

## *Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2*

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

**Počet účastníků:** 7

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

Sekce :            Procesní a chemické inženýrství 2

## **Reakce CO, uhlovodíků a NO<sub>x</sub> na oxidačním katalyzátoru automobilových výfukových plynů**

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

U klasických benzínových motorů dochází k oxidaci CO a nespálených uhlovodíků (HC) a současně redukci oxidů dusíku (NO<sub>x</sub>) na trojcestném katalyzátoru. To je možné pouze díky udržování vyváženého stechiometrického poměru vzduch:palivo. Vznětové (dieselové) motory spalují palivo za přísunu většího množství vzduchu (chudá směs), což vede k nižší spotřebě paliva, ale na druhé straně vzniká problém s nedostatečnou redukcí NO<sub>x</sub>. V přebytku kyslíku pak funguje běžný katalyzátor pouze jako oxidační. V rozmezí teplot 150-300°C sice může v závislosti na aktuálních koncentracích CO a HC docházet k částečné redukci NO<sub>x</sub>, ale produktem této neúplné redukce bývá často N<sub>2</sub>O. Tato práce zkoumá dosahované konverze CO, HC a NO<sub>x</sub> a selektivitu redukce NO<sub>x</sub> na oxidačním katalyzátoru v závislosti na teplotě a složení směsi. V laboratorním reaktoru je provedena řada pomalých teplotních ramp pro různá složení vstupního plynu, při kterých se sledují výstupní koncentrace NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O, CO, HC. Z těchto dat je pak vyhodnocena kinetika jednotlivých reakcí a vzájemné inhibiční efekty, které ovlivňují zapálení. Ukazuje se, že rozsah redukce NO<sub>x</sub> silně závisí zejména na koncentraci HC a redukce pomocí CO prakticky neprobíhá. Pro simulaci reaktoru je použit 1D heterogenní model s pístovým tokem a pro vyhodnocení kinetických parametrů simplexová optimalizační metoda.

Sekce :            Procesní a chemické inženýrství 2

## **Příprava a charakterizace bifunkčních vzduchových elektrod**

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

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

Sekce :            Procesní a chemické inženýrství 2

## **Experimentální studie toku kapaliny po nakloněné desce**

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

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

Sekce :            Procesní a chemické inženýrství 2

## **Difúze v polymerech měřená na základě dynamiky tlakové odezvy**

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

Difúze v polymerech je proces s velkým významem pro výrobu polymerů a jejich aplikace. V rámci této práce byla přestavěna a otestována aparatura pro měření dynamiky tlakové odezvy („pressure-decay“), která slouží k měření difúzních koeficientů nízkomolekulárních látek v polymerech. Kromě popisu nové konstrukce aparatury bude též představena metodika pro vyhodnocení naměřených difúzních dat a jejich teplotních závislostí. Aparatura „pressure-decay“ je vhodná pro vzorky ve formě filmů a je schopna měřit do teplot 200°C a tlaků 3 MPa. Díky vysoké maximální teplotě je možné měřit též děje probíhající v polymerních taveninách. Z měření dynamiky tlakové odezvy lze také vyhodnocovat základní morfologické parametry porézních částic polyolefinů a zkoumat mechanismy difúze v semi-krytalických polymerech. Výsledky získané v rámci této práce byly též porovnány se staršími daty naměřenými pro jiný typ polyethylenu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

## **Příprava mikrocelulárních polymerních pěn pomocí vysokotlakého CO<sub>2</sub>**

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

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

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

## **Povrchová úprava alginátových částic a studium jejich vlastností**

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

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

Sekce :            Procesní a chemické inženýrství 2

## **Studium kinetiky reaktivní granulace pro výrobu detergentů**

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

Sodná sůl kyseliny dodecyl-benzensulfonové je v současnosti nejrozšířenější povrchově aktivní látkou používanou v pracích práscích a dalších čisticích prostředcích. Vyrábí se suchou neutralizací kyseliny dodecyl-benzensulfonové pomocí uhličitanu sodného v reakčním granulátoru, kde dochází k nástřiku kyseliny do mechanicky promíchávaného lože uhličitanu. Specifikem této technologie je, že kyselina kromě reaktantu plní i funkci pojiva mezi částicemi uhličitanu a reakční kinetika tedy neovlivňuje pouze celkovou konverzi ale i fyzikálně-chemické vlastnosti vznikajících granulí. V této práci budou prezentovány výsledky z měření kinetiky suché neutralizace v laboratorním granulátoru. Reakční kinetika byla vyhodnocena ze závislosti objemu vyvinutého oxidu uhličitého – vedlejšího produktu suché neutralizace – na čase při různých teplotách a rychlostech míchání. Byl rovněž sestaven matematický model popisující kinetiku suché neutralizace a jeho platnost byla ověřena sérií experimentů. Kinetické experimenty byly rozšířeny o zkoumání kinetiky formování granulí v závislosti na velikosti primárních uhličitanových částic a době granulace. Prezentovány budou distribuce velikosti granulí v závislosti na výše zmíněných proměnných. Struktura částic byla zkoumána elektronovou mikroskopií a rentgenovou tomografií.