

Otázky ke státní doktorské zkoušce - obor Chemické a procesní inženýrství
okruh: Reaktorové a bioreaktorové inženýrství
podokruhy: Chemické reaktory (1-8), Bioreaktory (9-16)

1. Základní definice: reakční rychlost a její varianty (složková rychlost, rychlost reakce vztažená na objem reaktoru, hmotnost katalyzátoru či množství aktivních center), stechiometrie, rozsah reakce, konverze reaktantu, klíčová složka, přebytek, selektivita, výtěžek produktu.
2. Reakční kinetika, mechanismy reakcí, heterogenní katalýza na jednom a dvou aktivních centrech (Langmuir-Hinshelwood, Eley-Rideal), Langmuirova adsorpční izoterma pro vícesložkový systém. Předpoklad ustáleného stavu pro meziprodukty, rychlost omezující krok. Závislost reakční rychlosti na teplotě a koncentraci reaktantu, inhibice. Odvození mechanismu reakce a vyhodnocení parametrů z naměřených dat. Mechanismy a kinetika deaktivace katalyzátoru.
3. Bočné (paralelní) a následné (sériové) reakce, optimalizace výtěžku žádaného produktu pomocí teploty a doby zdržení v reaktoru.
4. Reakční rovnováha. Závislost rovnovážné konstanty na teplotě a tlaku, výpočet z tabelovaných dat. Vyjádření rovnovážné konstanty v aktivitách, molárních zlomcích a parciálních tlacích. Kombinovaný vliv reakční kinetiky a rovnováhy na konverzi.
5. Matematické modely trubkového průtočného reaktoru: látkové a entalpické bilance, změna rychlosti proudění podél reaktoru, pístový tok, axiální disperze a vedení tepla, Danckwertsovy okrajové podmínky, gradienty v radiálním směru, heterogenní a pseudohomogenní modely s akumulací a v ustáleném stavu, tlaková ztráta. Modely ideálně míchaného průtočného a vsádkového reaktoru.
6. Distribuce dob prodlení v průtočných reaktorech – distribuční funkce, hustota pravděpodobnosti. Metoda vzruchu a odezvy. Popis reálných zařízení, součinitel axiální disperze, Pécletovo difúzní kritérium, kaskáda ideálně míchaných reaktorů.
7. Vnější přestup hmoty a tepla, součinitele přestupu a jejich výpočet z kritériálních rovnic. Použití součinitelů přestupu a prostupu v heterogenních modelech reaktoru. Vliv mezifázového povrchu, rychlosti proudění a teploty. Popis pro reakci omezenou vnějším přestupem hmoty.
8. Vnitřní difúze v porézním katalyzátoru, objemová a Knudsenova difúze, výpočet efektivní difuzivity, vliv molární hmotnosti složky, velikostí pórů, porozity, křivolakosti, teploty a tlaku. Balance reaktantu uvnitř porézního katalyzátoru, bezrozměrný Thieleův modul, faktor účinnosti.
9. Typy buněk, eukaryotní a prokaryotní buňky, struktura buněk, chemické složení buněk, od DNA k proteinu, fáze buněčného cyklu, získávání energie buňkami, energetika mikrobiálního růstu.
10. Rozdělení enzymů, enzymové reakce, kinetika enzymových reakcí, inhibice enzymů, vliv pH, iontové síly, teploty.
11. Imobilizované enzymy a mikrobiální buňky, metody imobilizace, vliv imobilizace na kinetiku enzymových reakcí. Transport hmoty v systémech s imobilizovanými biokatalyzátory, limitující děje.
12. Kinetika mikrobiálního růstu a produkce metabolitů, modely mikrobiálního růstu.
13. Pohyb buněk a chemotaxe, matematický model chemotaxe v prostorově jednorozměrném systému. Typy mikrobiálních interakcí, matematické modely mikrobiálních interakcí, soutěžení a vliv chemotaxe, systémy dravec-kořist.

14. Reaktory s enzymy a mikrobiálními buňkami a s enzymy, příklady použití reaktorů, jevy ovlivňující chod reaktorů, ideální chod reaktorů.
15. Přenos hmoty a tepla v bioreaktorech, transport kyslíku a jeho rozpustnost, $k_L a$.
16. DNA a proteinové technologie. Sekvenování DNA, amplifikace DNA, cDNA knihovny, genové inženýrství, genové editory.

Doporučená literatura

Gilbert Froment, Juray DeWilde, and Kenneth Bischoff: Chemical Reactor Analysis and Design
Charles G. Hill: An Introduction to Chemical Engineering Kinetics & Reactor Design
Scott H. Fogler: Elements of Chemical Reaction Engineering
Blanch H.W., Clark, D.S., Biochemical Engineering, Marcel Dekker, New York, 1997.
Alberts B. et al., Molecular biology of the cell, Abingdon, 5th edition, 2008.