

Studentská vědecká konference 2004
Názvy sekcí, počet účastníků a členové hodnotících komisí
na Fakultě chemicko-inženýrské

Sekce: Analytická a fyzikální chemie

Počet prací: 6

složení komise: Doc. Ing. Radko Volf, CSc. – předseda
Doc. Dr. Pavel Matějka
Ing. Radka Pataridu, Ph.D.
Doc. RNDr. Petr Voňka, CSc.
Ing. Michal Bureš, CSc.

Místo konání: zasedačka děkanátu (A402) od 9:00.

Studium interakce derivátů distamycinu s DNA pomocí
spektroskopie NMR

Autor: Jarmila Foltýnová
Ročník: IV.
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Marcela Tkadlecová, CSc.

Přírodní distamyciny a jejich synteticky vytvořené deriváty jsou velmi intenzivně zkoumanými látkami pro svou schopnost interakce s DNA. Této vlastnosti je možno využít pro vývoj nových léků proti virovým onemocněním a k léčbě rakoviny.

Na ústavu analytické chemie byla již dříve syntetizována řada derivátů distamycinu lišící se počtem N-methylpyrolových jednotek. Oproti přírodní formě obsahují látky navíc v centru molekuly Trögerovu bázi. Studium interakce DNA s těmito látkami je na ústavu tématem širšího projektu, v jehož rámci byl zatím pomocí cirkulárního dichroismu zkoumán vliv interakce na makromolekulu DNA.

Naproti tomu spektroskopie NMR umožňuje studovat vliv interakce na malou molekulu derivátu distamycinu a určit na ní vazebné místo, což bylo také hlavním cílem této práce.

Bylo pozorováno, že přídavky DNA k roztokům jednotlivých derivátů způsobují rozšiřování vodíkových signálů ve spektrech derivátů a také snižování odpovídajících relaxačních časů. Obojí je ve shodě s předpokládanou vzájemnou interakcí. Výsledky jsou diskutovány pro různé deriváty s ohledem na možné vazebné místo a porovnávány také s již známými poznatky získanými měřením cirkulárního dichroismu.

Stanovení limitních aktivitních koeficientů alkoxy alkoholů
ve vodě

Autor: Václav Křepáček
Ročník: IV.

Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

Metodou komparativní ebulliometrie byly stanoveny limitní aktivitní koeficienty 2-ethoxy ethanolu a 1-methoxy-2-propanolu ve vodě v teplotním intervalu 70-100°C.

Experimentu předcházela modernizace stávající měřící aparatury.

Ab initio – Tříčasticový příspěvek k modelu DIM - Modelování Krn+ klastrů

Autor: Petr Milko
Ročník: IV.
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Michal Bureš, CSc.

Práce se zabývá porovnáním výsledků výpočtů energií pro tříčasticový klastr s nábojem +1 metodami ab initio, konkrétně CCSD(T), a výpočtem DIM (diatomic in molecule), což je metoda semiempirická. Získané hodnoty energií z výpočtů ab initio budou sloužit k vylepšení metody DIM, která je tvořena na základě dat získaných pro dvoučasticový klastr.

Pro výpočet byla použita Dolgova báze jež byla optimalizována pro atom Kr a dále rozšířena. Jelikož je optimalizována na atom, bylo nutné ji přizpůsobit pro klastr přidáním dvou funkcí g postihující vzájemnou interakci atomů Kr v klastru. Dále s přihlednutím k tomu, že každý atom má 36 elektronů, byly atomové orbitály pro vnitřní elektrony, kromě elektronů čtvrté energetické hladiny nahrazeny efektivním core potenciálem s relativistickými korekcemi.

Byla volena geometrie označována bodovou grupou C_{2v} tzn. rovnoramenný trojúhelník. Máme tedy planární útvar.

Výpočet CCSD(T) poskytl dva nejnižší energetické stavy, jeden pro symetrii reprezentovanou B₂ a druhou nejnižší reprezentovanou A₁. Tyto hladiny se kříží. Výpočet metodou DIM poskytl hladin devět. Tato metoda dále umožňuje výpočet spin-orbitální interakce.

Odhad limity prostorového rozlišení FT Ramanových map měřených na TLC stolku

Autor: Vadim Prokopec
Ročník: IV.
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Ramanova spektroskopie s použitím TLC stolku (x-y polohovacího zařízení ovládaného softwarem) je vhodnou a účinnou metodou pro studium povrchů a fázových rozhraní s možností záznamu spektrálních map příslušného (nehomogenního) vzorku. Při práci s tímto stolem (nástavcem) se používá geometrie 180° ("back-scattering" geometrie) vzorkové komory. V tomto uspořádání hraje pro prostorové rozlišení měřených map klíčovou roli průměr (stopa) excitujícího paprsku na vzorku.

Cílem této práce je určení průměru excitačního paprsku pomocí vyhodnocení experimentálních dat měřených s různým krokem posunu stolku. Měření bylo prováděno na vzorku složeném ze dvou homogenních polymerních materiálů s jasně patrnou hranicí fází. Byly naměřeny dvě sady spekter podél úsečky dlouhé 2 mm kolmé ke směru fázového rozhraní s krokem 0,1 mm a 0,05 mm. Spektra po upravení byla zpracována a vyhodnocena pomocí několika metod: PCA analýzy, shlukové analýzy a vyhodnocení jednotlivých pásů. K danému účelu byly použity programy Opus (verze 4.0) a Unscrambler (verze 9.1). Z předběžných výsledků vyhodnocení spektrálních map vyplývá, že průměr paprsku je větší než 0,1 mm a menší než 0,3 mm.

Užití kyvety s proměnnou tloušťkou vrstvy s piezoelektrickým pohonem k měření infračervených spekter vodných roztoků

Jméno: Helena Tokarová
Ročník: IV.
Ústav: analytické chemie
Školitel: Prof. Ing. Karel Volka, CSc.

Kyveta s piezoelektrickým elementem je optické zařízení vhodné k měření spekter v UV–VIS a IR oblasti elektromagnetického záření. Skládá se z části pevné a části pohyblivé, poháněné piezoelektrickým elementem. Vzdálenost mezi okénky kyvety z CaF_2 se mění s velikostí napětí vloženého na piezoelektrický element a pohybuje se v rozmezí ca 3–100 μm . Kyveta je vhodná na měření kapalin a roztoků silně absorbujících dané záření, tedy i vodných roztoků.

Cílem práce bylo popsat závislosti vzdálenosti okének kyvety a absorbance měřené látky na vloženém napětí. Za tímto účelem byla nejprve měřena spektra prázdné kyvety a vzdálenost okének byla určována z pozorovaných interferencí. Dále byla v kyvetě měřena spektra vody a vodných roztoků thiomocoviny a solí halogenidů. Byl navržen postup využívající interferencí na okénkách částečně naplněné kyvetě k odvození tloušťky měřené vrstvy. Získané výsledky zatím ukazují na malou reprodukovatelnost směrnice závislosti absorbance vzorku na vloženém napětí.

Aplikace metaloboranových clusterů v ISE s kapalnou membránou: **Od lipofilního přídavku k receptoru**

Autor: Jiří Tutsch
Ústav: analytické chemie
Školitel: Prof. RNDr. Vladimír Král, CSc.

Předkládaná práce demonstruje vhodnost použití boranových, karboranových, metaloboranových clusterů a od nich odvozených látek v iontově-selektivních elektrodách s kapalnou membránou (ISE).

Karborany vedle použití jako lipofilní přídavek představují prohloubení a rozsáhlé rozšíření předchozího projektu řešeného autorem, kdy byly sledovány i další možnosti využití karboranů a jejich derivátů jako receptorů pro kationtovou i aniontovou detekci v ISE. Látky založené na substituovaném karboranovém skeletu jsou schopny nejen optimalizovat citlivost (aplikace ve funkci lipofilního přídavku), ale i určovat vlastní selektivitu (aplikace ve funkci ionoforu). Parametry iontově-selektivních elektrod s borany vykazující nejlepší funkci byly dále optimalizovány. To bylo demonstrováno např. membránou pro detekci měďnatých kationtů či síranových a chloristých aniontů.

Z výsledků je zřejmé, že tyto látky jsou atraktivními sloučeninami pro další rozvoj v oblasti konstrukce nových elektrochemických senzorů a optimalizace těch stávajících.

Chirální paměť studovaná spektroskopií cirkulárního dichroismu

Autor: Ondřej Julínek

Ročník: 4.

Ústav: analytické chemie

Školitel: doc. RNDr. Marie Urbanová, CSc.

Konjugáty porfyrinů a biologických polymerů, proteinů a polynukleových kyselin, jsou významnými systémy, které přitahují dlouhodobě velkou pozornost. Hojně se vyskytují v přírodě: chlorofyl-bílkovinné komplexy jsou systémy, v nichž probíhají prvotní fáze fotosyntézy, krevní barvivo hemoglobin je rovněž porfyrin-bílkovinný asociát. V důsledku interakcí symetrických, tj. nechirálních, porfyrinů s chirálními matricemi, např. polypeptidy majícími helikální strukturu, mohou vznikat samoskladné systémy, u nichž pozorujeme optickou aktivitu původně achirálních porfyrinů.

V předkládané práci jsou studovány systémy tvořené anionickými a kationickými porfyriny (TPPS, TBAP, TMPyP, CuTMPyP). Jako chirální matrice byla zvolena kyselina polyglutamová, jejíž sekundární struktura může být laděna fyzikálně chemickými vlastnostmi roztoku, zejména pH. Spektroskopie cirkulárního dichroismu (CD) umožňuje sledovat zvlášť indukovanou optickou aktivitu porfyrinové části konjugátů pomocí spekter v oblasti Soretova pásu, a zvlášť strukturu polypeptidické matrice na základě spekter CD v UV oblasti. Práce je zaměřena zejména na prokázání přenosu chirální informace z matrice prostřednictvím kationického porfyrinu na porfyrin anionický.

Sekce: Ekonomika a management

Počet prací: 7

složení komise: Doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc. – předseda
Ing. Milan R. Paták, CSc.
Ing. Irena Volejníková, Ph.D.
Ing. Petra Vegnerová

Místo konání: C11 od 8.00 hod

Dotazníkové šetření v oblasti funkčních potravin

Autor: Šárka Hurychová

Ročník: IV.

Ústav: ekonomiky řízení chemického a potravinářského průmyslu

Školitel: Ing. Petra Hloušková

Funkční potraviny jsou poměrnou novým trendem v potravinářském zboží. Tyto potraviny mají kromě své základní funkce (funkce pokrmu) také další výhody, např. zvýšený obsah určitého vitamínu, obsahují navíc vlákninu, minerály apod.

Požívání funkčních potravin příznivě přispívá ke zdravotnímu stavu, avšak jejich vyšší cena v porovnání s „normálními“ potravinami některé konzumenty odrazuje. Ve svém šetření se chci zaměřit na zjištění obecného povědomí o funkčních potravinách mezi širší veřejností a také o tom, co na funkčních potravinách konzumenti oceňují.

Využití předpovědi poptávky při analýze materiálových toků

Autor: Julius Chaloupka

Ročník: IV.

Ústav: ekonomiky řízení chemického a potravinářského průmyslu

Školitel: Ing. Tomáš Formánek

Ve své práci se hodlám zabývat zkoumáním využití předpovědi poptávky při analýze materiálových toků. Předpověď poptávky má význam především pro výrobní podniky, distribuční a prodejní firmy. Jedná se používání matematických metod a modelů pro predikci budoucího vývoje, jak poptávky zákazníků po zboží a produktech, tak například vnitropodnikových potřeb nákupu surovin pro výrobu. Hlavním cílem je zpřesnit představu o budoucím vývoji a tak odbourat zbytečné skladování a vázanost podnikového majetku v zásobách. Hodlám na skutečných údajích z výrobního podniku v Čechách, demonstrovat efektivnost používání těchto metod, jejich sílu a ukázat tak na možné rezervy a zbytečné náklady, které se bohužel stále v mnoha podnicích zbytečně realizují.

Supply Chain management

Autor: Jan Jakovec

Ročník: IV.

Ústav: ekonomiky řízení chemického a potravinářského průmyslu

Školitel: Ing. Petra Vegnerová

Práce se zabývá Supply Chain managementem. SCM je velmi rozsáhlá disciplína, zahrnující celou řadu prvků. Popsání a vysvětlení důležitých bodů tohoto obsáhlého vědecko-ekonomického odvětví bude hlavní náplní této práce. Bude kladen důraz na zkompletování významných poznatků a utřídění znalostí jiných odborníků. Tzn. nejedná se o vymyšlení čehokoliv nového, ale o shrnutí a charakterizaci již existujících vědomostí za účelem utřídění informací do logického kontextu v českém jazyce. Jako hlavní nástroj pro řešení tohoto úkolu bude použit Supply-chain-operations reference-model version 6.0.

Analýza přepravních sazeb různých druhů dopravy

Autor: Eva Kemrová

Ročník: IV.

Ústav: ekonomiky řízení chemického a potravinářského průmyslu

Školitel: Prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

Dopravní náklady tvoří významnou součást logistických nákladů. Pro jejich optimalizaci je potřebné zvolit přiměřený způsob přepravy, který závisí na mnoha faktorech. Moje práce se zabývá porovnáváním jednotlivých druhů dopravy z hlediska kvality přepravy, přepravních nákladů, kapacitních možností apod.

Součástí práce je také porovnání cenových nabídek různých přepraveců a zjištění, zda je jejich počet a kapacity pro podmínky České republiky dostatečný.

Operativní plánování výroby polotuhých lékových forem

Autor: Petr Kollmann

Ročník: V.

Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu

Školitel: Prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

Příspěvek se zabývá operativním plánováním výroby. Vychází z konkrétního strategického a taktických plánů používaných ve firmě Zentiva, a.s. (z důvodů utajení budou některá data pozměněná). Je zde uveden konkrétní způsob rozpracování až do podoby operativního plánu, a to na provozu polotuhých lékových forem.

V příspěvku jsou také zmíněné nejběžnější problémy a poruchy, které zapříčiňují, že skutečnost se od plánů odlišuje.

Tento způsob operativního plánování je možné s určitými modifikacemi použít i v dalších podnicích příbuzného zaměření.

Využití strategických simulačních her ke zlepšení manažerských schopností

Autoři: Veronika Nolčová

Klára Švorčíková

Ročník: V.

Ústav: ekonomiky a řízení chemických a potravinářských podniků

Školitel: Ing. Pavel Hradecký

Simulační hra je určitým řešením rozhodovacího procesu na vytvořeném modelu, která slouží k procvičení postupného rozhodování a přispívá ke globálnímu pochopení souvislostí v řízení firmy. Model, ze kterého vychází, bere v úvahu různé varianty rozhodnutí. Mezi simulační hry, na kterých jsme si mohli během našeho studia vyzkoušet přijímání strategických rozhodnutí, patří Markstrat, The Global Marketplace a GMC Euromanager. Za hlavní přínosy simulačních her považujeme možnost implementace teoretických znalostí do praxe, rozvoj týmové spolupráce a analytického myšlení účastníků.

V naší práci klademe důraz především na porovnání přínosů, které tyto hry přinášejí v porovnání s nároky, které na hráče kladou.

Analýza preferencí stimulačních prostředků

Autor: Tereza Novotná

Ročník: IV.

Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu

Školitel: Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D.

Stimulační prostředky mají významnou úlohu při motivování pracovníků k vyššímu výkonu a také pro jejich pracovní spokojenost. Empirické výzkumy, které se dělají, se většinou orientují na zjišťování nakolik jsou lidé motivováni stimulačními prostředky, které se v jejich podniku používají. V publikovaných výzkumech však chybí novější studie zaměřená na zjištění stimulačních prostředků, které preferují samotní pracovníci.

Takový výzkum byl na vzorku pracovníků z oblasti chemického průmyslu a studentů VŠCHT Praha proveden v roce 1999. Ve své práci na tento výzkum navazují, s tím, že má práce se zabývá zkoumáním rozdílů mezi motivačními faktory pracovníků a studentů nyní a tenkrát. Použila jsem stejný typ dotazníku a vybrala i stejný výběrový soubor, jenž tvoří převážně studenti 4. a 5. ročníku VŠCHT Praha a zaměstnanci chemických a potravinářských podniků.

Dotazníkové šetření v oblasti funkčních potravin

Autor: Šárka Hurychová

Ročník: 4.

Ústav: Ústav ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu

Školitel: Ing. Petra Hloušková

Práce analyzuje současný stav informovanosti v oblasti funkčních potravin a také doplňků zdravé výživy. Sleduje postoj respondentů, v užití funkčních potravin a potravinových doplňků. Zkoumá názory respondentů na tento sortiment, jak z hlediska chuti, vzhledu tak i typu prodejních míst. Data jsou získávána pomocí marketingového výzkumu formou osobního dotazování. Dotazování byli studenti VŠCHT.

Tato práce má také za úkol zjistit současný trend zdravé výživy na trhu s doplňky potravin a prozkoumat vývoj trhu do budoucna.

Sekce: Chemické a procesní inženýrství
Počet prací: 7

složení komise: Doc. Ing. Dalimil Šnita, CSc. – předseda
Ing. František Hovorka, CSc.,
Ing. Lenka Schreiberová, CSc.,
Ing. Zdeněk Slouka,
Ing. Marek Bobák,
Ing. Mária Fijasová,

Místo konání: knihovna UCHI od 9.00 hod

Testování biokompatibility organických rozpouštědel na hleně Dictyostelium discoideum

Autor: Jitka Čejková
Ročník: IV.
Ústav: chemického inženýrství
Školitelky: Ing. Petra Vaňková, Ing. Hana Ševčíková, Csc.

V průběhu života hlenky *Dictyostelium discoideum* dochází ke shlukování rozptýlených buněk hlenky za účelem vytvoření dospělé houby se sporami. Shlukování je výsledkem chemotaktického pohybu buněk proti gradientu chemoatraktantu (cyklického adenosin-monofosfátu - cAMP), který je periodicky produkován buňkami v centru shlukování. Vznik a šíření koncentračních pulsů cAMP vrstvou buněk je dosud monitorováno jen zprostředkovaně, na základě faktu, že buňky v místě zvýšené koncentrace cAMP lámou světlo pod jiným úhlem než buňky v místech, kde je koncentrace cAMP nulová. V rámci grantu GAČR 203/04/1421 jsou vyvíjeny barevné indikátory cAMP (na bázi Azo-makrocyclických peptidů), které by umožnily sledovat šíření cAMP pulsů přímo. Předložená práce se zabývá testováním biokompatibility několika vybraných rozpouštědel, o nichž se předpokládá, že by mohla být vhodnými rozpouštědly pro vyvíjené indikátory, s hlenkou *Dictyostelium discoideum*

Sorption and degassing of penetrants in porous polypropylene particles

Autor: Martin Frühbauer
Ročník: IV.
Ústav: chemického inženýrství
Supervisor: Dr. Ing. Juraj Kosek

The knowledge of solubility and transport properties of penetrants in polymers allows us to separate transport, kinetic and thermodynamic effects in the catalytic polymerization of olefins. Sorption data of penetrants were measured gravimetrically at industrially relevant conditions in the apparatus employing the magnetic suspension balance. The gravimetric data were then corrected to the buoyancy of the swollen volume. We propose a simple model for the identification of the morphology of polypropylene particles from the results of gravimetric degassing measurements.

Návrh zařízení pro měření elektrolytické vodivosti v chemických mikrosystémech

Autor: Josef Chroust
Ročník: IV.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

Práce je příspěvkem týkajícím se problému zmenšování měřítka zařízení k měření vodivosti. Miniaturní vodivostní čidla jsou nezbytná při realizaci chemických mikrosystémů pracujících s roztoky elektrolytů, např. mikro analyzátory, mikroseparační zařízení a mikroreaktory. V práci je uvedena počáteční literární rešerše a základní teoretická formulace problému. Jsou uvedeny předběžné výpočty 2D a 3D simulace vodivostního čidla získaná pomocí programu Femlab. Bylo zkonstruováno průtočné zařízení pro měření teploty a vodivosti a jsou uvedeny náměty jak zařízení dále miniaturizovat. Byly testovány dva druhy komerčních elektronických zařízení pro měření vodivosti. Cílem práce je předběžně posoudit, v čem se měření vodivosti v mikroměřítku liší od standardně používaných metod.

Návrh zařízení pro studium elektroosmózy v chemických mikrosystémech

Autor: Tomáš Jindra
Ročník: V.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

Tato práce je příspěvkem ke studiu elektroosmotického toku v mikrosystémech. Doprava kapalin na základě elektroosmózy je velmi důležitá v chemických mikrozařízeních pracujících s roztoky elektrolytů, jejichž charakteristický příčný rozměr je menší než asi 50 μm . Byla provedena počáteční literární rešerše a základní teoretická analýza. Pomocí programu FEMLAB byly provedeny předběžné výpočty elektroosmotického proudění v 1D a 2D systémech. Bylo zkonstruováno zařízení pro měření malých průtoků elektrolytů způsobených vlivem elektrického pole. Byly provedeny základní experimenty a jsou diskutovány cesty k zdokonalení zařízení. Jsou diskutovány metody vytváření mikrostruktur pomocí litografie, odléváním z plastů a mikroobráběním na číslicově řízené mikrofréze.

Vizualizace acidobazického rozhraní v elektrolytické diodě

Autor: Miloš Svoboda
Ročník: IV.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Lindner, CSc.,
Konzultant: Ing. Zdeněk Slouka

Elektrolytická dioda je systém dvou elektrolytů oddělených přepážkou, která brání konvektivnímu toku, umožňuje však tok difuzí a migrací. Vlivem vloženého elektrického pole dochází k vzniku ostrých koncentračních gradientů jednotlivých iontů v roztoku, znamenajících změnu pH roztoku až o 12 na prostorovém intervalu desítek mikrometrů; tato zóna prudké změny pH se nazývá

acidobazické rozhraní. Pomocí matematického modelování se podařilo rekonstruovat průběh koncentračních profilů, cílem této práce je experimentální ověření polohy acidobazického rozhraní pomocí vhodných absorpčních a fluorescenčních indikátorů s ohledem na velikost systému, diskuse vlivu koncentrace použitého indikátoru na chování elektrolytické diody a výběr nejvhodnějšího indikátoru pro další systematické studium chování systému. Součástí práce je sestavení experimentálního zařízení, zvládnutí a zdokonalení systému pro měření a vyhodnocování experimentů na platformě programu Matlab

Vývoj experimentálního mikroreaktoru s interakcí antigen-protilátka

Autor: Jakub Štěpánek
Ročník: IV.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Michal Příbyl

Práce je zaměřena na popis a využití imunoanalytických metod aplikovaných v mikroměřítku. V teoretické části je přehledně nastíněna problematika imunoanalýzy. V této práci je diskutována možnost využití silikonu (Sylgard 184) jako pevné fáze pro imobilizaci antigenu. Dále je přehledně zpracován význam blokačních činidel při heterogenní imunoanalýze. Teoretickou část uzavírá rozdělení imunoanalytických metod na dvě základní skupiny: kompetitivní a nekompetitivní. V experimentální části jsou popsány jednotlivé fáze experimentu od výroby mikrozařízení až po detekci komplexu antigen-protilátka pod fluorescenčním mikroskopem. Tato detekce je umožněna fluorescenčně značenými lidskými IgG (protilátkami). Experiment spočívá v imobilizaci antigenu na povrch silikonové kapiláry o průměru 100 μm , v blokaci nevyužitého povrchu pomocí BSA a v zabránění nespecifických vazeb detergentem (Tween-20). Po blokaci následuje navázání protilátky na antigen. Na konci práce jsou komentovány výsledky experimentů. Protože se silikon jako materiál pro heterogenní imunoanalýzu neosvědčil, je nyní hlavním cílem konstrukce vhodného mikrozařízení z polystyrenu a provedení nekompetitivní imunoanalýzy typu Sandwich.

Testování metody simultánního stanovení objemových koeficientů přestupu hmoty při destilaci pro systém metanol-etanol.

Autor: Lukáš Valenz
Ročník: V.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing.František Rejl

Pro návrh destilačních kolon z fundamentálních dat je nezbytná znalost transportních charakteristik výplně. Metoda simultánního stanovení objemových koeficientů přestupu hmoty při destilaci spočívá v porovnání experimentálních koncentračních profilů s profily vypočítanými simulací kolony. Objemové koeficienty přestupu hmoty jsou parametry modelu, na jehož základě je simulační program postaven. Stanovení obou parametrů je umožněno jejich proměnným vlivem na rychlost prostupu hmoty přes fázové rozhraní řízený měnící se hodnotou směrnice rovnováhy. Metoda byla dříve s úspěchem vyzkoušena pro neideální systém ethanol-voda. Byla studována použitelnost metody pro ideální směs methanol-ethanol, kde změna směrnice rovnováhy se složením je méně výrazná.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství
Počet prací: 7

složení komise: Doc. Ing. Igor Schreiber, CSc. – předseda
Doc. Ing. Vladimír Václavek, CSc.,
Dr. Ing. Pavlína Basařová,
Ing. Michal Příbyl, PhD.,
Ing. Tomáš Godula
Ing. Tomáš Postler,

Místo konání: učebna UCHI od 9.00 hod

Modelování kontinuálního úniku plynů pro účely integrovaného povolení (IPPC)

Autor: Petra Bagarová
Ročník: V.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Alexandra Novotná, CSc.,
Konzultant: Doc. Ing. Vladimír Václavek, CSc.

Aplikace zákona 76/2002 Sb. o integrované prevenci a omezování znečištění vyžaduje důkladnější a komplexnější přístup k minimalizaci a prevenci znečišťování životního prostředí. Součástí žádosti o integrované povolení je i studie zabývající se emisemi, resp. dodržením příslušných emisních limitů. Přeprogramování původní verze programu PLUME v jazyce VBA-EXCEL na bázi Pasquill-Giffordova disperzního modelu umožňuje jeho použití pro modelování kontinuálního úniku plynů při běžném provozu. Nová verze programu PLUME zohledňuje i existenci více zdrojů, jejich různou výšku i teplotu. Studie je mj. zaměřena na úniky CO₂ v souvislosti se zaváděním jejich kvót.

Filippovovy dynamické systémy

Autor: Tomáš Hanus
Ročník: V.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: doc. RNDr. Drahoslava Janovská, CSc.

Speciální, tzv. Filippovovy dynamické systémy jsou nespojitě, po částech hladké, autonomní soustavy obyčejných diferenciálních rovnic. Typickým jevem ve Filippovových systémech jsou tzv. klouzavé bifurkace. Popis nespojitosti vektorového pole pravé strany spolu s vlastnostmi trajektorií daného systému umožňují klasifikaci vznikajících jevů. Bifurkační analýza na vybraných inženýrských problémech je prováděna numericky, pomocí softwaru AUTO.

Determination of Characteristic Dimensions and Investment Costs of Chemical Process Equipment

Autor: Tomáš Jiříček
Ročník: V.
Ústav: chemického inženýrství
Supervisors: Doc. Vladimír Václavek, CSc. Ing. Alexandra Novotná, CSc.

A chemical engineer should be as concerned and knowledgeable about the economics of his projects and plants as about their scientific and technological aspects. Estimating the cost of a project varies from a quick estimate to a carefully prepared detailed calculation according to the stage of the project. Lang factor method is frequently used to estimate the order of magnitude of investment costs. Using this method, it is possible to extrapolate the total investment costs from the cost of the main equipment of the process. This method has been studied on the process of polycondensation of terephthalic acid and ethyleneglycole.

Matematické modelování reakce antigen-antibody v mikrokapiláře

Autor: Veronika Knápková
Ročník: V.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Michal Příbyl Ph.D.

V současnosti můžeme pozorovat prosazování mikrozařízení v oblasti imunoanalýzy. Imunoanalýza využívá ke kvalitativnímu i kvantitativnímu stanovení antigenu (Ag) nebo protilátky (Ab, antibody) jejich specifické reakce. V této práci je studován systém mikrokapilára, na jejichž stěnách je imobilizován antigen. Do mikrokapiláry vstupuje protilátka, která reaguje s antigenem za vzniku komplexu Ag-Ab. Ten se tvoří až do zaplnění volných vazných míst imobilizovaného antigenu. Pro popis tohoto děje byl uvažován prostorově dvourozměrný matematický model popisující rozložení koncentrace Ab v mikrokapiláře v čase. Model byl transformován do bezrozměrného tvaru a řešen analyticky i numericky. Pomocí numerické analýzy byly zkoumány koncentrační profily Ab a komplexu C v závislosti na odvozených bezrozměrných kritériích. Získané výsledky byly porovnány s výsledky analytického zjednodušeného modelu. Dále byla zkoumána rychlost pohybu koncentrační vlny Ab mikrokapilárou. Získané výsledky jsou prezentovány ve formě obrázků a umožňují kvalitativní odhad dynamického chování mikrokapilárního systému pro imunoanalýzu.

Vyhodnocování kinetických parametrů ukládání NO_x v aktivní vrstvě monolitického reaktoru

Autor: Matyáš Schejbal
Ročník: V.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Prof. RNDr. Milan Kubiček, CSc., Konzultant: Ing. Petr Kočí

Technologie ukládání NO_x je moderní metoda k odstraňování oxidů dusíku z výfukových plynů automobilů. Periodicky se měnící poměr vzduch/palivo způsobuje změny oxidačně-redukčních podmínek na vstupu do katalytického reaktoru. Při přebytku kyslíku jsou NO_x ukládány na povrchu a následně při přebytku paliva jsou zredukovány. Produkty povrchové reakce se desorbují a katalyzátor je regenerován. V práci jsou vyhodnoceny některé kinetické parametry

těchto dějů. Data z laboratorních experimentů byla porovnávána s výstupem matematického modelu a pomocí optimalizační metody byly vypočteny frekvenční faktory, aktivační energie a inhibiční konstanty přeměny NO/NO₂ a ukládání NO_x na povrch. Dále byla studována teplotní závislost ukládacích kapacit konvertoru.

Electroosmotic flow in reconstructed porous media

Autor: Libor Šeda
Ročník: V.
Ústav: chemického inženýrství
Supervisor: Dr. Ing. Juraj Kosek

Electroosmotic flow is an important mechanism of convective transport in many applications involving porous media, for example, capillary electro-chromatography, nano-filtration, electrodialysis and other membrane separations. One of the practical problems in the electric field driven separation processes in porous media is the relation between the micro-structure of porous media and electroosmotic flow. We have applied the methodology of spatially 3D reconstructed porous media and the solution of Navier-Stokes and Poisson equations in this media to address the above mentioned problem. Multigrid algorithm has been applied to solve the model equations. We present several case studies of electroosmotic flow in different types of porous media.

Využití katalytického reaktoru na odstranění oxidů dusíku z výfukových plynů automobilů

Autor: Jan Trdlička
Ročník: V.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Miloš Marek, DrSc.

V současnosti dochází k velkému nárůstu automobilového průmyslu a tedy i vzniku emisí NO_x. Záměrem této práce je ověřit schopnost katalyzátoru redukovat NO_x na N₂ z výfukových plynů automobilů. Skutečná směs výfukových plynů na vstupu do reaktoru je nahrazována modelovou směsí O₂, N₂, CO, C₃H₆, H₂, NO, CO₂, H₂O o definovaném složení, průtoku a teplotě. Výstupní koncentrace jsou zjišťovány pomocí analyzátoru Optima a hmotnostního spektrometru. V práci jsou zpracovány průběhy výstupních koncentrací NO_x v závislosti na čase při konstantních vstupních podmínkách. Dále jsou vyhodnoceny experimenty při nichž se na vstupu cyklicky střídá bohatá a chudá směs a vypočteny integrální konverze NO_x.