tak prostorové rozlišení membrány, což vede k lepšímu vhledu do mechanismu transportu. Z výsledků jsme schopni predikovat směr a intenzitu toků. Díky této predikci jsme schopni určit změny v koncentracích a objemech zásobníků elektrolytů. S pomocí parametrických studií jsme popsali vliv důležitých parametrů systému, např. tloušťky a transportních vlastností membrány. Dalším vývojem modelu hodláme zlepšit jeho prediktivní vlastnosti a zlepšit výkonnost reálných baterií.

Příprava a charakterizace nových mikrocelulárních polymerních pěn

Autor: Patrik Bouřa
Ročník: B3
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Současným trendem výroby syntetických materiálů je snaha o snížení spotřeby materiálu a úsporu energie. V tomto ohledu jsou zajímavé polymerní pěny, které jsou vhodným materiálem pro široké množství aplikací. Jsou využívány jako tepelné či zvukové izolanty, membrány v separačních procesech, nebo jako materiály se skvělými mechanickými vlastnostmi (vzhledem k jejich hustotě). Tato práce se zabývá přípravou a charakterizací mikrocelulárních polymerních pěn s mnohem lepšími vlastnostmi než mají běžné polymerní pěny. Pro vypěňování byla použita netradiční metoda spinodální dekompozice. V první části práce se zabývá porovnáním vlastností (porozita, tepelná vodivost, charakter pórů) mikrocelulárních polystyrenových pěn připravených v systémech polystyren/cyklohexan a polystyren/cyklohexanol. V práci jsou srovnány vlastnosti pěn (polystyren/cyklohexan) vyrobených při různých způsobech odstraňování rozpouštědla (extrakčním činidlem nebo lyofilizací). V druhé části práce se zabývá zcela unikátním vypěňováním polymethylmetakrylátu v 2-oktanonu, přičemž bylo potřeba nejdříve prozkoumat chování tohoto systému a stanovit vhodné podmínky pro vypěňování. Pro výslednou kvalitu produktu je vhodnější PMMA s delšími řetězci.

Sekce: **Chemické inženýrství II (B03)**

Komise:

prof. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

Ing. Radim Petříček

Ing. Ladislav Konopka

Ing. Jan Nájemník, CSc. (Synthomer)

Ing. Daniel Jaksch (JSP)

1	Adrián Žák	Porovnanie kinetiky vzniku povrchových oxidov na automobilových katalyzátoroch Pt/Al ₂ O ₃ a Pd/Al ₂ O ₃ .
2	Kateřina Wodwudová	Charakterizace porézních katalytických vrstev
3	Jakub Smutek	Numerical simulation of flow in the Super-pak packing family
4	Přemysl Richtr	Laboratorní zinko-vzduchová průtočná baterie
5	Tomáš Pachtl	Studie reakční kinetiky oxidace CO a C ₃ H ₆ na katalyzátoru automobilových výfukových plynů
6	Lenka Kolářová	Elektrostatické nabíjení komerčních plastů za účelem jejich separace
7	Jakub Klimošek	Optimalizace procesu měření difuze v polymerech metodou "pressure-decay"
8	Martin Šourek	DEM-CFD study of flow in a random packed bed

Porovnanie kinetiky vzniku povrchových oxidov na automobilových katalyzátoroch Pt/Al₂O₃ a Pd/Al₂O₃.

Autor: Adrián Žák
Ročník: B3
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V dnešnom svete sa stále kladie väčší dôraz na kvalitu životného prostredia. Dôsledkom toho je neustále sprísňovanie emisných limitov cestných motorových vozidiel so spaľovacími motormi. Z tohoto dôvodu sme nútení vylepšovať zariadenia a technológie, ktoré slúžia k riadeniu spaľovania zmesi v motore a následnému čisteniu spalín a redukcií škodlivín. K takýmto technológiám patria automobilové katalyzátory. V tejto práci sú zvlášť porovnané dva typy katalytických kovov, využívaných v oxidačných katalyzátoroch za rovnakých pracovných podmienok (plynná zmes, veľkosť častíc, teplota,...). S pozornosťou venovanou vzniku oxidov daných kovov. Tento dej je sledovaný pomocou konverzie oxidu dusnatého v plynnej zmesi, keďže pri vzniku oxidov platiny a oxidov paládia dochádza k zníženiu aktivity katalyzátoru, čo je príčinou zníženia konverzie oxidu dusnatého na oxid dusičitý.

Charakterizace porézních katalytických vrstev

Autor: Kateřina Wodwudová
Ročník: B3
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Katalytické konvertory výfukových plynů jsou ve formě keramických monolitů s mnoha rovnoběžnými kanálky, na jejichž povrch je nanášena porézní katalytická vrstva. Tato vrstva je tvořena částicemi γ -Al₂O₃, mezi kterými se nacházejí makropóry. Částice γ -Al₂O₃ obsahují mesopóry, ve kterých jsou rozmístěny nanočástice vzácných kovů, na kterých probíhají reakce. Jak porézní struktura, tak velikost nanočástic kovů zásadně ovlivňují účinnost konvertoru, při jeho vývoji je proto nutné obojí detailně popsat, což platí nejen pro automobilové, ale také naprostou většinu heterogenních katalyzátorů. Cílem této práce je charakterizace vrstev γ -Al₂O₃ a Pt/ γ -Al₂O₃ pomocí sorpce plynů, rastrovacího a transmisního elektronového mikroskopu. Důležitými parametry pro zvolení vhodného postupu nanášení vrstvy do kanálků monolitu je její tloušťka, makroporozita a rovnoměrnost. Tyto parametry jsme vyhodnotili pomocí obrazové analýzy snímků z rastrovacího elektronového mikroskopu (SEM). V transmisním elektronovém mikroskopu (TEM) jsme zkoumali nanokrystalky Pt v mesopórech částic γ -Al₂O₃ "(viz obrázek)" a z pořízených snímků jsme obrazovou analýzou vyhodnotili průměrnou velikost krystalků. Velikost mesopórů a měrný povrch vzorku byly změřeny pomocí fyzisorpce dusíku.

Numerical simulation of flow in the Super-pak packing family

Autor: Jakub Smutek
Ročník: B3
Školitel: Ing. Martin Isoz

The distillation is currently the most energy-intensive technology of the chemical industry. Commonly, the distillation is performed in the columns filled with a structured packing. Structured packings are complex structures used to increase the size of the interface available for the mass transfer. Because of the complexity of the packings and of the physical phenomena occurring during the distillation, the design of the distillation columns is based mostly on empirical data. In this work, we focus on modeling the gas flow in the SuperPak family of structured packings. First, we propose an algorithm for generation of the packing geometry. Next, we construct and validate a three-dimensional computational fluid dynamics (CFD) model of gas flow through SuperPak 250.Y and SuperPak 350.Y packings. The model validation is done by comparing experimental data of dry pressure loss to the values computed by our model. The obtained difference between the CFD estimates and experiments is below 10%. Finally, we present a parametric study of the SuperPak 250.Y packing geometry. The devised modeling approach may be used for optimization of the SuperPak type packing geometry with respect to the gas flow. Furthermore, the proposed CFD model may be extended to account for the multiphase flow.

Laboratorní zinko-vzduchová průtočná baterie

Autor: Přemysl Richtř
Ročník: B3
Školitel: Ing. Jaromír Pociďič, Ph.D.

V dnešní době je elektrická energie nedílnou součástí každé minuty našeho života. Jelikož spotřeba elektřiny bude stále růst, je třeba hledat nové zdroje na její výrobu a možnosti její akumulace. S ukládáním elektrické energie se nejčastěji skloňují technologie jako Li-iontové baterie, vanadové redoxní průtočné baterie či vodíková energetika. Avšak masové uplatnění zmíněných technologií bude čelit problémům s nedostatečným nerostným bohatstvím či nedostatečnou energetickou účinností technologií, a proto je potřeba se poohlížet po alternativních redoxních párech. Jednou z možností je chemie zinek-vzduch, která poskytuje kompromis mezi energetickou účinností a nerostnými zásobami základní surovin, což ovlivňuje výslednou cenu baterií. Nevýhodou je ovšem nízký počet nabíjecích a vybíjecích cyklů způsobený změnou tvaru zinkové elektrody a růstu zinkových dendritů. Jednou z možností, jak vyřešit zmíněné nevýhody, je depozice zinku za kontrolovaných podmínek, čehož lze dosáhnout v průtočných bateriích. Jelikož je chování chemie zinek-vzduch v průtočných bateriích málo prozkoumanou oblastí, nelze spoléhat na komerční řešení. Proto si dává tato práce za cíl vývoj laboratorní sekundární průtočné zinko-vzduchové baterie, která umožní následný výzkum v této oblasti.

Studie reakční kinetiky oxidace CO a C₃H₆ na katalyzátoru automobilových výfukových plynů

Autor: Tomáš Páchl
Ročník: B3
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V současnosti se kladou stále větší nároky na složení výfukových plynů u automobilů, a proto je nutné porozumět chování katalyzátorů a správně jej předvídat. Tato studie se zabývá deaktivací katalyzátoru při oxidaci propenu v široké škále reakčních podmínek typických pro trojcestný (TWC) a dieselový oxidační (DOC) katalyzátor obsahující platinu a/nebo palladium. Deaktivace je způsobena částečnou oxidací propenu na meziprodukty, které se akumulují na povrchu, blokují aktivní centra a snižují tak jeho efektivnost zejména při oxidaci CO. To má za následek v úzkém teplotním pásmu pokles konverze CO s rostoucí teplotou. Za vyšších teplot a relativně vyššího obsahu O₂ vůči redukujícím složkám (chudé podmínky) se meziprodukty stačí oxidovat a nehromadí se na povrchu. Tento efekt byl nejmarkantnější na Pt katalyzátoru v přítomnosti NO za stechiometrických a mírně chudých podmínek. Experimentálně pozorované jevy byly zohledněny v počítačových simulacích. Do kinetického modelu byly zahrnuty rovnice popisující částečnou oxidaci propenu na povrchové meziprodukty, které blokují katalytická centra a inhibují reakce, jejich oxidace a dále částečná oxidace propenu na CO, přispívající k dočasnému nárůstu koncentrace CO. Vyvinutý model umožňuje preciznější předpověď konverze klíčových složek.

Elektrostatické nabíjení komerčních plastů za účelem jejich separace

Autor: Lenka Kolářová
Ročník: B3
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Demands for plastic are still increasing, especially in car industry, packaging, construction or electronics. Hundreds of megatons of plastic waste is produced each year. Recycling is limited due to the lack of effective and efficient separation method. Thus, majority of plastic waste is burned in furnaces instead of being recycled. Our long-term vision is to develop a cost-efficient plastic separator based on the principle of tribocharging. The goal of this work was to determine parameters affecting the charging of common plastic materials (PP, HDPE, PS, PET and PMMA) and to find conditions leading to the different charging of each material. First, we charged grinded plastics by corona charging unit to see particle performance, especially what is the saturation charge for studied materials. Then, we constructed an apparatus for triboelectric charging of powders with a possibility to control stress applied on our samples. Bigger applied stress led to bigger charge on the powder. This is mostly because the rough particle surface is flattening and consequently the total particle area available for charging is increasing. We showed that colorants are important additives affecting the charging of plastic.

Optimalizace procesu měření difuze v polymerech metodou "pressure-decay"

Autor: Jakub Klimošek
Ročník: B3
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Dynamika transportu plyných složek v polymerních materiálech je jednou z důležitých charakteristik, které je nutno znát pro celou řadu aplikací v polymerním průmyslu. V této práci je kladen důraz na optimalizaci dosavadní metody měření difuzních koeficientů pomocí dynamiky tlakové odezvy a rozšíření knihovny difuzních dat. Byla studována difuze pro různé penetranty v rozdílných polymerních vzorcích při odlišných teplotách. Díky optimalizacím stávající aparatury, metody měření a zpracování naměřených dat můžeme měřit difuzní koeficienty i u uhlovodíků, které mají nízké hodnoty tlaku nasycených par při studovaných teplotách, jako jsou n-hexan, 1-hexen, iso-heptan či cyklopentan. Výsledná data byla porovnávána s gravimetrickým měřením rozpustnosti, což vede k dalšímu zkvalitnění výsledných difuzivit a porozumění probíhajícím dějům. Stávající proces měření je ale stále časově náročný a proto jsme se rozhodli celý proces automatizovat. Díky automatizaci budeme schopni naměřit velké množství experimentů v kratším čase a získat tak statisticky přesnější hodnoty difuzivit. Přispějeme tak k systematickému mapování difúzního transportu v průmyslově relevantních vzorcích polyethylenu s hustotou 900 až 970 kg/m³.

DEM-CFD study of flow in a random packed bed

Autor: Martin Šourek
Ročník: B3
Školitel: Ing. Martin Isoz

Most catalytic surface reactions as well as other industrial applications take advantage of fixed packed bed reactors. Designers of these reactors rely mostly on empirical formulas derived for various simplifying assumptions, e.g. uniformly distributed porosity. The made simplifications and especially the assumption of uniformly distributed porosity fail if the tube to particle diameter ratio goes under 10 and the „wall effect“ becomes more significant. Thus, the complete three-dimensional structure of the packed bed has to be considered. Thanks to ongoing improvements in numerical mathematics and computational power, the methods of computational fluid dynamics (CFD) have become a great tool for comprehensive description of these problematic packed beds. Three-dimensional simulations of the flow through two fixed beds differing in the type of the used particle are presented and compared with available experimental and empirical results. To generate the random fixed beds, we propose a custom method based on DEM code implemented in open-source software Blender. Thereafter, OpenFOAM tools (snappyHexMesh, simpleFoam) are used for creation of the computational mesh and solution of the governing equations describing a single-phase flow in the packed bed.

Sekce: **Chemické inženýrství III (B09)**

Komise:

doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

doc. Ing. Tomáš Weidlich, Ph.D. (UPCE)

Ing. Pavel Kupka

Ing. Marie Plachá

Ing. Václav Babuka (Synthos)

Ing. Martin Hubička, Ph.D. (Lovochemie)

1	Jarmila Kučerová	Disipace energie při kolizích částic nepravidelných tvarů: experimenty a modelování
2	Kateřina Kholavytská	AFM charakterizace morfologie a mechanických vlastností houževnatého polypropylenu
3	Tomáš Havlín	Vývoj čipu pro separaci produktů enzymové reakce pomocí dvoufázového vodného systému
4	Vojtěch Šálek	Tepelné charakteristiky pevných materiálů pro modelování šíření požáru
5	Dominik Švára	Vliv elektrického pole na systém dekanol-dekanoát
6	Anna Čížinská	Experimentální měření vlivu požáru na zásobník CNG
7	Daniela Tamaškovičová	Objemový koeficient přestupu hmoty v probublávaných fermentorech
8	Rudolf Pečinka	Porovnání kinetiky oxidace CO a propenu na automobilových katalyzátorech obsahujících platinu a palladium
9	Iveta Kršková	Modelovanie vplyvu reologických vlastností na tvorbu morfológie polymérnych pien

Disipace energie při kolizích částic nepravidelných tvarů: experimenty a modelování

Autor: Bc. Jarmila Kučerová
Ročník: M1
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

The description of energy dissipation during particle collisions is necessary for prediction of behaviour of systems involving manufacture or transport of granular materials (polymers, drugs etc.). However, the knowledge of dissipative parameters is limited and extends mostly just on the case of ideal (spherical) particles. Our work focuses on PE particles. As a measure of dissipated energy, we use restitution coefficient (the ratio of velocity after and before impact). First, we determined the coefficient experimentally, then we developed DEM based model that enabled us to predict restitution coefficient of particles of various shapes. We recorded particles impacting a metal plate and by image analysis obtained their velocities pre- and post-impact. We used this data to fit dissipative force parameter in one element model. Then, we developed a model that represents the particle as an aggregate of elements and thus determined the behaviour of differently shaped particles. Our results provide information about energy dissipation during collisions of PE particles and show that their behaviour depends significantly on their shape. It is crucial to take particle shape into consideration in models of particulate systems; especially in those regarding particle agglomeration or fouling.

AFM charakterizace morfologie a mechanických vlastností houževnatého polypropylenu

Autor: Bc. Kateřina Kholyavytská
Ročník: M1
Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Houževnatý polypropylen (hiPP) je typickým produktem moderního polymerního průmyslu. Díky svým unikátním vlastnostem, tj. vysoké pevnosti, houževnatosti a odolnosti nachází své využití především v automobilovém průmyslu. HiPP je heterofázový kopolymer skládající se ze dvou nemísitelných fází – z pevné izotaktické polypropylenové matrice (iPP) a z měkkých ethylen-propylenových kaučukových domén (EPR). Právě tato heterofázová morfologie poskytuje houževnatému polypropylenu jeho jedinečné vlastnosti. Tato práce představuje systematický výzkum hiPP za pomoci mikroskopie atomárních sil (AFM). Je představena morfologická studie houževnatého polypropylenu s ohledem na distribuci ethylen-propylenových kaučukových domén uvnitř polypropylenové matrice. Nově je v této práci představeno mapování adhezních vlastností jednotlivých fází hiPP pomocí silové spektroskopie. Kombinace morfologického mapování se silovou spektroskopií přináší přesnější pohled na mechanické chování daného polymeru na mikroměřítku a napomáhá celistvému porozumění heterofázové struktury houževnatého polypropylenu. Ukazujeme, že naše práce může posloužit jako klíč k syntéze nových houževnatých polymerních materiálů s nadstandardními mechanickými vlastnostmi.

Vývoj čipu pro separaci produktů enzymové reakce pomocí dvoufázového vodného systému

Autor: Bc. Tomáš Havlín
Ročník: M1
Školitel: prof. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Práce je věnována vývoji a testování mikrofluidního čipu sloužícího k separaci produktů enzymové reakce pomocí dvoufázového vodného systému. V našem případě se jedná o dvoufázový tok tvořený vodným roztokem anorganické soli a vodným roztokem polyetylenglykolu (PEG). Daný mikrofluidní čip obsahuje polopropustnou dialyzační membránu, která plní dvě funkce: (i) zajišťuje stabilní kontaktování dvou vodných fází umožňující provádět separace v souproudeém i protiproudeém uspořádání a (ii) zlepšuje selektivitu vlastní separace. V prvních pokusech je čip testován pomocí lehce detekovatelného fluoresceinu, který je do čipu dávkován v solné fázi a přes membránu prochází do vodného roztoku PEG4000. Hlavními studovanými parametry ovlivňujícími vlastní separaci jsou především průtoky fází (doba kontaktu fází) a jejich vzájemné uspořádání (souproudek a protiproudek). V dané práci budou představeny budou dva prototypy čipu. Budou diskutovány výsledky kvantitativního měření přechodu fluoresceinu mezi fázemi. Bude nastíněn další vývoj pokusu a prezentováno budoucí praktické využití metody – separace produktů enzymatické reakce od vlastního enzymu.

Tepelné charakteristiky pevných materiálů pro modelování šíření požáru

Autor: Bc. Vojtěch Šálek
Ročník: M2
Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Práce se zabývá měřením tepelných charakteristik pevných materiálů pro účely matematického modelování šíření tepla a požáru. Matematické modelování, jakožto rozvíjející se nástroj požárního inženýrství, vede ke snížení počtu finančně nákladných požárních zkoušek a zefektivnění volby požárně bezpečnostních systémů. Předpokladem k vytvoření kvalitního modelu šíření požáru je zadání velkého počtu vstupních materiálových parametrů, které jsou často nedohledatelné v literatuře, ve formátu nevhodném pro model, nebo zcela nedostupné a jedinou možností k jejich získání je provedení experimentálních měření. V rámci práce byly provedeny měření metodou termogravimetrické analýzy (TGA) za účelem stanovení kinetických parametrů pevných materiálů při různých podmínkách tepelného rozkladu. Měření jsou běžně komerčně dostupné dřevěné velkoplošné materiály (OSB, dřevovláknité a překližkové desky), tedy zástupci nejhojněji používaných materiálů používaných např. pro výstavbu dřevostaveb, tepelné izolace nebo nábytkovou výbavu interiérů včetně chemických laboratoří.

Vliv elektrického pole na systém dekanol-dekanoát

Autor: Bc. Dominik Švára
Ročník: M2
Školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Existuje velké množství systémů, které jsou schopny za určitých podmínek vytvářet obrazce a větví se dendritické struktury. Příkladem neživého systému je Bělousova-Žabotinského reakce nebo tvorba sněhových vloček. V živých systémech se tyto struktury vyskytují například v lidském dýchacím systému nebo v kořenových systémech rostlin. V nedávné době jsme pozorovali tvorbu dendritických struktur v systému, kdy je kapka dekanolu umístěna na tenké vrstvě vodného roztoku dekanoátu sodného. V tomto systému má vliv na samotný tvar obrazce jednak rychlost odpařování a pak i přítomnost anorganických solí a její přidané množství. Na tvorbu obrazců ve výše zmíněných příkladech jiných systémů může mít také vliv přítomnost elektrického pole. Proto jsme se v této práci rozhodli zkoumat možný vliv stejnosměrného elektrického pole na systém dekanol-dekanoát. Pro zkoumání vlivu jsme si museli vytvořit experimentální zařízení. Při jeho konstrukci jsme prošli několika verzemi. Jednotlivé verze jsme otestovali a výsledky jsme použili pro zlepšení konstrukce další verze. Poslední verzi zařízení jsme pak použili ke studiu vlivu stejnosměrného pole na systém dekanol-dekanoát. Experimenty jsme prováděli pro různé hodnoty napětí, které bylo nastaveno na elektrodách.

Experimentální měření vlivu požáru na zásobník CNG

Autor: Bc. Anna Čížinská
Ročník: M2
Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

S rostoucí poptávkou po automobilech na stlačený zemní plyn jsou diskutovány otázky bezpečnosti. Zásobníky na CNG jsou opatřeny bezpečnostním ventilem, který se otevírá při teplotě 110°C. Při lokálním ohřevu zásobníku, například při požáru, a současném chlazení ventilu, například při hašení, může dojít k nárůstu tlaku nad kritickou hodnotu a roztržení tlakové láhve. Příspěvek je zaměřen na popis a vyhodnocení experimentů, kde dochází k lokálnímu zahřívání tlakového zásobníku propanbutanovým hořákem. Hlavním cílem bylo zjistit, za jakých podmínek dojde k otevření bezpečnostního ventilu. Během experimentu byla sledována povrchová teplota, teplota bezpečnostní pojistky a tlak uvnitř zásobníku. Bylo ověřeno, že bezpečnostní pojistka se otevře při dosažení požadované teploty, avšak následný průběh a doba výtoku jsou ovlivněny okolními podmínkami v blízkosti bezpečnostní pojistky.

Objemový koeficient přestupu hmoty v probublávaných fermentorech

Autor: Bc. Daniela Tamaškovičová

Ročník: M1

Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Při konstrukci mechanicky míchaných fermentorů se koeficient přestupu hmoty k_{La} často stává klíčovým parametrem. V průmyslových fermentačních procesech je většina kapalin nekoalescentní a často vykazují zvýšenou viskozitu. V případě viskózních kapalin je k_{La} , předpověděné na základě literárních korelací, zatíženo širokou distribucí hodnot. Cílem této práce je poskytnout spolehlivé korelace pro k_{La} založené na velkém množství experimentálních dat získaných tlakovou dynamickou metodou (DPM). Experimentální uspořádání bylo upraveno pro měření ve viskózních kapalinách. Byly použity dva fermentory, jeden v laboratorní a druhý v poloproduční velikosti. Měření bylo provedeno pro různé typy míchadel s různými průměry. V této práci budou korelace získané z odborné literatury porovnány s námi vytvořenými korelacemi [Graf.1]. Budou diskutovány výsledky získaných nejistot měření a bude nastíněn další vývoj pokusů. Graf.1: Srovnání naměřených a predikovaných hodnot k_{La} .

Porovnání kinetiky oxidace CO a propenu na automobilových katalyzátorech obsahujících platinu a palladium

Autor: Bc. Rudolf Pečinka

Ročník: M2

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Zvyšující se nároky na kvalitu životního prostředí vedou ke zpřísnování legislativy týkající se škodlivých látek vypouštěných do ovzduší. V Evropě je pro automobily platný systém emisních norem EURO, jehož snižující se limity vedou k vývoji účinnějších katalytických konvertorů a ke snaze o potlačení dalších nežádoucích jevů vyskytujících se při čištění spalin. Tato studie porovnává kinetiku katalytické oxidace, CO a C₃H₆ při ohřevu automobilových katalyzátorů typu Pt/ γ -Al₂O₃ a Pd/ γ -Al₂O₃. Bylo zjištěno, že s rostoucí teplotou může dojít, paradoxně, k dočasnému snížení konverze CO. K tomuto nežádoucímu jevu dochází na počátku konverze propenu, kdy vznikají meziprodukty jeho neúplné oxidace jako etylén, octany a mravenčany, které obsazují a blokují centra katalyticky aktivních kovů. K oxidaci meziproduktů dochází až při vyšších teplotách, což vede k uvolnění katalytických center a postupně k úplné konverzi CO. Z porovnávaných výsledků experimentů je patrné, že palladium má významný vliv na potlačení dočasného snížení konverze, CO při souběžné oxidaci C₃H₆. U vzorku Pd/ γ -Al₂O₃ k tomuto nechtěnému jevu dochází pouze minimálně.

Modelovanie vplyvu reologických vlastností na tvorbu morfológie polymérnych pien

Autor: Bc. Iveta Kršková

Ročník: M2

Školiteľ: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

S polymérnymi penami prichádzame do styku každý deň. V modernom svete majú využitie ako tepelné izolanty, odľahčené plasty pre automobily, posteľové matrace, baliace materiály, atď. Použitie v takto širokej škále aplikácii je možné predovšetkým vďaka ich výborným vlastnostiam. Polymérne peny získavajú svoje vlastnosti vhodnou voľbou polymérneho materiálu a vnútornej štruktúry. V závislosti na vypěňovacích podmienkach potom peny majú veľmi nízku hustotu, nízku tepelnú vodivosť alebo sú veľmi elastické. Polymérne peny zohrajú významnú rolu aj v budúcnosti a preto sa snažíme pripraviť model, ktorý bude popisovať vznik morfológie pien a dovoľí nám študovať fyzikálne javy prebiehajúce pri vypeňovaní. Presný matematický model nám potom pomôže objasniť odlišnosti v štruktúre medzi polystyrénovými (PS) a polyuretánovými (PU) penami, prípadne predikovať zmenu morfológie v závislosti na podmienkach vypeňovacieho procesu. Vyvinutý model sa skladá z dvoch častí. Prvá časť popisuje rast ciel spôsobený difúziou a vyparovaním vypěňovacieho činidla. Druhá časť potom popisuje utváranie stien a strutov, ktoré vychádza z lubrikačnej teórie toku tekutín. Do modelu sme zakompovali vývoj reologických vlastností pri raste cely a vplyv gradientu povrchového napätia pri utváraní stien.

Sekce: **Chemické inženýrství IV (BIII)**

Komise:

prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Ing. Martin Isoz

Ing. Ondřej Rychec

Ing. Alexandr Romanov

Ing. František Plát, Ph.D. (Škoda Auto)

Ing. Oldřich Pešek, Ph.D. (Casale Project)

1	Jakub Kovačovič	Impact of process conditions on the conductivity of PANI copolymers
2	Anna Hnátková	Vliv vzniku PtO _x a PdO _x na oxidaci NO na automobilovém katalyzátoru
3	Daniel Götz	Experimentální studium transportních jevů v membráně vanadové redoxní průtočné baterie
4	Miroslav Blažek	Vylepšení postupu nanášení porézních katalytických vrstev do kanálků monolitického reaktoru.
5	Dominik Čapkovič	Nastavení komunikace a kalibrace dálkově ovládaného zdroje pro regulaci topného okruhu reaktoru
6	Zuzana Ruberová	Synthesis of hydrogel microparticles for specific adhesion
7	Jindřich Mrlík	Elektrokatalytické vlastnosti záporné elektrody vanadové redoxní průtočné baterie
8	Patrik Labík	Porovnávání chování suspenzí mikročástic Al ₂ O ₃ a Pt/Al ₂ O ₃ při nanášení katalytických vrstev do kanálků monolitického reaktoru

Impact of process conditions on the conductivity of PANI copolymers

Autor: Bc. Jakub Kovačovič
Ročník: M1
Školitel: doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

Polyaniline (PANI) is the oldest known conductive polymer, first time used as a cotton dye over century ago. Nowadays, it is the most investigated conductive polymers, thanks to its valuable electronic properties, low cost, good stability and processability. In this work, impact of process conditions on the conductivity of PANI copolymers was studied. The size of synthesized aggregates was measured by static light scattering, while the thickness of conductive polymer shell and morphology of formed aggregates were characterized by scanning electron microscope. The goal of this study was to compare freeze-drying with drying in vacuum oven and their influence on porosity and conductive properties of prepared copolymer. Achieved knowledge could help us to have better understanding and optimize the production process of PANI composites.

Vliv vzniku PtO_x a PdO_x na oxidaci NO na automobilovém katalyzátoru

Autor: Bc. Anna Hnátková
Ročník: M1
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

U dieselových automobilů je pro splnění aktuálně platné emisní normy EURO 6 součástí výfukového potrubí vedle dieselového oxidačního katalyzátoru (DOC) a filtru pevných částic katalyzátor pro selektivní katalytickou redukci (SCR) využívající močovinu jako externí zdroj redukčního činidla NH₃, neboť povaha výfukového plynu vycházejícího z naftového motoru je silně oxidační. Pro dosažení maximální účinnosti odstranění NO_x (rychlá SCR reakce) je zapotřebí zajistit poměr NO₂:NO_x 1:2 pomocí oxidace části NO na DOC. Oxidační katalyzátor obsahuje drahé kovy ze skupiny platiny, nejčastěji Pt a/nebo Pd. V přítomnosti O₂ a NO₂ dochází ke vzniku oxidů těchto kovů (PtO_x a PdO_x) a tím ke značnému poklesu aktivity pro oxidaci NO. Deaktivace je vratná, avšak výrazně ovlivňuje účinnost katalyzátoru. Tento jev byl zakomponován do kinetického modelu DOC, který byl následně testován při simulaci jízdních cyklů používaných pro určení spotřeby paliva a emisí v EU a USA. Byl sledován pokles výtěžku NO₂ v důsledku vzniku oxidů Pt a Pd při opakovaní cyklů. Platinový katalyzátor vykazoval výrazně vyšší aktivitu pro oxidaci NO, ale zároveň podléhal více deaktivaci. Z výsledků je patrná důležitost zohlednění deaktivace v modelu pro přesnou predikci účinnosti DOC a následné řízení SCR katalyzátoru.

Experimentální studium transportních jevů v membráně vanadové redoxní průtočné baterie

Autor: Bc. Daniel Götz
Ročník: M1
Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Dlouhodobý trend zvyšování časově nerovnoměrné poptávky po elektrické energii s sebou nese potřebu stabilizovat síť pomocí stacionárních uložišť, kupř. ve formě akumulátorů. Na ty jsou ale v této funkci kladené specifické požadavky zejména dlouhodobé výdrže, spolehlivosti a v neposlední řadě také nízké ceny. Právě tyto vlastnosti nabízejí vanadové redoxní průtočné baterie. Jednou z klíčových komponent, která rozhoduje o technických a ekonomických parametrech baterie, je membrána oddělující kladný a záporný elektrolyt a zajišťuje iontové propojení mezi poločlánky. Cílem mé práce bylo experimentální studium transportních jevů probíhajících v membráně při provozu baterie. Pro experimenty jsem zkonstruoval aparaturu umožňující základní charakterizaci laboratorního monočlánku a průběžné monitorování změn objemu a složení elektrolytu. Aparatura byla využita k charakterizaci několika zástupců anion a kation výměnných membrán a porézních separátorů. Byl sledován významný vliv vlastností membrány (náboj, tloušťka, iontovýměnná kapacita) na transport jednotlivých složek elektrolytu membránou a pokles kapacity v průběhu nabíjecích a vybíjecích cyklů. Tato data pak mohou sloužit k individuálnímu výběru membrány daných parametrů pro jednotlivé aplikace.

Vylepšení postupu nanášení porézních katalytických vrstev do kanálků monolitického reaktoru.

Autor: Bc. Miroslav Blažek
Ročník: M1
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Monolitické reaktory jsou tvořeny nosičem z keramiky nebo kovu, jenž se skládá ze soustavy mnoha kanálků pokrytých tenkou porézní vrstvou katalyzátoru. Toto uspořádání umožňuje současně dosáhnout vysokého povrchu katalyzátoru a nízké tlakové ztráty, monolitické reaktory jsou proto využívány jak v chemických výroбах, tak pro snižování množství škodlivin ve výfukových plynech automobilů. Konverze škodlivin v automobilovém katalyzátoru závisí na tloušťce a porozitě nanesené vrstvy – silná vrstva znamená větší množství katalyzátoru, ten ale nemusí být zcela využit kvůli transportním omezením. Cílem prováděného výzkumu je tedy vylepšení postupu nanášení katalytické vrstvy do monolitu namáčením (dip-coating). Na tloušťku a rovnoměrnost vrstev má vliv pH suspenze katalyzátoru a její viskozita, rychlost a počet opakování namáčení monolitu a tlak použitý při profukování kanálků pro odstranění přebytečné suspenze. Tato práce se zaměřuje na úpravu postupu nanášení s důrazem na rovnoměrnost vrstev. Vhodný postup přípravy byl nalezen pro vrstvu $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ bez katalytických center. Na základě této studie budou připraveny vzorky s vrstvou katalyzátoru $\text{Pt/CeO}_2/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ s dobře definovanou tloušťkou a makroporozitou, které budou použity pro studium kinetiky chemických reakcí a transportních omezení.

Nastavení komunikace a kalibrace dálkově ovládaného zdroje pro regulaci topného okruhu reaktoru

Autor: Bc. Dominik Čapkovič
Ročník: M1
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

LabVIEW (akronym ze slova Laboratory Virtual Instrumentation Engineering Workbench) je prostředí založené na grafickém programování, jež bylo vyvinuto firmou National Instruments. Výhoda tohoto grafického prostředí tkví v intuitivním programování komunikace mezi zařízeními, výměnou, vyhodnocováním a ukládáním dat v řídicím počítači. Zařízení mohou být připojena k počítači například pomocí DAQ (Data Acquisition) modulu, který poskytuje analogovou komunikaci 0 – 10 V. Takto připojená zařízení lze dálkově řídit, což usnadňuje práci. Měření experimentu se tak stává přesnějším a rychlejším. V této práci je naprogramováno dálkové řízení zdroje elektrické energie pro vytápění experimentálního reaktoru. Zdroj topného okruhu je připojen k DAQ kartě a pro jeho nastavení musela být změřena kalibrační křivka závislosti ovládacího napětí 0 – 10 V na napětí poskytovaného zdrojem. Takto změřená kalibrační křivka byla implementována do virtuálního prostředí LabVIEW. Tímto je umožněno ovládat výkon topení reaktoru z řídicího počítače, čímž je přesněji řízena teplota v průběhu experimentu, což vede k vyšší opakovatelnosti výsledků.

Synthesis of hydrogel microparticles for specific adhesion

Autor: Bc. Zuzana Ruberová
Ročník: M2
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Biocompatible materials are widely used in a field of targeted drug delivery, as microparticle carriers of active pharmaceutical ingredients (API). Cancer cells are known to produce specific molecules that can be used for targeted adhesion, one example of such molecule is transmembrane antigen carbonic anhydrase IX. Microparticles functionalised by complementary antibody (IgG-M75) to this antigen are consequently specifically attached to the cancer cells. In this work, sodium alginate was used for fabrication of microparticles acting as API carrier. Iron oxide nanoparticles were incorporated into microparticles for easier separation using magnetic field and to enable their visualization in a living body. The microparticles were prepared by external gelation of microdroplets formed by encapsulator Buchi B-395 and their stability was increased by curing with chitosan. Chitosan also acts as a binder for glutaraldehyde that reacts with the specific monoclonal antibody. Therefore, surface coverage of alginate microparticles by chitosan is an important parameter that was also investigated in this work. Both chitosan and antibody were fluorescently labelled to determine surface modification of the microparticles by using scanning confocal microscopy.

Elektrokatalytické vlastnosti záporné elektrody vanadové redoxní průtočné baterie

Autor: Bc. Jindřich Mrlík
Ročník: M2
Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Vanadové redoxní průtočné baterie skýtají možnost efektivního stacionárního ukládání elektrické energie. To je v současné době zásadní pro další rozvoj nestabilních obnovitelných zdrojů energie. Hlavní výhodou je zde nezávislost mezi výkonem a kapacitou, vysoká účinnost a téměř neomezená životnost. Baterii tvoří bateriový svazek a externě uložené elektrolyty s ionty vanadu ve čtyřech oxidačních stavech. Elektrolyty se čerpají skrz svazek a na inertních elektrodách zde dochází ke konverzi energie. Jako elektrod se používá uhlíkových plstí pro jejich velký povrch, stabilitu a nízký elektrický i hydrodynamický odpor. Elektrody jsou odděleny membránou a spojeny do série pomocí kompozitních desek. Elektrokatalytické vlastnosti plstí je obvyklé vylepšovat tepelnou úpravou, jejíž optimální teplota se liší. V předchozím výzkumu jsme při hledání optimální teploty zjistili, že tato úprava má významný přínos pouze pro kinetiku záporné elektrodové reakce. Aktivace je souhrou oxidace a zvětšení povrchu plstí. Cílem této práce je vysvětlení těchto vlivů na vlastnosti záporné elektrody pomocí komplexní analýzy plstí upravených při různých teplotách.

Porovnávání chování suspenzí mikročástic Al_2O_3 a $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ při nanášení katalytických vrstev do kanálků monolitického reaktoru

Autor: Bc. Patrik Labík
Ročník: M2
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V důsledku stále se zpříšňujících emisních norem musí být dnes každé vozidlo vybaveno katalytickým konvertorem, který snižuje množství škodlivin ve výfukových plynech. Automobilové katalyzátory sestávají z keramického nebo kovového nosiče s velkým množstvím souběžných kanálků, na který je nanášena porézní katalytická vrstva obsahující nanočástice vzácných kovů (Pt, Pd, Rh), které zajišťují chemickou přeměnu škodlivin. Tato práce navazuje na předchozí studii zabývající se nanášením tenkých vrstev tvořených pouze mikročásticemi $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ do kanálků monolitického reaktoru, ve které byl zkoumán vliv parametrů přípravy (např. viskozita a pH suspenze nebo velikost mikročástic) na konečnou tloušťku, porozitu a rovnoměrnost nanášené vrstvy. Cílem této práce bylo porovnání chování suspenze obsahující pouze mikročástice Al_2O_3 a stejné částice naimpregnované platinou (1% hm.), tak aby bylo možné využít poznatky z předchozí studie při nanášení vrstev $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ s definovanou tloušťkou a makroporozitou. Připravené monolity s vrstvou $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ pak mohou být otestovány v laboratorním reaktoru. Získané výsledky v budoucnu poslouží k přípravě katalyzátorů se složitější formulací a také pro ověření a vývoj matematického modelu reakcí a transportu v porézních katalyzátorech.

Sekce: **Chemické inženýrství V (BS4)**

Komise:

prof. Ing. Pavel Hasal, CSc.
Ing. Petr Stanovský, Ph.D. (UCHP CAS)
Ing. Simon Jantač
Ing. Tereza Čmelíková
Ing. Jan Hronza, Ph.D. (Ricardo)

1	Jan Němec	Analýza a modelování automobilových filtrů pevných částic
2	David Minx	Chování heterogenních iontově-výměnných membrán v přítomnosti DNA
3	Štěpán Halada	Výroba mikrofluidních systémů
4	Lukáš Bláha	Impact of particles shape on their aggregation behaviour
5	Jiří Šterba	Vznik PtO _x v automobilovém oxidačním katalyzátoru a jeho vliv na konverzi NO
6	Petr Kovář	Senzory s iontově-výměnnými membránami, určené k detekci nukleových kyselin
7	Jiří Charvát	Vliv tlakových ztrát na chování vanadové redoxní průtočné baterie
8	Dominik Kralik	Vývoj technologie ke sledování změn v průsakových vodách z oblastí uložení jaderného odpadu

Analýza a modelování automobilových filtrů pevných částic

Autor: Bc. Jan Němec
Ročník: M1
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Výfukové plyny obsahují mikroskopické částice sazí, na jejichž povrchu mohou být navázány další škodlivé látky. Množství sazí je proto regulováno emisními normami. Filtry pevných částic jsou dnes nepostradatelnou součástí všech automobilů s diesellovými motory a nově jsou řazeny také za některé benzinové motory. Toto zařízení však představuje překážku ve výfukovém potrubí, která způsobuje tlakovou ztrátu a snižuje účinnost motoru. V případě moderních katalytických filtrů pevných částic, které mají uvnitř porézní struktury nanesen katalyzátor, je nutné nalézt kompromis mezi nízkou tlakovou ztrátou, vysokou filtrační účinností a katalytickou aktivitou. Celková tlaková ztráta se skládá z několika příspěvků, konkrétně z kontrakce/expanze plynu na vstupu/výstupu z filtru, jeho proudění kanálkem a průchodu skrz porézní stěnu. V této práci je diskutován význam jednotlivých příspěvků. Jejich velikost je stanovena porovnáním tlakových ztrát naměřených pro filtry o různé délce a výsledků matematického modelu filtru pevných částic. Zkoumán byl také vliv přítomnosti katalyzátoru v pórech filtru na efektivní permeabilitu stěny.

Chování heterogenních iontově-výměnných membrán v přítomnosti DNA

Autor: Bc. David Minx
Ročník: M1
Školitel: doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Iontově-výměnné membrány (IVM) se používají napříč celým spektrem elektro-membránových procesů. Typickými příklady jsou elektrodialýza či elektrodeionizace. Během těchto procesů může v závislosti na složitosti odsolovaného vzorku docházet k usazování anorganických a organických částic na IVM. Kromě toho, že toto znečištění zvyšuje odpor membrán, může též za určitých podmínek dojít ke vzniku neočekávaných jevů, které mohou výrazně snížit účinnost elektromembránových procesů. Jedním z takových jevů může být štěpení vody. Tato práce je věnována zanášení IVM molekulami nukleových kyselin (DNA). Především na aniontové heterogenní výměnné membráně je toto zanášení podpořeno elektrostatickými přitažlivými silami, které vedou k intenzivní adsorbci molekul DNA na membránu. Tenká vrstvička naadsorbované DNA společně s aniontovou IVM obsahující kladné funkční skupiny tvoří bipolární spojení, na kterém po aplikaci vnějšího elektrického pole běžně dochází ke štěpení vody. V této práci se zaměřuji na interakce mezi IVM a molekulami DNA. Tyto interakce jsou studovány pomocí měření chronoampérometrických a napětíoproudových křivek na mikročipech pro různé koncentrace DNA v 10 mM roztocích KCl. Zároveň pomocí trasovacích částic je sledována intenzita vírů vznikajících na diluátové straně IVM.

Výroba mikrofluidních systémů

Autor: Bc. Štěpán Halada
Ročník: M1
Školitel: doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Mikrofluidní systémy s integrovaným polem kovových elektrod nalézají mnoho zajímavých aplikací jak v oblasti základního (např. měření prostorového rozložení elektrického potenciálu) tak aplikovaného výzkumu (elektrochemické a elektrokinetické biosenzory). Tato práce popisuje souhrnný postup pro výrobu epoxidových mikrofluidních čipů se zlatým polem mikroelektrod, který kombinuje techniky fotolitografie, galvanického pokovování a odlévání. Fotolitografie se provádí do speciálního fotorezistu SU-8, který umožňuje dosahovat velmi vysokých poměrů výška ku šířce struktur. V rámci této práce jsme provedli studii týkající se nanášení vrstev fotorezistů SU-8 pro dosažení různých výšek vrstvy a následně optimalizovali proudové hustoty během elektrodepozice zlata do strukturovaného fotorezistu naneseného na elektricky vodivém substrátu. Díky vlastnostem fotorezistu a kombinací těchto dvou technologií lze dosáhnout vyšších elektrod než u známé technologie obětovaného substrátu. Dále byl vyvinut postup pro celkovou kompletaci čipů a jejich uvedení do provozu. Čipy vyrobené pomocí SU-8 fotorezistu jsme porovnali s čipy vyrobenými pomocí tradiční technologie obětovaného substrátu a vyhodnotili výhody a nevýhody z hlediska jejich výroby.

Impact of particles shape on their aggregation behaviour

Autor: Bc. Lukáš Bláha
Ročník: M1
Školitel: doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

Porous materials have great usage in many engineering applications. There are several ways how to create porous materials with suitable properties. One of the ways is to use nanoparticles followed by their assembly into 3D structure. In the present study we are using aggregation of nanoparticles to create bulk material. To optimize properties of porous material in this work we investigate the aggregation process, where nanoparticles of various shapes will be used as building blocks. Experimental investigate is done for both diluted but also concentrated suspension of particles under stagnant conditions. It was found that presence of fibers significantly influence the aggregation phenomena. Gained knowledge will be used in the future to optimize porous material mechanical properties.

Vznik PtO_x v automobilovém oxidačním katalyzátoru a jeho vliv na konverzi NO

Autor: Bc. Jiří Štěrba
Ročník: M2
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Emise produkované spalovacími motory automobilů přispívají ke znečištění životního prostředí. Za účelem snížení těchto emisí jsou do výfukového systému zařazeny automobilové katalyzátory, které pomocí chemických reakcí přeměňují nespálené zbytky uhlovodíků, oxidy dusíku a oxid uhelnatý na dusík, oxid uhličitý a vodu. Cílem této práce je posoudit vliv vratné deaktivace platinových aktivních center na povrchu diesellového oxidačního katalyzátoru typu Pt/Al₂O₃. Byla provedena série izotermních experimentů při teplotách 150 °C a 200 °C s pulzy oxidu uhličitého a propenu. Při těchto experimentech byla sledována nejen deaktivace katalytických center (vznik PtO_x) v chudých podmínkách, ale i zpětná aktivace částic platiny způsobená pulzy CO a C₃H₆. Dále byla provedena série experimentů v podobě teplotních ramp se vstupní teplotou rostoucí od 80°C do 400°C a následně klesající zpět od 400°C do 80°C. U těchto experimentů byla sledována hystereze, neboli rozdíl mezi teplotou zapálení a zhasnutí oxidace NO. Tato hystereze je způsobena citlivostí reakce na stav katalytických center (Pt versus PtO_x), který se v průběhu experimentů měnil.

Senzory s iontově-výměnnými membránami, určené k detekci nukleových kyselin

Autor: Bc. Petr Kovář
Ročník: M2
Školitel: doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Mikrozařízení se zabudovanou iontově-výměnnou membránou nabízí celou řadu aplikací zaměřených např. na čerpání tekutin, úpravu pH roztoků, či separaci, zakoncentrování a detekci určitých (bio-)molekul. Tato práce pojednává o poslední ze zmíněných aplikací. Cílem je vyvinout sensor detekující přítomnost DNA/RNA molekul o dané sekvenci nukleotidů a stanovit jejich koncentraci. Tento sensor bude v budoucnu součástí zařízení detekující nukleové kyseliny ve vzorku krve, které jsou potencionálními biomarkery různých typů rakovin. Princip zařízení je založen na skutečnosti, že jednovláknová, záporně nabitá DNA/RNA významně ovlivňuje tok iontů aniontově-výměnnou membránou. Na povrchu takovéto membrány je nejdříve kovalentně navázána jednovláknová DNA sonda, která zajišťuje specifitu vůči hledané komplementární molekule DNA/RNA. Při úspěšné hybridizaci dochází ke zvýšení koncentrace záporného náboje neseného nukleovými kyselinami na membráně, jež obsahuje kladný fixovaný náboj. Vzniká systém podobný bipolární membráně, která zapříčiňuje přechod z elektrokonvektivně řízeného transportu iontů na transport řízený štěpením vody. Tento příspěvek bude zaměřen na vysvětlení principu fungování senzoru a prezentaci vybraných výsledků týkajících se specifické detekce nukleových kyselin.

Vliv tlakových ztrát na chování vanadové redoxní průtočné baterie

Autor: Bc. Jiří Charvát
Ročník: M2
Školitel: Ing. Jaromír Pociďič, Ph.D.

Produkce elektřiny z časově proměnlivých obnovitelných zdrojů strmě roste. Tento trend však vyžaduje budování nových stacionárních uložišť energie, které mohou pomoci stabilizovat tuto energii a zefektivnit její využití. Vanadová redoxní průtočná baterie se jeví jako ideální stacionární úložiště vzhledem ke snadno modifikovatelné kapacitě (kWh), vysoké účinnosti a velmi dobré životnosti. Klíčovou komponentou baterie je inertní elektroda, v tomto případě uhlíková plst, na níž dochází ke konverzi energie prostřednictvím elektrochemických reakcí. Použití uhlíkové plsti je motivováno její výbornou chemickou stabilitou, vysokou elektrickou vodivostí a nízkou cenou. Účinnost baterie velkou měrou závisí na odporu a elektrokatalytických vlastnostech plsti, současně je však třeba uvažovat energii potřebnou k čerpání elektrolytů skrz bateriový svazek. Cílem této práce je tedy nalézt optimum mezi tlakovou ztrátou, která se zvyšuje s kompresí plsti a elektrickým odporem, který se naopak se zvyšující se kompresí snižuje. K tomuto účelu byly navrženy dvě aparatury. Jedna, která umožňuje sledovat elektrický odpor plsti v závislosti na stlačení a druhá, která umožňuje sledovat tlakovou ztrátu v experimentální cele v závislosti na stlačení plsti, průtoku elektrolytu a vnitřní geometrii cely.

Vývoj technologie ke sledování změn v průsakových vodách z oblastí uložišť jaderného odpadu

Autor: Bc. Dominik Kralík
Ročník: M2
Školitel: doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

I přesto, že se místa pro trvalá uložišť jaderného odpadu vybírají s největší pečlivostí, stále existuje riziko kontaminace okolní půdy nebo podzemní či průsakové vody. V současné době se pro analýzu průsakových vod využívají klasické analytické metody, které jsou sice přesné, ale samotná analýza trvá příliš dlouho. Cílem vědců je vyvinout senzor, který by byl integrován na místě uložišť a poskytoval by data v reálném čase pro včasný zásah proti případné kontaminaci. Tato práce se věnuje vývoji průtočného elektrochemického senzoru, který by umožňoval kontinuální sledování změn v impedanci průsakových vod v místě jaderného uložišť, např. v prasklinách skal. V současné době testujeme tento přístup na modelovém systému skládajícího se z jednoduchého fluidního kanálku a tyčové měřicí elektrody. Zatímco kanálek má za úkol imitovat reálnou štěrbinu, tyčová elektroda je prvním prototypem měřidla, jenž by se později do reálných uložišť montoval. Tento systém se testuje pomocí měření elektrochemické impedanční spektroskopie na kanálcích naplněných různě koncentrovanými roztoky KCl za různých podmínek měření v různých režimech. V příspěvku budou prodiskutovány experimenty s vodnými roztoky KCl o přesně daných vodivostech (koncentracích) jak v ustáleném stavu, tak v průtočném systému.