

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i.



ALMANACH

1960–2010



ÚSTAV CHEMICKÝCH PROCESŮ AV ČR, v. v. i.

ÚSTAV TEORETICKÝCH ZÁKLADŮ CHEMICKÉ TECHNIKY ČSAV

ALMANACH

1960–2010

PRAHA 2010

Almanach sestavila a autorský kolektiv řídila redakční rada ve složení:

Šéfredaktor: Jiří Hanika

Užší redakční rada: Jiří Hetflejš
Jan Linek
Vladimír Staněk
Ivan Wichterle

© Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., Praha, 2010

ISBN 978-80-86186-21-4

Obsah

Předmluva (<i>Jiří Hanika</i>)	4
Stručný historický přehled	6
Od výzkumu destilace k chemickým reaktorům pro systém plyn-kapalina (<i>F. Kaštánek</i>)	7
Vzpomínky na formování Oddělení vícefázových reaktorů (<i>Jiří Drahoš</i>)	20
K počátkům reakčních systémů plyn-tuhá látka (<i>Miloslav Hartman</i>)	29
Vzpomínka na George L. Standarta (<i>Jaroslav Ulbrecht</i>)	35
Chemické inženýrství na cestě z Košinky na Suchdol (<i>Vladimír Staněk</i>)	38
Cesta od sublimace k výzkumu aerosolů (<i>Jiří Smolík</i>)	46
Fázové rovnováhy ve světě, v Česku a v ÚCHP (<i>Ivan Wichterle</i>)	51
Termodynamická laboratoř E. Hály (historie, přítomnost a budoucnost) (<i>Karel Aim</i>)	56
Výpočetní zázemí ústavu (<i>Ivan Wichterle</i>)	69
Od katalýzy k textuře a transportu v pórech (<i>Petr Schneider</i>)	72
Laserově iniciovaná chemie a její začátky v ÚTZCHT / ÚCHP (<i>Josef Pola</i>)	77
NMR spektroskopie na ÚTZCHT a ÚCHP (<i>Jan Schraml</i>)	83
Jak procházel život a lidé oddělením analytické chemie (<i>Jan Schraml a Jan Horáček</i>)	92
Jmenný rejstřík	95
Seznam pracovníků ÚCHP k 31.12.2009	99

Příložené DVD obsahuje:

1. Text Almanachu (s barevnými obrázky)
2. PowerPointové prezentace seniorů ústavu o historii vědeckých oddělení ÚCHP
3. Film „GENESIS“, autoři: Kochloefl, Gut a Herout. (Zveřejněno s laskavým svolením ředitele ÚOCHB Dr. Zdeňka Havlase)

Předmluva

Milý čtenář dostává po deseti letech do rukou druhý Almanach Ústavu chemických procesů AV ČR, který je vydáván k jeho významným padesátinám. Autoři jednotlivých příspěvků se vracejí ve svých myšlenkách a vzpomínkách k mnohým zajímavým událostem, které společně se svými kolegyněmi a kolegy v ústavu prožili. Texty vznikly převážně na základě přednášek, které byly proslouhny v rámci odborných pohovorů ÚCHP na přelomu let 2007–2008. PowerPointové presentace najde čtenář na přiloženém CD disku. Kapitoly pocházejí z pera mimořádných vědeckých osobností, které vryly nesmazatelnou stopu do úspěšného vývoje dřívějšího Ústavu teoretických základů chemické techniky ČSAV, který byl v roce 1993 přejmenován na Ústav chemických procesů AV ČR. Nový název ústavu jistě lépe vystihuje charakter dnešního pracoviště, které se 1.1.2007 stalo veřejnou výzkumnou institucí.

Jak je všeobecně známo, ústav byl od samého počátku budován jakožto multidisciplinární vědecké pracoviště. Jeho zakladatel a první ředitel prof. Vladimír Bažant byl chemický technolog s širokým rozhledem a ctil moderní koncepcce, bez kterých se vývoj nových procesů nemohl úspěšně uskutečňovat. U vědomí toho přizval ke spolupráci excelentního chemického inženýra, prof. George L. Standarta, rodáka z USA, který v 50. a 60. letech minulého století položil základní kámen k mimořádně úspěšnému vývoji oboru chemického inženýrství u nás. Vědecký výzkum chemických procesů se samozřejmě nemohl rovněž obejít bez solidního fyzikálně–chemického základu. Neobyčejně šťastnou okolností pro náš ústav byl proto příchod prof. Eduarda Hály a jeho týmu fyzikálních chemiků do nově budovaného areálu v Suchdole/Lysolajích, který byl otevřen v roce 1964.

Uznání významu zakladatelů našeho ústavu dnes připomínají bronzové busty profesorů Bažanta a Hály ve vestibulu ústavu, vytvořené nedávno vynikajícím fyzikálním chemikem prof. Zdeňkem Hermanem, působícím v Ústavu fyzikální chemie JH AV ČR. Fotografie těchto uměleckých děl dokumentují přiložené obrázky. Vzpomínku na životní dráhu prof. Standarta připomíná jedna z kapitol tohoto Almanachu, kterou sepsal jeho první aspirant prof. J. J. Ulbrecht, který po mnoho desetiletí působil v National Institute of Standards and Technology.

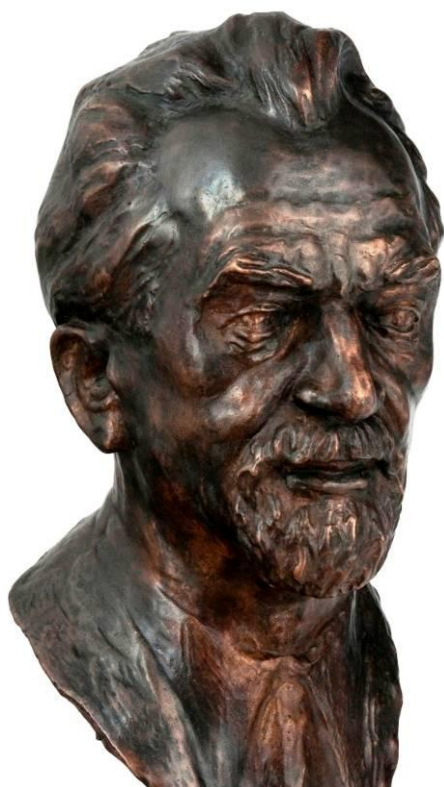
Autor této předmluvy měl dobrou příležitost pozorovat vývoj ústavu z povzdálí Dejvic, v posledních šesti letech se pak na profilu pracoviště aktivně podílel. Již jako student VŠCHT Praha navštěvoval zajímavé přednášky prof. Bažanta o technologii silikonů, později při obhajobách svých prací i při různých oponenturách úkolů tehdejšího státního plánu základního výzkumu se pravidelně potkával s prof. Hálou, Dr. Krausem, doc. Schneiderem, Dr. Hetflejšem, Dr. Chvalovským, Dr. Čermákem, prof. Kašánkem a mnoha dalšími svými současnými spolupracovníky. Po zřízení grantového systému u nás v polovině devadesátých let minulého století byl také spoluřešitelem zajímavých projektů Dr. Staňka, Ing. Jiříčného a Dr. Zdražila. Na těchto grantových projektech pracovala tehdy i řada studentů či doktorandů z VŠCHT.

Suchdolský ústav se vždy na VŠCHT Praha těšil mimořádné vážnosti a jistě lze říci, že vztahy mezi oběma institucemi byly a dosud jsou tak říkajíc nadstandardní. V průběhu let ústavem prošlo mnoho studentů VŠCHT, kteří ve zdejších laboratořích vykonávali bakalářské, diplomové a disertační práce. Rovněž mezi současnými vědeckými a výzkumnými pracovníky je zastoupení absolventů uvedené významné chemicko–inženýrské školy největší. Je samozřejmě velice dobré, že ÚCHP má od Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR akreditaci pro školení studentů doktorského studia v celé řadě oborů. V současnosti existují dohody o společném školení doktorandů nejen se všemi fakultami VŠCHT Praha, ale i s dalšími fakultami českých univerzit. Uvítali jsme také, že na pozice doktorandů a také postdoktorandů přicházejí rovněž uchazeči ze zahraničí. Mladé kolegyně a

mladí kolegové nepochybně přispějí k tomu, aby úspěšně nesli do budoucna pomyslný štafetový kolík Ústavu chemických procesů.

Přejme si do dalších desetiletí mnoho zdařilých vědeckých úspěchů, realizovaných nápadů a také dostatek finančních prostředků na řešení zajímavých projektů, aby se věhlas Ústavu chemických procesů AV ČR šířil do světa i v příštích desetiletích.

Jiří Hanika



Prof. Vladimír Bažant (1920 – 1973)



Prof. Eduard Hála (1919 – 1989)

Stručný historický přehled

1.1.1960	založen Ústav teoretických základů chemické techniky (ÚTZCHT)
rok 1964	stěhování ústavu do areálu na Suchdole
1.1.1970	první změna organizační struktury ústavu
3.7.1973	umírá prof. Bažant, ředitel-zakladatel ústavu
28.8.1989	umírá prof. Hála
27.1.1993	druhá změna organizační struktury ústavu (redukce počtu pracovníků)
1.7.1993	změna názvu ústavu na Ústav chemických procesů (ÚCHP)
1.1.2007	přeměna ústavu na veřejnou výzkumnou instituci (v. v. i.)

Od výzkumu destilace k chemickým reaktorům pro systém plyn–kapalina

Začátky ...“Košíka“... George Standart

Nemohu si hned v úvodu odpustit krátkou exkurzi do časů začátku formace našeho ústavu, a tím i začátků chemického inženýrství na našem ústavu, i když jste to jistě už slyšeli několikrát, jak vlastně došlo k založení našeho ústavu. Prostě koncem padesátých let, jak se tehdy říkalo: nazrála doba, aby vznikl nový ústav. Na Ústavu organické chemie a biochemie Československé akademie věd, kde byl ředitelem významný vědecký pracovník a velice politicky silný muž, profesor Šorm, byla též silná skupina silikonové chemie a skupina vědeckých pracovníků, kteří se věnovali heterogenní katalýze. V čele těchto skupin byli velmi dobří chemičtí technologové, zejména ing. V. Chvalovský, ing. M. Kraus a ing. K. Kochloefl, z mladších pak zejména ing. P. Schneider. V tendencích tehdejších názorů, že se akademická pracoviště mají zaměřovat vedle základního výzkumu zejména na aplikovaný výzkum a rychlé převádění výsledků do praxe, se ukázala politicky zdůvodnitelná nutnost mít v ČSAV ústav, který by se takovém transferu technologií do chemického průmyslu hlouběji věnoval. Ukázalo se, že právě shora zmínění organičtí technologové mají i silné chemicko–inženýrské citění, a že by mohly jejich skupiny tvořit základ takového nového ústavu. K založení nového ústavu ČSAV to byla jistě podmínka nutná, ale ne zcela dostačující. K ustavení ústavu nahrávaly však i nadstandardní osobní vztahy mezi profesorem Bažantem a profesorem Šormem, který byl tenkrát vedle ředitelování významného ústavu i předsedou (říkalo se prezidentem) Československé akademie věd, ale byl hlavně členem Ústředního výboru Komunistické strany, čili byly vytvořeny příznivé podmínky k tomu, aby vznikl nový ústav, a to pod vedením profesora Bažanta. Pan profesor Bažant byl vynikající osobnost, charismatický člověk, jako první ředitel dokázal vést vzorně nový ústav všemi úskalími té doby i na začátku tzv. normalizace v sedmdesátých letech. Byl velmi dobrý organický technolog, jeho pozice byla současně silná i politicky, což bylo v té době nutné, ale preferoval vždy dobré vědecké pracovníky, bez ohledu na jejich politickou orientaci. K založení ústavu by samozřejmě nestačilo formovat ústav jen na bázi tehdy moderní silikonové chemie nebo heterogenní katalýzy, bylo nutné kompletovat a vytvořit jakousi obecnější bázi, aby ústav měl vedle dobrého vědeckého zázemí i trochu ten žádaný technologický charakter. Tím, že se měl vytvořit nový ústav s vůdčí myšlenkou transferu technologií, bylo nutné, aby se k těmto skupinám připojil i obor chemického inženýrství. Ústav teoretických základů chemické techniky (ÚTZCHT) – jak se nový ústav jmenoval – jako nový ústav Akademie musel tedy jako akademické pracoviště plnit nejen funkci silného vědeckého ústavu, ale z důvodů, dnes bychom řekli taktických, i funkci aplikační, což se projevilo i v tom kostrbatém názvu dvou genitivů, tj. byl to ústav teoretických základů i ústav techniky. Název přečkal až do roku 1992. Koncem padesátých a počátkem šedesátých let minulého století byla velice silná skupina chemického inženýrství na VŠCHT v Praze a chemické inženýrství obecně, i když se tomu tak neříkalo, mělo v českých zemích poměrně slušnou základnu už od dob řešení problematiky, spojené s potravinářským průmyslem, zejména cukrovarnictvím. Jako obor se profilovalo hlavně na VŠCHT v Praze, později v Pardubicích a v různých chemických závodech, respektive u výrobců zařízení chemického a potravinářského průmyslu jako byla Královopolská strojírna, Spolek pro chemickou a hutní výrobu v Ústí nad Labem a Chemické závody v Záluží, které měly i svoje výzkumné a vývojové základny ve formě tzv. rezortních výzkumných ústavů, nebo v projekčních organizacích, jako byl Chemoprojekt. Tam se chemicko–inženýrské principy jasně uplatňovaly. Bylo tam mnoho velmi dobrých odborníků, kteří byli chemickými inženýry v tom pravém smyslu slova Chemical Engineering, jako např. doc. R. Kubička v Záluží. Na VŠCHT v Praze to byl zejména profesor H. Steidl, který byl uznávaným pedagogem se zázemím praxe v chemickém průmyslu a řada asistentů a docentů

katedry s pro mne blízkým ing. Skřivánkem, který se později stal ředitelem Výzkumného ústavu anorganické chemie v Ústí nad Labem, Ústavu anorganické chemie ČSAV, i vedoucím Katedry chemického inženýrství na VŠCHT Praha.

Počátkem padesátých let přišel do Československa mladý americký levicový intelektuál George Standart, který byl absolventem velice dobré americké univerzity, Kalifornského technologického institutu (CALTECH), který patří stále mezi 10 nejlepších univerzit na světě. G. Standart byl člověk s neobyčejným rozhledem, velice dobře fundovaný po stránce teoretické, obrovsky adaptabilní na nové věci v oboru. George Standart záhy získal v Československu v oblasti chemického inženýrství velmi významné postavení. Stal se profesorem na VŠCHT, byl laureátem Státní ceny Klementa Gottwalda, což byla tehdy „těžká váha“, a byl to člověk, který měl vlastně všude přístup, do všech továren a výzkumných ústavů, aby se vyjadřoval k různým problémům, které bylo třeba řešit, a to i k provozním. Byl nezastupitelný jednoznačně v tom, že nám představil tento obor v moderním americkém obzoru struktury jednotkových operací, protože doposud byla tato problematika u nás pojímána spíše v konzervativnějším německém pojetí „Verfahrenstechnik“. Povahou byl G. Standart extrovert, který rád dokazoval, že je skutečně na dobré vědecké úrovni. Po založení našeho ústavu se stal vedoucím oddělení chemického inženýrství, i když se to tak tehdy nejmenovalo; oficiální název byl Oddělení teorie pochodů v chemické výrobě (OTPCHV).

Když opomenou to, že vlastně první začátky chemického inženýrství na ústavu (které je možno nejspíše spojit s vývojem čtvrtprovozních chemických reaktorů) začaly v tzv. „budníku“, nové jádro chemického inženýrství se přesunulo do objektu v bývalé usedlosti Košinka v Libni. Předchozí „budník“ byly provizorní budky, které stály mezi VŠCHT a Ústavem organické chemie a biochemie, kde pracovala řada kolegů, kteří později přešli do nové budovy ústavu v Suchdole. Nelze opominout Pavla Mitschku, Mirka Endršta, už tam byl i vynikající technik a konstruktér Jarda Koch, kterého pořád můžete vidět čilého procházet naším ústavem (dnes ještě pracuje ve společnosti Kobit s.r.o.).

Usedlost Košinka byla pitoreskní směsicí budov, bůhví, kdo to místo objevil. Pobyt tam měly rozličné profese, od skladů různých organizací, přes zubařské dílny, skláře, státní podnik Barvy a laky... Bylo tam prostě umístěno všechno možné, když jste něco potřeboval, tak jste jenom obešel ten areál a vždycky se dalo něco sehnat. Bylo to nesmírně výhodné, když se stavěly nové aparatury. Tam, v těsném sousedství ateliéru prorežimního, ale docela dobrého malíře a sochaře Famíry, mezi bustami různých potentátů a aktů, byla také naše nová experimentální hala s dílnami a pár místnostmi. Působily tam dvě vynikající osobnosti, ve vedoucí funkci to byl právě G. Standart a pak inženýr Václav Kolář. Oba byli nesmírně fundovaní chemičtí inženýři, ale naturelem úplně různí. Zatímco Standart byl extrovert, rád se propagoval a uměl všechno zařídit, který bádal s tužkou v ruce, ing. Kolář byl introvert, stavitel skvělých aparatur, výborný experimentátor a poctivý dělník vědy. G. Standart mluvil dobře česky s roztomilým přízvukem, který nasazoval zejména při jednáních, dávalo mu to tehdy jistou exotickou výjimečnost. Typické pro něj bylo, že chtěl-li něco pro oddělení na rozhodujících místech získat, a to bylo často, říkal: jdu „kšičet“, vždycky chodil křičet, aby něco vydobyl a skutečně vydobyl prostory, vydobyl peníze, zatímco inženýr Kolář byl takový ten poctivý český sedlák, který byl velice schopný sestavit originální aparatury, vyhodnotit vynikající experimenty, najít nové korelace... Ing. Kolář by si zasloužil alespoň malé, po něm nazvané symposium, například něco jako „Hálovy přednášky“, alespoň od jeho aspirantů, kterých vyškolil řadu a neobyčejně přispěl k rozvoji českého chemického inženýrství. Bezesporu „ikonou“, které možná hodně vděčíme za orientaci našeho chemického inženýrství, byl ale G. Standart.

Vedle těchto dvou vynikajících vědeckých pracovníků tam od začátku byli ještě dva inženýři, Jarda Procházka a Josef Landau (později emigroval), kteří se zabývali problematikou kapalinové extrakce. Jardu Procházku jste všichni znali donedávna, a jeho

škola extrakce, dnes následovaná Alešem Heybergerem a Helenkou Sovovou, patří bezesporu k „rodinnému stříbru“ chemického inženýrství na našem ústavu. Na Košince začínali jako mladí kluci Milan Rylek, já jsem tam přišel o rok později v roce 1960, a v dalších letech tam přišli Sláva Hartman, Zdeněk Brož, Honza Čermák (třetí ředitel našeho ústavu), celá ta generace mladých chemických inženýrů vlastně vznikla na periferii Košinka. Mně se tam nesmírně líbilo a vzpomínám na to s nostalgií, byla to taková dobrá líheň, konaly se tam neformální přednášky a byla tam i dost velká legrace.

Já jsem tehdy dělal u prof. Standarta aspiranturu. G. Standart, jak už jsem uvedl, byl vynikající teoretik, ale strašně rád se pletl i do experimentální práce, i když na to byl dost nešikovný. Tenkrát aspiranti ještě dost pracovali manuálně v dílně, když stavěli svoje aparatury. Také já jsem tam jednou musel pilovat nějaký kus železné trubky, on přišel a díval se na mne a říkal „to není dobře, máš špatnou trajektorii těch špon“ a začal mně prostě vypočítávat, jak má vypadat optimální trajektorie špon, aby výrobek byl skvostný. Vzpomínám si, jak kolegyně Řeháková byla posazena k jeho stolu, protože v malých prostorách „Košinky“ se už jinam nevešla. On občas potřeboval něco v šuplíku ve stole, a vždy se galantně svoji roztomilou češtinou omlouval, že vyrušuje slovy „promiň, že tě neustále vzrušuji“. Teď mě zpětně mrzí, že jsme jej víc vědecky nevyužívali. Když jsme se sporadicky odvážili za ním přijít s nějakým problémem, obvykle hned nasypal do litrové baňky balík čaje, prstem ho natlačil dovnitř, vytáhl papír a začal (on psal levou rukou, i na tabuli psal levou, a pak si přehodil křídlo a plynule pokračoval řádek pravou) na tom papíru z hlavy odvozovat vztahy, vždycky popsal celou stránku, dopsal, přeškrtnl, zahodil, a tak plynule jako dobře namazaný stroj pokračoval a za dvě, tři hodiny měl v podstatě hotovou teoretickou část, která se mohla bez velkých úprav dát do publikace. Jeho neustálá touha byla zpracovávat experimentální data, která někdo naměřil na co největších pokusných zařízeních, která přímo miloval. Zastával názor, že scale-up dat hydrodynamických parametrů a parametrů přestupu hmoty ve vícefázových systémech z kolon menších průměrů než přes půl metru nemá smysl. Obvykle na jejich stavbu sehnal na ministerstvu chemického průmyslu peníze. Bylo to u nás pro něj tehdy zřejmě jednodušší, než později na univerzitě v Manchesteru v Anglii, kam od nás natrvalo odešel v roce 1967, kde pro nákladná experimentální zařízení pro studenty neměli moc pochopení.

G. Standart odešel z USA do Prahy (zde začínal na VŠCHT) v době, kdy ve Spojených státech byl velký boom chemického inženýrství, zejména v souvislosti s poválečným rozmachem petrochemického průmyslu. V popředí zájmu byly zejména jednotkové operace destilace a absorpce a problematiku difúzních procesů přinesl i do nově ustaveného oddělení OTPCHV. Získal peníze na postavení velké experimentální rektifikační kolony o průměru 1 m a výšce 6 m, která stála na provozu výroby methanolu v Chemických závodech v Záluží, a byla určena pouze k experimentování. I ve světovém měřítku to byla tehdy rarita a získané výsledky byly dost žádané a daly se dobře publikovat i v prestižních časopisech. Na stavbě kolony se podílel hlavně kolega Huml, který byl zaměstnancem chemických závodů a externím aspirantem u Standarta. Já jsem nastoupil řádnou aspiranturu (nyní doktorandské studium) v roce 1964 u svého školitele prof. Standarta právě s cílem dokončit stavbu kolony a získat na ní experimentální data účinností mezifázového přestupu hmoty a pokusit se je korelovat s hydrodynamickými parametry paro-kapalinového systému na patrových vestavbách různých geometrií. Tradiční, doposud užívaná kloboučková patra se pokládala za zastaralá a málo účinná a různé společnosti se v té době předháněly s uváděním nových typů rektifikačních pater na trh. Byl jsem v Záluží, s přestávkami na konzultace na „Košince“, tři roky. Myslím, že to byla pro mne dost dobrá škola, měl jsem k dispozici čtyři techniky, řešily se provozní a organizační problémy, současně se přitom studovalo a v nepřetržitém směnovém provozu měřilo. Data o účinnostech rektifikačních pater byla tehdy v oblasti firemních know-how a v literatuře nebylo mnoho z teorie přestupu hmoty při rektifikaci

publikováno. Sháněly se všelijakým způsobem prospekty a výkresy různých typů komerčních pater, podle kterých se v Královopolské strojárně vyráběly repliky, které se pak testovaly. Někdy to vyvolávalo paradoxní situace, protože data naměřená na našich replikách byla mnohdy lepší, než publikovaná originálním výrobcem. Občas tomu ale bylo i naopak: na konferenci v anglickém Brightonu jsme s ing. Humlem předvedli obrázek srovnání účinností a korelace tehdejších známých pater, kde zcela nejhorší se ukazovala patra společnosti APV West. Bohužel tam byl přítomen i zástupce této firmy, který nás korektně, ale tvrdě poučil, že se to takhle nedělá, a že to toleruje jen proto, že jako účastníci z komunistického bloku neznáme etiku byznysu. Ten obrázek potom otiskli v Perrym a strašil tam až do nového vydání...nevím, jak jim pak ten byznys šel... V Záluží mne potom střídal Slávek Hartman. Ta kolona pak skončila neblaze, protože na výrobě methanolu došlo k výbuchu a naše jedinečná kolona byla rozmetána do okolí... G. Standart byl svým způsobem velice nekompromisní pedagog. Kromě konzultací v Praze mě jezdil do Záluží kontrolovat každých 14 dní vlakem. Tam kromě kontroly naměřených dat mne zkoušel z matematiky a z fyzikální chemie ke kandidátskému minimu, a pak jsme se v pátek vraceli společně zpět, což bylo vždycky velice směšné, protože on neustále pracoval, a to i ve vlaku. Situace: nabitý vlak, který ve 3 hodiny odpoledne odjíždí ze Záluží plný slovenských pracovníků, kteří se vracejí na víkend domů. Standart působil vždy se svým knírem, který ho dělal cíleně starším, velmi autoritativně, takže mu hned udělali místo, on si sedl, vytáhl matematiku a začal mně zkoušet. Já jsem stál nad ním a Standart velice brzy usnul a ta jediná knížka (učili jsme se z amerického Woodse) byla už značně osahaná a v salátovém vydání, vždycky se rozletěly listy, spolucestující to všichni sbírali, takže on to zase otevřel a pokračoval, no prostě bylo to náramné. Jeho smysl kdekoliv usnout byl obrovský. V Záluží ve výzkumném ústavu, kde jsem měl azyl, obvykle úřadoval na židli u proskleného okna, trochu nad úroveň silnice. Seděl po americku, nohy na stole, knihu v ruce a už spal. Když byly dvě hodiny odpoledne a celá fabrika šla domů okolo výzkumáku, byl to pro ně asi zajímavý pohled. Okamžitě se ozvaly telefonáty na vedení ústavu a psaní na závodní výbor Revolučního odborového hnutí, že „my, pracující, tady dřeme a vy, výzkumníci, tam chrápete“.

V té době bylo obzvláště moderní jednoduché patro dodávané firmou Shell, tzv. turbogridové. Byly to vedle sebe vodorovně položené tenké pásy, mezi nimi štěrbinu o různé světlosti. Bylo to první tzv. bezpřepadové patro, kdy na rozdíl od klasických přepadových, protékala kapalina i pára stejnou štěrbinou. Patra měla mnohem vyšší prosazení páry, než klasická, takže se zdálo atraktivní je zavádět. Nevýhodou byla jejich citlivost na udržení vhodné výšky pěny na patře: při přerušení toku páry pěna spadla a účinnost rychle poklesla. Na základě našich výsledků se rozhodli v provozu methanolu v jedné výrobní koloně nahradit klasická kloboučková patra (pára je zde rozdělována tzv. kloboučky do přepadovou hrází stále udržované výšky kapaliny na patře, takže při snížení dodávky páry pěna na patře zůstává) těmi novými, turbogridovými. Zpočátku to byla nesmírná katastrofa, obsluha byla samozřejmě celý život zvyklá na pružná kloboučková, a najet tu kolonu a udržet v ní vhodný hydrodynamický režim byl dost velký problém, zvláště, když už hořel výrobní plán exportu methanolu. Uvědomil jsem si tehdy, že přenos výsledků získaných za pečlivého hlídání parametrů procesu do reálného světa jejich pravděpodobných fluktuací a volnější pracovní disciplíny je dost svízelný... Nakonec se to podařilo ustálit, ale asi už tam jsou dnes jiná patra.

Ing. Kolář se zabýval také problematikou hydrodynamiky a transferu hmoty ve vícefázových systémech, ale jeho náhled, na rozdíl od Standarta, který problematiku destilace a absorpce nazíral z obecné pozice transportních jevů a termodynamiky, se Václav Kolář snažil proniknout do problému spíše na úrovni představ na molekulární úrovni a mikroturbulence. Jeho publikace měly ve světě velký ohlas, ale jeho skromnost a absolutní nechuť prezentovat se na prestižních univerzitách – i když bylo tehdy obtížné vyjíždět – byly i příčinou, že se nestal takovou „ikonou“ českého chemického inženýrství jako Standart.

Ostatní aspiranti, kromě Slávy Hartmana a Honzy Čermáka, tj. Zdeněk Brož, Vláďa Staněk, Milan Rylek, Milada Řeháková (učila později v New Yorku na Cooper Union) a Jirka Přenosil (emigroval a učil na ETH Curych) spíše dělali problematiku spojenou s hydrodynamikou. Rylek dělal průkopnickou práci v hydrodynamice patrových kolon a další hoši už potom dělali hydrodynamiku náplňových, ale o tom pojednává jinde kolega Staněk.

V roce 1964 si mě Standart vzal jako asistenta na Kubu, kam byl pozván, aby vybudoval na havanské univerzitě chemicko–inženýrskou katedru. Po krátkém pobytu se vrátil do Prahy a záhy pak odešel do Manchesteru na univerzitu. Tím skončila jedna velká standartovská éra českého chemického inženýrství. Vrátil jsem se koncem roku 1966, ale to už na nový ústav v Suchdole, kam přešli kolegové z Košinky a kde už byli mladší vynikající vědečtí pracovníci, odchovanci prof. Steidla, Ondra Wein a Kamil Wichterle (dnes oba vysokoškolští profesori). Našel jsem zde řadu nových výborných chemických inženýrů, jako byl Zdeněk Novosad, Vladimír Rod (myslím, že oba přešli z Chemoprojektu), kolega Ulbrecht, který však brzy po roce 1968 odešel do Spojených států. Nastala druhá etapa chemického inženýrství, tentokrát již na našem novém ústavu v Suchdole. V roce 1964 zde byla dvě velká chemicko–inženýrská oddělení, oddělení separačních procesů, vedené Ing. Kolářem a oddělení chemických reaktorů, vedené Ing. Zdeňkem Novosadem, kde též pracoval jeho bratr Jan. Výlučné postavení měla skupina chemické termodynamiky vedená prof. Hálou, kde pracoval a stále ještě aktivně vědecky pracuje Ivan Wichterle. Pro řadu z nás tím skončila historie „Košinka“ a nastala další etapa formování chemického inženýrství na ústavu.

Reaktory plyn–kapalina, kyselina tereftalová...

Vrátil jsem se v prosinci 1966 a byl jsem zařazen do oddělení chemických reaktorů, které vedl Zdeněk Novosad. Celý ústav žil v té době velkým projektem kyseliny tereftalové. Bez nadsázky, všechna oddělení se specifickým způsobem této akce zúčastňovala: od měření reakční kinetiky, přes vývoj a provoz reaktoru až k separaci a čištění produktu. Technologie přípravy kyseliny tereftalové jako suroviny pro výrobu polyesteru (tesilu) byla projektem, který byl tehdy ve značném zájmu nejvyšších stranických a vládních orgánů, byl považován za klíčový pro nový ústav a vedením ČSAV příslušně podporován. První výzkumy a zkoušky se začaly dělat už mnohem dříve, pracovala na tom právě skupina kolem inženýra K. Setínka a L. Beránka. Po čase se však najednou ukázalo, že schůdná technologie, založená na bázi přesmyku ftalanhydridu, by nebyla surovinově zajištěna a začalo se tedy bádát znovu od začátku na vývoji nové technologie, na bázi kyseliny benzoové. Oddělení chemických reaktorů, vedenému Z. Novosadem, připadla dosti náročná úloha navrhnout, s pomocí dílen vyrobit a uvést do chodu pilotní reaktor, kde by se získaly podklady pro návrh provozního reaktoru. V podstatě se jednalo o disproporcionaci benzoanu draselného na tereftalan draselný, který byl pro nás konečným produktem. Ten se předával další skupině pracovníků, kteří měli navrhnout a odzkoušet postup výroby a čištění surové kyseliny tereftalové. Reakční postup byl v praxi takový, že se práškový a vysušený benzoan draselný míchal s kadmennatou solí jako katalyzátorem, a za vysoké teploty kolem 500 °C a tlaku kolem 20 atmosfér pak mělo docházet k disproporcionaci benzoanu, přičemž vedle tereftalanu draselného vznikal jako další produkt odpadní benzen, který se měl recyklovat na benzoan draselný. Nápad to byl jistě originální jako pěkná chemie, ale z hlediska reaktorového to byla past. Udržet žádoucí hydrodynamický režim kontinuálně se pohybujícího práškovitého materiálu za vysokých teplot a tlaků je opravdu zapeklitý problém i pro podmínky, kdy nedochází k chemické reakci. Tím, že výzkum spojený s přípravou kyseliny tereftalové byl na ústavu v počátcích orientován na chemii na bázi ftalanhydridu a náhle se chemická koncepce změnila, ocitla se nepochybně celá organizace výzkumné a vývojové činnosti náhle ve značném časovém stresu, násobeném jistě i obavami z možnosti zpoždění politické objednávky. S odstupem doby dnes považují za

zřejmé, že základní chemický výzkum nově navrženého postupu byl udělán zcela nedostatečně, což se projevilo i při výběru a provozování pilotního reaktoru. Tematicky byly oba technologické postupy sice podobné, ale disproporcionační proces skýtá řadu úskalí technického rázu. Tak se například až při provozu reaktoru ukázalo, že proces disproporcionace práškovitého benzoanu draselného prochází řadou různě enthalpicky zabarvených kroků, které nebyly při studiu chemické kinetiky objasněny a kvantifikovány, a zejména proto, že během historie disproporcionace dochází k významným fázovým změnám. Chemický reaktor musel být navíc provozován za teplotně a tlakově velice náročných podmínek. Z. Novosad zvolil fluidní reaktor, což by byla jistě vhodná volba pro fázově inertní materiál, to však nebyl případ jemných částic benzoanu draselného. Reaktor musel pracovat za velmi náročných podmínek, za vysoké teploty a tlaku. Fluidní plyn byl oxid uhličitý. Bylo předpokládáno, že ve fluidní vrstvě bude docházet k disproporcionaci a produkt bude z vrstvy kontinuálně vynášen. Novosad bohužel nebyl informován o úskalí fázových změn. Během reakce totiž docházelo při zvolených pracovních podmínkách následně k roztavení a zatuhnutí směsi, což mělo za následek rychlé zatuhnutí materiálu jak ve vlastním objemu reaktoru, tak zalepení vstupních a výstupních dopravních cest. Tento fenomén nebylo možno potlačit žádnými následnými zásahy, protože příčina byla systémová. Samozřejmě byla snaha o mechanické zamezování ucpávání různými „šťouchadly“, kmitajícími a vibrujícími složitými pohyby v dopravních cestách. I v samotném reaktoru byla instalována různá míchadla, promíchávající fluidní vrstvu s cílem zamezit slepování částic do slepenců, počet takových míchadel se neustále přidával, až vnitřek reaktoru představoval v podstatě drtič a funkce fluidní vrstvy byla zcela paralyzovaná. Protože se reaktor rozrostl o řadu pohybujících se elementů, říkali jsme mu „betlém“. Z. Novosad, odchovanec Baťových mladých mužů, si vzpomněl na prémie, které se u Bati vyplácely za úsilí jeho zaměstnanců zlepšovat proces šití bot a rozhodl se obdobně podpořit naše úsilí při zprovoznění „betléma“ pobídkovým finančním systémem s tím, že za každé vyrobené kilo tereftalanu bude vyplácet dost zajímavou prémie. A opravdu sehnal peníze a v pátek vždy bylo slavnostní vážení vyrobeného produktu. Vážení bylo s přesností na jeden gram, Zdeněk byl u Bati vychován na přesnou práci a šlo o nemalé peníze. Všichni jsme již dopředu věděli, že nezbohatneme, protože reaktor více stál, než byl v provozu. K našemu, vždy se opakujícímu překvapení, pak technik Zíma, který vedl evidenci (pracovali jsme nepřetržitě na směny po dvojicích, kdo měl ten den čas) a jediný měl mít přehled, přinesl kotlík s „vyrobeným“ tereftalanem, zvážil se produkt, rozdělily se peníze, produkt se zapečetil a zamkl do skříně. Vždy jsme v němém úžasu přemýšleli, kdeže se takové množství bere... Bylo to tak každý týden a já skutečně do dneška nevím, kde technik ten tereftalan bral, asi to dělal někde doma na zahradě v kotli, nebo co, nevím. Takto to fungovalo až do té doby, kdy se jasně vyjevilo, že ten reaktor-drť – „betlém“ vůbec nepůjde zvětšovat a mezitím Hartman a Rylek, Strnadová-Soukupová, Šír, Rod, těch lidí bylo hodně, pracovali na tom, jak dostat z toho tereftalanu kyselinu tereftalovou a parta kolem Ing. Vítovce, jak ji sublimací vyčistit. I přes potíže s reaktorem se podařilo tehdy v ústavu vybudovat řadu velmi dobrých poloprovozních stanic, vlastně většina pracovníků ústavu byla integrována do této problematiky a byl to ten vzácný okamžik, kdy jednotlivá oddělení spolu byla nucena spolupracovat a potřebovala se. Od té doby na ústavu žádná podobná akce nebyla. Nicméně se v našem plánovaném hospodářství opět najednou navzdory plánům ukázalo, že benzen jako základní suroviny nebude dostatek, a že se celá akce kyseliny tereftalové z rozhodnutí vyšších řídicích a stranických orgánů ukončí. Zda pesimistický výhled o surovinové základně byl tehdy ten pravý důvod pro ukončení, není zřejmé, ale nakonec to bylo asi pro nás velké štěstí. Ten reaktor se vlastně nikdy nepodařilo bez problémů zprovoznit. Z. Novosad to nesl velmi těžce, myslím, že to byla i jedna z příčin toho, proč posléze onemocněl a odjel na léčení a já jsem převzal další práci. Nicméně bylo velmi nutné pro kladné ukončení celé akce nějaké, byť provizorní, reaktorové řešení nalézt a

při závěrečné oponentuře předvést. Podařilo se během několika týdnů nalézt řešení v podobě jakéhosi vertikálního kolonového perkolačního reaktoru: reakční směs se předem mechanicky formovala do několikamilimetrových peletky, které se po vysušení dávkovaly shora do reaktoru šnekem, v reaktoru se pak peletky gravitačně sunuly ke dnu reaktoru, kde byly vynášeny šnekovým vynašečem. Protiproudě postupoval horký inertní plyn. Kolona byla vysoká 1,5 m, průměr měla 200 mm. Bylo i pro mne překvapením, že se peletky při průchodu reaktorem nespékaly. Též reakční mechanismus byl zajímavý: neplatil slupkový mechanismus, tj. reakce neprobíhala od vnějšího povrchu peletky, ale nastartovala se uvnitř v ose peletky. Nikdy jsem se už k vysvětlení tohoto jevu později nedostal.

Celá akce s vývojem reaktorů byla velmi poučná: udržet v řízeném režimu tok tuhých částic i ve vertikálních kolonách je velmi obtížný úkol, protože překonat jevy spojené s jejich klenbováním a slepováním je nesnadné. Jsme-li nuceni zavádět do reaktoru k překonání těchto jevů pohyblivé části a různé vestavby, reaktor nelze v podstatě zvětšit. Směs po reakci může být v hrudkách, ale musí být sypká.

Přesvědčil jsem se o tom potom často, když jsem měl možnost například laborovat v chemickém závodě v Kolíně s kontinuálním poloprovozním reaktorem na výrobu methylchlorsilanu, kdy se do práškové směsi slitiny Cu–Si uváděl plynný methylchlorid. Sladit parametry, jako je velikost částic, dávkování, teplota a způsob rozdělování plynu do směsi, aby reaktor fungoval a byl průchozí, bylo velmi obtížné. Měl jsem možnost takový provozní reaktor vidět v Zápotožské: každý den se odstavoval, protože se uvnitř tvořily pevné uhlíkaté krusty a reaktor byl pro plyn neprůchozí. Zlatá absorpce a destilace!

Bylo nicméně nutné shromáždit výsledky získané provozem nového typu reaktoru pro závěrečnou oponenturu, což se povedlo. Ta nakonec proběhla dobře s konstatováním, že celý projekt kyseliny tereftalové se zastavuje, protože se změnila surovinová základna. Myslím, že tehdy spadl řediteli Bažantovi dost velký kámen ze srdce, takže ústav z toho vyšel se ctí. Byla to velká zkušenost, v ústavu převládal názor, že díky akci „tereftalová kyselina“ nakonec došlo i k vědeckému profilování jednotlivých skupin, které pak zčásti badatelsky pokračovaly v oblastech, nastartovaných touto akcí, jako je i dnes například Smolíkova (cesta od sublimace k výzkumu v oblasti aerosolů) a Hartmanova (reakce tuhých částic) skupina.

Samozřejmě, badatelská činnost Oddělení chemických reaktorů tehdy pokračovala souběžně s touto velkou událostí i po jejím skončení: vznikly zde nové výzkumné týmy, jako skupina vedená Vladimírem Rodem, kam přešla i Milada Řeháková a Lída Soukupová (extrakce s chemickou reakcí), skupina newtonských kapalin vedená kolegou Ulbrechtem, kde působili Ondra Wein, Kamil Wichterle a Stáňa Nováková, skupina Jana Novosada, který se věnoval problematice toků v sypkých hmotách a naše skupina reaktorů plyn–kapalina, kterou jsem později po Z. Novosadovi vedl, a kde jsem pak po dlouhá léta pracoval společně s vynikajícími a dobrými kolegy – s Milanem Rylkem, Honzou Kratochvílem, Ádou Zemkem, mimo jiné v ústavu nepřekonatelným vařičem dobrých likérů, nedávno zamřelým Arturem Radvanským a s mými aspiranty Mařenkou Fialovou a Jindrou Zahradníkem a později Markem Růžičkou. Jindra Zahradník si zaslouží samostatnou poznámku: byl to výborný člověk, invenční vědec, dosáhl mezinárodního uznání v oboru vícefázových chemických reaktorů a na cestě k pomyslnému vědeckému vrcholu odešel tam, kde se jednou setkáme všichni z naší skupiny. Stačili jsme spolu ještě napsat monografii o těchto reaktorech, kterou báječně přeložil do angličtiny, a která byla vydána ve Velké Británii.

Myslím, že si zaslouží ještě se vrátit i ke Z. Novosadovi. Byl vědecky velmi fundovaný a měl – jak se dnes říká – „tah na branku“ vypěstovaný u Bati. Myslím, že pozoruhodný byl jeho nápad inventarizace všech chemických reaktorů v závodech našeho chemického průmyslu. Jezdili jsme s Miladou Řehákovou a s ním po našich chemických závodech a zpovídali jsme obsluhu jednotlivých reaktorů: Novosad sestavil dotazník a vyplňovali jsme o jakou reakci se jedná, bilance složek, parametry a typ reaktorů, konverze, selektivity,...

Obvykle jsme museli konzultovat pracovní řády a dohledávat údaje u hlavního inženýra. Moc nás v těch fabrikách rádi neviděli, ale častokrát to bylo užitečné i pro ně, protože jsme objevili nějaké odstranitelné nedostatky a možnosti zvyšování produkce. Bohužel, projekt skončil smrtí Z. Novosada na počátku sedmdesátých let a manuál se již nikdy nedodělal.

V letech 1964–65, ještě v době kdy ústav žil kyselinou tereftalovou, jsem se zúčastňoval i různých jiných aktivit ústavu, kde bylo co do činění s chemickými reaktory. Jednou z docela velkých akcí ústavu byla tzv. methanolýza dřeva. Methanolýza dřeva, to byl dost megalomanský projekt, realizovaný ústavem v areálu papírny ve Štětí: Vsádkový reaktor objemu asi 5 kubických metrů se naplnil štěpky nekvalitního dřeva, na které se pak působilo horkým methanolem a plynným oxidem siřičitým. Měla se rozpustit hemicelulóza a současně měl vypadnout lignin, který se separoval z methanolu odstředěním. Celulózový produkt měl sloužit k výrobě méně kvalitních papírů, jako lepenky na obaly a podobně. Papír, který se z toho dále vyráběl v areálu byl vskutku nekvalitní a nehodil se posléze na nic, ale byl to proces, který měl být bezodpadový, protože se regeneroval methanol a další produkt – lignin, měl vylepšovat ekonomickou bilanci. Měli jsme dosavadní výsledky chemicko–inženýrsky zhodnotit, protože zprávy, které ze Štětí přicházely, byly dost pesimistické. Nicméně zařízení bylo na tehdejší dobu u nás na vysoké inženýrské úrovni, všechno to bylo v nerez, ale v životě jsem neviděl více korozivní systém, než tento. Jak se ukázalo, nepodařilo se do té doby jediný pokus dovést do konce, soustava teplý methanol–oxid siřičitý byla velmi agresivní a neodolala jí ani kvalitní švédská nerezová ocel. Ukázalo se, že informace, které dostával ředitel Bažant o jednotlivých šaržích, uváděné ve zprávách, byly složeny z řady nezdařených pokusů. Na první pohled bylo navíc zřejmé, že vůbec nelze ani přibližně spočítat látkovou bilanci procesu. I když obsluha byla zastoupena vysokoškolsky vzdělanými chemiky, opět se ukázalo, jak je důležité aplikovat i jednoduché chemicko–inženýrské principy: stačilo pokusit se kvantifikovat jednotlivé reakční kroky a optimalizovat dávkování oxidu siřičitého, a bylo možno šarži dokončit a provést alespoň přibližné látkové a ekonomické bilance, které se předtím odhadovaly „od oka“. Proces se ukázal i v tehdejší době snah o vlastní neimportované řešení jako velmi ztrátový, byl materiálově obtížně zvladatelný a pro vyrobený lignin nebylo žádné použití, i když byla zprvu proklamována jeho velká přednost pro ekonomiku procesu. Projekt, který stál mnoho prostředků, byl na základě našich měření ve Štětí ukončen. Kam se poděla celá technologie včetně nákladných odstředivek jsem se už nikdy nedozvěděl.

Pro oddělení chemických reaktorů nastala tragická doba v srpnu 1968. Vrcholíci problémy s najetím reaktoru na kyselinu tereftalovou byly znásobeny i situací s příchodem ruské armády. Již tehdy nervově labilní Z. Novosad tuto situaci neunesl duševně, a ředitel Bažant s velkým porozuměním pro jeho situaci jej poslal zotavit se na spřátelené výzkumné pracoviště v Anglii. Když se po roce vrátil, krátce nato zemřel. Já jsem po svém návratu z ciziny od roku 1967 měl na starosti skupinu, která se jmenovala skupina plyn–kapalina, ale to ještě bylo za Novosada. Původně jsem se měl vrátit do Oddělení separačních procesů, které vedl Ing. Kolář, ale vyreklamoval si mě právě Zdeněk Novosad do Oddělení chemických reaktorů, které vedl. Byl ke mně velmi velkorysý a nabídl mi, abych si vybral téma sám. Já jsem cílevědomě chemické reaktory nikdy moc nestudoval, a tak mne samozřejmě napadlo, že když jsem dělal destilaci, že budu dělat reaktory pro systém plyn–kapalina, místo pára–kapalina, protože jsou to systémy vlastně dost hydrodynamicky podobné. Myslím, že to byla docela šťastná volba, protože ve světě byly tehdy asi jen čtyři skupiny, které se této problematice věnovaly. Zejména dobří tehdy byli v Japonsku prof. Yoshida na univerzitě v Tokiu a prof. Deckwer na univerzitě v Oldenburgu v Německu. Bezesporu největší kapacita té doby však byl prof. Danckwerts a jeho indický žák M.M. Sharma v Anglii. Prof. Danckwerts byl v celém chemicko–inženýrském světě uznávaná osobnost. Byl zprvu také jediný, kdo se fundamentálně věnoval vlivu difúzních parametrů na rychlost chemických

reakcí v tomto systému. George Standart, když se vrátil v roce 1967 z cesty po Anglii, kde s ním měl pracovní schůzky, se mi svěřil, že mu Danckwerts říkal familiárně Georgi, a byl z toho úplně vedle. Ve skupině jsme pak začali s experimentálně nejjednodušším systémem, tj. s probublávanými reaktory, začali jsme studovat jejich základní hydrodynamiku a začali jsme s porozitou (mezerovitostí) probublávané vrstvy vodných roztoků vybraných organických a anorganických látek. Měřit průměrnou porozitu vrstvy kapaliny je experimentálně velice jednoduché (z rozdílu hladin mezi probublávanou a neprobublávanou vrstvou kapaliny), spokojíme-li se se zaznamenáváním průměrné výšky pěny. Měření kolísání porozity v čase, respektive rozložení lokální porozity v různých místech vrstvy, je však obtížné a vyžaduje již speciální měřicí aparatury ve vrstvě. My jsme se zprvu spokojili s průměrnými hodnotami celkové výšky vrstvy a snažili se nalézt nějaké obecnější korelace. Byl to pouze jen takový fenomenologický výzkum, ale byl užitečný jako způsob proniknutí do společnosti vědeckého světa reaktorů plyn–kapalina. Brzy se ukázalo, že ta porozita je vlastně docela zajímavým ukazatelem, a že se v tomto experimentálně jednoduše změřitelném parametru promítají rozhodující hydrodynamické i chemické vlivy. Ukázali jsme, že se dají nalézt korelace mezi mezerovitostí a koeficientem přestupu hmoty pro koalescentní i nekoalescentní systémy, jestliže se respektuje tendence bublin ke koalescenci při jejich kolizích. Obdobný přístup použil současně i Calderbank ve Skotsku. Studovali jsme jak různé typy rozdělovačů plynu ovlivňující porozity, tak i jevy spojené s makromícháním, a to i v závislosti na velikost kolony. Nalezené vztahy umožnily nalézt kritéria pro přenos dat spojených s přestupem hmoty na různá měřítka, což je již důležitý i praktický výdobytek. Studovali jsme různé typy plynokapalinových směsí, ale více méně jsme se vždy drželi modelového systému voda + aditiva – vzduch. Jedině Mařenka Fialová, ještě se jí za to dnes omlouvám, musela dělat chlorace organických rozpouštědel, samozřejmě se toho příkladně zhostila, myslím ale, že mne nemá od té doby moc ráda.

Zvolená soustava, spíše než do čistě chemických reakcí, např. katalyzovaných oxidací vodných roztoků kyslíkem, rezonovala s biologickými reakcemi, konkrétně s aerobními fermentacemi, které byly skutečně později předmětem mého zájmu. V poslední době jsem se pak pokorně vrátil k probublávaným reaktorům jako zajímavým aparátům pro pěstování různých druhů mikrořas.

Osmdesátá léta...

Dnes mohu směr studia reaktorů pro systém plyn–kapalina, kterým jsme se v šedesátých letech vydali, hodnotit jako úspěšný, studuje se nadále na našem ústavu pod vedením Marka Růžičky dodnes, ovšem za zcela jiných experimentálních podmínek. Že studium tohoto systému je užitečné, vidím nakonec i v tom, že přes dlouhodobý výzkum vlastně nikdo neumí průkazně určit mezifázovou plochu mezi rojem bublin a kapalinou v probublávané vrstvě, což je nejdůležitější parametr určující velikost přestupu hmoty, protože užívaná chemická metoda k její kvantifikaci je nepřímá a vychází ze zjednodušených představ o mezifázovém transferu hmoty. Naše skupina za výsledky komplexního studia těchto typů reaktorů byla odměněna Cenou ČSAV a sepsali jsme na toto téma i úspěšnou monografii. Z průmyslových aplikací rád zmíním intenzifikaci výroby ethylbenzenu (do benzenu za přítomnosti další kapalně fáze – katalyzátoru na bázi chloridu hlinitého – se bublá ethylen) spočívající v užití ejektoru jako rozdělovače plynu do kapaliny s cílem zvýšení mezifázové plochy kapalina–plyn, který současně přispívá i ke zvýšení mezifázové plochy mezi benzenem a katalyzátorem.

Přenášet poznatky z laboratorních modelů do praxe přinese často řadu nepříjemných zklamání, podcení-li se realita. Pro chemický závod v Neratovicích jsme měli navrhnout patrovou kolonu na chloraci vinylchloridu. Postavili jsme tu kolonu o průměru kolem 250 mm u nás v hale a vyzbrojili ji teflonovými perforovanými patry a odzkoušeli na vodě, kam jsme

přidávali různá aditiva ve snaze přiblížit se trochu fyzikálně–chemickým parametrům reálné látky. Byli jsme prostě pohodlní pracovat s originální kapalinou. Kolonu jsme po hydrodynamickém odzkoušení pak instalovali v provozu a byla to dost katastrofa, protože se kapalina vůbec neudržela na patrech. Ale vždy ty pokusy v průmyslu daly řadu podnětů k dalším výzkumům.

Vědecké renomé oddělení chemických reaktorů tehdy hlavně podporovala skupina vedená ing. Rodem, a zabývající se problematikou extrakcí s chemickou reakcí. Skupina, kde byla mimo jiné i ing. Strnadová, dodnes výborná analytička, byla úspěšná jak v oblasti teorie, tak v praktických aplikacích, zejména v problematice chemické extrakce kovů. Nezastupitelným spolupracovníkem byl fenomenální analytik ing. Zdeněk Šír.

V osmdesátých letech byla v rámci oddělení chemických reaktorů velmi úspěšná i skupina zabývající se teoreticky i prakticky řízením chemických procesů, pod vedením teoreticky velmi schopného, všestranně vzdělaného Honzy Čermáka, který se stal poté úspěšným ředitelem našeho ústavu. Na tehdejší dobu se skupina orientovala progresivním směrem automatizovaného sběru dat a užitím informačních technologií, což byl významný počín. Ve skupině z kolegů, s kterými jsem se ponejvíce stýkal, pracovali ekonomové Vrba a „playboy“ Někola, Tonda Havlíček a Ywetta Maléterová-Purová, která jediná ze skupiny zůstala aktivní na našem ústavu. Trvalým památkem po nich zůstal ještě dnes funkční velký sedmdesátilitrový fermentor, který na tehdejší dobu byl vybaven velmi progresivním systémem řízení. Byl navržen a spolu s technologií snímání dat a řízením, vymyšlenými právě v této skupině, získal značná národní ocenění a měl být vyráběn ve špičkovém zemědělském družstvu ve Slušovicích. Slušovické družstvo zavádělo do svého podnikání tehdy nevídané prvky tržní ekonomiky a ve výpočetní technice suplovalo jiné neexistující podniky. Za ředitele Čermáka byly na ústavu řešeny i velké technologické projekty, které sice rozsahem nedosáhly úrovně „kyseliny tereftalové“, ale na badatelský akademický ústav byly mimořádné. Dosáhly i významných ocenění na veletrzích, výstavách a byly i velkou zbraní při obhajobě postavení ústavu na příslušných výborech stranické organizace KSČ. Však také ředitel Čermák byl často kritizován „otci zakladateli“ Krausem, Setínkem a jinými vědeckými pracovníky, že tato činnost degraduje vědecké postavení ústavu. Ještě větší vlna kritiky, která však neopustila území ústavu, se však na něj sesypala, když se pod jeho patronací začal řešit problém zpracování kejdy hospodářských zvířat z tehdejších velkochovů. Byl to v Československu tehdy specifický problém, starší si pamatují, že nebylo často příjemné pobývat ve „zdravém“ venkovském prostředí. Hlavní podíl na originálním řešení měl Honza Červenka a projekt byl s úspěchem realizován ve třech zemědělských družstvech, byla prodána licence do zahraničí, ale posléze po změně koncepce velkochovů hospodářských zvířat po revoluci se projekt vytratil. V poslední době úsilí společnosti a směřování mnoha badatelských skupin na celém světě na využívání alternativních paliv však naše principy výroby bioplynu, které tenkrát měly díky tomuto projektu světovou prioritu, opět oživuje. Je fakt, že na akademickém ústavu práce s nevábnou kejdou však dosti lidem tehdy „nevoněla“. Dnes na to nahlížím jako na poznanou nutnost, řada lidí z ústavu díky tomu mohla tehdy v klidu bádát, a mám zkušenosti, že poznatky z aplikace vedou většinou i k novým tématům pro badatelský výzkum.

K velkým aplikačním projektům v té době patřil také vývoj fluidního reaktoru se suchým odsiřováním přídavkem vápence, který byl dokonce postaven v Trmicích. Řešil se pod vedením „fluidního“ Beránka-sokola – na rozlišení od Beránka-ovečky, který patřil do oddělení heterogenní katalýzy. Tato epizoda bude jistě popsána jinými, reaktor nakonec po předepsaném 72-hodinovém ověření funkce skončil a suchý způsob se u nás neuplatnil. Ale „vyřádilo“ se na tom dost mých kolegů. Ing. J. Beránek byl neúnavný zastánce této techniky, byl to patologický optimista, který ve snaze prosadit své, jistě originální nápady, způsobil často ústavu nečekané problémy. Sám jsem jezdil „hasit“ problémy do zemědělského družstva

v Krásné Hoře ve středních Čechách, kde podle Beránkových rad zrušili tradiční vytápění a nechali si nainstalovat malý fluidní reaktor, který však nesplnil jejich očekávání. Skoro nás při kontrolních dnech lynčovali.

Byla to taková zvláštní doba, publikovalo se hlavně v časopise Collection, který měl svoji rubriku chemického inženýrství, kterou jsem dokonce řadu let redigoval.

Po roce 1989...

Po roce 1989 jsme se dostali k problému čištění zemin a podzemních vod, kontaminovaných ropnými produkty v objektech kasáren po odchodu ruské armády. Sestrojili jsme první filmový bioreaktor typu vzduch–voda, kde byly na náplni z plastu imobilizovány mikroorganismy do adherovaného filmu, které konzumovaly ropné produkty jako zdroj uhlíku. Zeminy se dekontaminovaly přímo *in situ* jednoduchým způsobem jejich zkrápěním živými vodnými roztoky s mikroorganismy za jejich mechanického provzdušňování.

Ukázalo se, že je volný prostor k bádání právě v problematice dekontaminace nebezpečných látek, rozptýlených v životním prostředí, a začal jsem se tomu věnovat. Na rozdíl od tradičních syntéz nových látek, které mají obvykle významnou přidanou hodnotu, sleduje se v tomto případě způsob, jak je rozložit – u organických látek mineralizovat – na látky neškodné, bez valné ekonomické hodnoty. Navíc řešíme problém degradační reakce složek obsažených v minoritních koncentracích ve značném přebytku inertu. Možných postupů může být řada (chemické, biologické, fyzikální a jejich kombinace), ale rozhodující je, aby to bylo téměř zadarmo, což je svízelný úkol. Myslím, že řešení problematiky zneškodňování zvláště nebezpečných odpadů se dostalo naším úsilím na slušnou mezinárodní úroveň v oblasti environmentálního inženýrství. Nejvhodnější by pak byla možnost řešit dekontaminační problém, kdy by bylo možno předmět dekontaminace cíleně využít pro tvorbu jiných žádaných produktů. To je například proces snižování obsahu oxidu uhličitého v ovzduší. Tzv. skleníkovým plynům je dnes věnována značná pozornost, bohužel se tento problém přesunul od vědeckého k politickému. Jsem přesvědčen, že současné klimatické nerovnováhy nejsou primárně způsobeny antropogenní činností, ale proč vypouštět oxid uhličitý do atmosféry, když jej lze využít? Jednou ze zajímavých možností je jeho záchyt do mikrořas, z kterých lze získat řadu cenných produktů, zejména velmi žádaných nenasyčených mastných kyselin, karotenoidů, přírodních barviv atd. Uvažuje se o biopalivech z řas. Možnosti jejich kultivace jsou jak fototrofní ve fotobioreaktorech, tak heterotrofní v aerobních fermentorech.

A kruh se zvolna uzavírá, dostali jsme se od destilací, vícefázových reaktorů s plynnou a kapalnou fází, přes exkurzi do problematik pokročilých oxidací, reduktivních dehalogenací obzvlášť problémových látek, jako jsou polychlorované a polybromované sloučeniny, opět k probublávaným reaktorům plyn–kapalina...

Napadá mě, jaké jsou dnes perspektivy chemického inženýrství jako oboru, konstituovaného na koncepci jednotkových operací a v šedesátých letech též směřovaného, např. Birdem, do Chemical Engineering Science, nebo Transport Phenomena. Co dál v tom chemickém inženýrství, to je taková další etapa, nad kterou bychom se měli zamyslet dnes ve světle obrovského rozvoje informačních technologií, které chemické inženýrství rozhodujícím způsobem ovlivnily. Koncepci chemického inženýrství bude nutno jistě nověji orientovat, snad směrem až k molekulární úrovni, jak se o to před lety pokoušel Ing. Kolář, kdo ví? Mohou se chemicko–inženýrské principy, např. dosavadní teorie transportních jevů, uplatnit v nanotechnologiích? Jaké jsou možnosti mikroreaktorů? Může chemické inženýrství hrát roli tzv. produktového inženýrství?, což chápu tak, že aplikace chemicko–inženýrských principů může ovlivnit i kvalitu látek a cíleně ovlivňovat jejich vlastnosti.

Je samozřejmé, že i tradiční chemické inženýrství bude a musí hrát svoji roli v chemické a petrochemické výrobě, přijmeme-li jeho zjednodušenou definici, že to je vědní disciplína,

kteřá se zabývá výkladem a kvantitativním popisem dějů probíhajících v soustavách a zařizování chemického, biochemického a obecně spotřebního průmyslu.

Je zajímavé, že na ústavu jsme nedělali žádné mechanické operace, například míchání a homogenizace tuhých částic a prachů a nevěnovali se chemickému inženýrství jako účinnému aparátu pro materiálové inženýrství, což je v současné době dost žádané. Snad kromě Honzy Novosada, který studoval gravitační tok sypkých hmot ve vertikálních kolonách. Předváděl zajímavý pokus, který, vzbuzoval velikou radost, když přišla nějaká delegace: do třímetrové kolony, půl metru v průměru, navrstvil různě barevný písek do vrstev různé tloušťky. Po otevření otvoru ve dně kolony se to začalo sypat, po zavření otvoru to zalil roztaveným parafínem a když to ztuhlo, tak to rozřezal a měl krásný prostorový obraz, jak mu to v tom prostoru utíká, my jsme tomu říkali „Novosadova pyžama“.

Rád bych se na závěr vrátil k dobrému člověku, Arturu Radvanskému, který pracoval v naší skupině jako inženýr. Když jsem se zamýšlel nad obsahem tohoto příspěvku, Arturovi bylo už asi 84 let, nedávno jsem ho potkal a hned mi hlásil, že si koupil nové „kárvičky“, ale že už to přeci jenom není ono, ty rakouské sjezdovky už sjíždí s trojím zastavením, a ne šusem jako dříve, prostě, že stárí se už hlásí... Nestáčil jsem ten příspěvek dopsat, když Artur před několika dny zemřel... Přežil za války Osvětim, po válce vystudoval chemii a po anabázi kádrováka na Presidiu ČSAV přišel s prof. Bažantem do ústavu a posléze i do naší skupiny. V ústavu zastával zkrájed důležitou funkci předsedy stranické organizace, a když se na ústavu udál nějaký problém, který nebyl politicky „košér“, tak Artur to šel na příslušná místa „žehlit“. Na okresním výboru strany vždy úspěšně přesvědčil tetováním z koncentráku... Obecně na ústavu však byla politická atmosféra vždy korektní, na rozdíl od jiných ústavů a škol.

Artur Radvanský byl experimentální fenomén. Vzpomínám, jak v době, kdy jsme provozovali reaktor na výrobu tereftalanu, chodil často na noční směny, protože bydlel blízko ústavu. Vždy když nastupoval směnu, jsme mu říkali „na nic nesahej, jen to hlídej“; během krátké doby se však reaktor ucpal a v deníku bylo uvedeno „provedl jsem dvacet standardních poklepů dřevěnou palicí na reaktor, ani po opakovaných dvaceti poklepech se situace nezlepšila a když tlak stoupl nade všechny meze, musel jsem reaktor uzavřít“. Chodilo se tenkrát na ten reaktor dívat mnoho delegací, zejména z politických míst, a to byl Artur mistr v předvádění důležitosti operace. Během několika vteřin byl celý „pracovně“ pomazaný benzoanem draselným s kadmíem, předstíral tam obrovskou práci a vždycky vylezl nahoru na ten reaktor, začal něco montovat a dolů lítalo kladivo a pilník a všechno, takže ti delegáti rychle odešli. Jednou tam přišla s ochrankou delegace předsedů okresních výborů strany a Artur opět vyběhl do patra nad reaktorem, kde byly zásobníky a vstupy suroviny, a když jako spadl první předmět, tak se ještě nic nedělo, ale když spadl druhý, pistolníci už sahalí po pistolích, takže Artura jsme museli stáhnout, protože by ho určitě zastřelili. Arture, ty víš, že to je jen legrace a vzpomínka na tebe a přeji ti v tvém nebi nějakou fajn technologii.

Po změně politického režimu se obměnilo i vedení ústavu, byl jsem zvolen ředitelem, ústav prošel docela úspěšně i mezinárodní akreditací, a poté byl a je dále veden významnými vědci, prof. Jiřím Drahošem, významným chemickým inženýrem světového formátu, který vedl po dvě období evropské chemické inženýrství, dnes je předsedou Akademie věd ČR a v současnosti dalším vynikajícím odborníkem – chemickým technologem a chemickým inženýrem v jedné osobě – prof. Jiřím Hanikou.

Mnoho kolegů střední a „vyšší kategorie“ již na ústavu nepracuje, ale někteří jsou ještě tady: je to vynikající chemik a odborník světové třídy v homogenní katalýze Dr. Jiří Hetflejš, Ing. Aleš Heyberger, nezastupitelný v problémech extrakce, žádaný u nás i v zahraničí, Dr. Petr Schneider, mezinárodně uznávaný odborník v problematice porézních hmot a difúzních procesů, prof. Ondra Wein, vynikající chemicko-inženýrský teoretik v problematice

toku kapalin, a řada dalších..., určitě jsem na mnohé, kteří tvořili mnoho let dobrou pověst ústavu zapomněl.

Ale to už je jiná kapitola. Jsem přesvědčen, že ústav bude i v nových ekonomických souvislostech úspěšným vědeckým pracovištěm a že mladí vědečtí pracovníci budou dále rozvíjet tradici ústavu, a chemického inženýrství obzvláště.

František Kaštánek

Vzpomínky na formování Oddělení vícefázových reaktorů

Přišel jsem na ústav na podzim roku 1973, na studijní pobyt do tehdejší skupiny fyzikální chemie vedené profesorem Hárou. Bylo to vlastně jen pár týdnů po předčasném skonu profesora Bažanta, prvního ředitele ústavu – toho už jsem osobně nepoznal. Byla to doba, kterou lze parafrázovat knihou Genesis, kdy se duch kyseliny tereftalové stále ještě vznášel nad ústavem. František Kaštánek se ve své úvaze zmínil o tom, že se po zastavení technologických prací na „tereftalce“ postupně zformovalo Oddělení chemických reaktorů. Je jistě možné, že posloupnost vzniku jeho struktury nemusí být časově úplně korektní, ale určitě tři výzkumné skupiny, tedy "kapalina–kapalina" (V. Rod), "kapalina–plyn" (F. Kaštánek, J. Zahradník) a "inženýrství neneutonských kapalin" (P. Mitschka), byly založeny nejdříve. Až později se k nim připojily další skupiny, to je naše skupina "diagnostika, modelování a řízení chemicko–inženýrských systémů" (J. Čermák), "reaktory tuhá látka–plyn" (M. Hartman), "fluidní technika" (J. Beránek) a "mechanika sypkých hmot" (J. Novosad), takže v roce 1978, kdy jsem přišel do Oddělení chemických reaktorů, mělo toto oddělení sedm skupin, z nichž tři tvoří základ dnešního Oddělení vícefázových reaktorů.

Než budu pokračovat ve vícefázových reaktorech, vrátil bych se ještě ke svému příchodu do ústavu. První polovina 70. let byla doba společenského temna, ale já jsem naštěstí přišel do velmi liberální skupiny fyzikální chemie k profesoru Hárovi, kde on sám, spolu s kolegy Ivanem Wichterlem, Karlem Aimem a dalšími, udržoval velmi vlídného a harmonického ducha. Jenže když jsem skončil v roce 1977 s kandidátskou prací, nebylo u „Hálovců“ volné místo a já jsem byl osloven Janem Čermákem, tehdejším vedoucím Oddělení chemických reaktorů, abych přešel k němu do nově formující se skupiny, která se původně jmenovala snad jen modelování a řízení, pak se k tomu přidala ještě diagnostika, takže to byla skupina diagnostiky, modelování a řízení chemicko–inženýrských systémů, tedy skupina se suverénně nejdelším názvem na ústavu. Mám dodnes podezření, že nabídka Jana Čermáka vznikla tak trochu omylem, protože jsem se ve své disertační práci zabýval korelacemi rovnováhy kapalina–pára a on už v té době pracoval s časovými řadami, kde se sice také používají různé korelační funkce, ale jde přece jen o něco velmi odlišného. Takže je možné, že název mé práce „Korelace rovnováhy kapalina–pára“, hrál hlavní roli při nabídce přechodu do Čermákovy oddělení a skupiny. Je pravda, že profesor Hála mi přechod doporučil, takže jsem vzal nabídku vážně a zásadně změnil odborné zaměření. Musím ale říci, že jsem toho nikdy nelitoval, i když jsem bohužel fyzikální chemii už skoro zapomněl a na druhé straně musím přiznat, že chemické inženýrství jsem se nikdy pořádně nenaučil, protože jsem ho na VŠCHT studoval pouze ve dvou základních semestrálních kurzech. Dodnes jsem přesvědčen, že osobnost přednášejícího v základním kurzu je klíčová pro formování zájmu posluchačů vzhledem k případné specializaci. Mně tehdy přednášel chemické inženýrství Lubomír Neuzil a cvičení vedl pan Ludvík, oba jistě úctyhodní mužové, ale na mém vztahu k chemickému inženýrství se podepsali spíše negativně. Když tedy po třetím ročníku nastalo rozhodování, kam jít a já jsem samozřejmě měl ambice jít na tu nejprestižnější specializaci, věděl jsem sice, že chemické inženýrství je obtížný a zajímavý obor, ale neuvvažoval jsem o něm ani chvíli právě kvůli výše zmíněným pánům, a vybral jsem si tehdy fyzikální chemii. Dodnes považuji za poněkud paradoxní, že se svým vztahem k chemickému inženýrství jsem se nakonec stal předsedou České společnosti chemického inženýrství – musím ale upřímně říci, že na obor jako takový nedám už dlouhá léta dopustit.

Takže v sedmdesátém osmém roce jsem přešel do zmíněné Čermákovy skupiny, což bylo v okamžiku, kdy se tato vydělila z Oddělení separačních procesů. Skupina nevznikla jen tak ve vzduchoprázdnu, už v Oddělení separačních procesů a ve spolupráci se skupinou Františka Kaštánka se tam dělaly velice zajímavé práce na téma dynamika plynokapalinových reaktorů.

V té souvislosti bych zdůraznil, že někdy ve druhé polovině šedesátých let se začala poměrně slibně rozvíjet a využívat výpočetní technika, počítače se začaly používat k modelování a diagnostice vícefázových reaktorů, turbulentních toků a tak dále. Vedlo to ke konstatování, že klasické modely, které byly doposud založeny vesměs na středních hodnotách charakteristických veličin, přestávají platit zejména u vícefázových reaktorů, protože tam existují velké fluktuace těchto veličin. Takže v té době už Čermák a Kaštánek využívali metody relativně jednoduché lineární analýzy časových řad pro určování hydrodynamického stavu plynokapalinových vrstev. Podobné metody se daly aplikovat i v rámci analýzy jiných chemicko-inženýrských systémů, například v hydrodynamice fluidní vrstvy. Do korektních fyzikálních modelů nebo pro účely diagnostiky a řízení bylo už zcela nezbytné zahrnout nejenom střední hodnoty, ale navíc i fluktuace stavových veličin. Hlavní experimentální přístupy, používané v naší skupině, byly založené jednak na aktivní metodě vzruchu a odezvy, kterou využíval zejména Tonda Havlíček a ještě někteří další, a v níž se do systému cíleně uváděl vhodný impulz – mohl to být jednoduchý pulz, nebo pseudonáhodný binární signál, vlastně taková různě modulovaná „pila“. Z odezvy pak bylo možné vyhodnotit charakteristické parametry zkoumaného systému. Já jsem se ve své práci věnoval daleko více pasivnímu přístupu, to znamená měření fluktuací charakteristických veličin v čase a prostoru tak, jak byly generovány v různých typech reaktorů. Nejčastěji jsme měřili tlak, ale mohla to být i teplota, koncentrace nebo jakákoliv další relevantní veličina. Důležitý byl poměrně rychlý rozvoj výpočetní techniky ve světě už od šedesátých let, byť u nás její aplikace postupovala výrazně pomaleji. Poměrně rychle se zlepšovala i kvalita čidel, jejich rozměry byly v našich začátcích ale poměrně značné, třeba tlaková čidla s dostatečně velkou a citlivou membránou vážila něco kolem jednoho kilogramu. Dnes mají mnohem kvalitnější tlaková čidla rozměry centimetrové nebo dokonce milimetrové. Podobný vývoj prodělaly systémy pro sběr a předzpracování dat. Pamatuji si dodnes, jak jsme jezdili měřit se záznamovým magnetofonem značky Tesla, byl šestnáctikanálový a vážil asi 70 kg. Navíc byl hodně poruchový, takže jsme sebou vozili pro jistotu magnetofony dva, protože měly zaměnitelné desky jednotlivých kanálů. Po měření jsme pak složitě přehrávali data z magnetofonu do jednoduchého počítače. Rychlý vývoj a dostupnost výkonné výpočetní techniky ale umožnily obrovský pokrok nejen v analýze časových řad, ale vůbec ve studiu dynamiky vícefázových reaktorů. Bylo možné zaznamenávat a následně analyzovat mnohem delší časové řady a mohly se využívat daleko složitější algoritmy pro jejich zpracování. Nesmírně důležité bylo, že počítače umožnily interaktivní zobrazení dat a výsledků, což je klíčové zejména pro nelineární analýzu časových řad, včetně přístupů využívajících teorie chaosu. Takže tolik krátká exkurze do problematiky mně osobně nejbližší.

Dovolil jsem si zde připomenout rozdělení sfér zájmů těch, kteří ve skupině během let působili: v oblasti diagnostiky vícefázových reaktorů byl mým blízkým spolupracovníkem nejdříve Košťál Selucký, velmi talentovaný inženýr, který přišel z Elektrotechnické fakulty ČVUT a uměl všechno možné, pokud jde o hardware i software. S Mirkem Punčochářem jsem spolupracoval snad vůbec nejdéle, napsali jsme spolu řadu článků a vedli mnoho inspirativních debat. Poměrně velká část skupiny se věnovala problematice řízení chemicko-inženýrských systémů, to byl zejména už zmíněný Tonda Havlíček, nějaký čas u nás pobýval i můj bývalý spolužák z VŠCHT Jiří Jůza, který pracoval v Tesle Rožnov a dělal u nás externě aspiranturu, později přišel Jarda Brožek. Ve skupině byl také tým kolem Josefa Vrby a Jiřího Nekoly, který se zabýval modelováním za neurčitosti, čili fuzzy systémy, nějakou dobu v něm pobýval na doktorátu Bohouš Sulek. Měli jsme vynikající lidi na hardware, jako byl Mirek Stejskal, kterého mnoho lidí z ústavu zná z firmy SMART, dále Olda Pekárek a Pepík Kiefmann. V posledních letech existence skupiny se v ní velice dobře etabloval tým pro počítačové zpracování obrazu, jehož duší byl Josef Mikeš. Všem bez rozdílu pak velmi pomáhal pečlivý technik Petr Mařík. V současné době jsme tady z bývalé skupiny zbyli

s Mirkem Punčochářem a Ywettou Maléterovou pouze tři, někteří si užívají důchodu, Kost'a Selucký přešel k firmě Hewlett–Packard, Tonda Havlíček má firmu na plastové výrobky, Bohouš Sulek byl u nějaké nadnárodní firmy, Jarda Brožek možná někomu z vás radil při daňovém přiznání, jinak do ústavu pořád chodí hrávat fotbal, Josef Mikeš vede úspěšnou firmu zabývající se analýzou obrazu, o Mirkovi Stejskalovi jsem už mluvil. Zajímavou postavou v Mikešově týmu byl Honza Rajlich, matematik, který rovněž tajně vystudoval bohosloví a po revoluci jsem ho začal potkávat v kutně na Kulaťáku. Tolik stručná vzpomínka na lidi v naší skupině.

V rámci Oddělení chemických reaktorů jsme byli poněkud zvláštní skupina, vlastně jsme neměli vůbec žádné velké experimentální vybavení a nesoustřeďovali jsme se na žádný typ reaktorů, takže se na nás někteří kolegové koukali tak trochu skrze prsty. Uměli jsme ale měřit a analyzovat časové řady, soustředili jsme se na vybavení odpovídající měřicí a výpočetní technikou, měli jsme pár počítačů Hewlett–Packard, od těch nejjednodušších k relativně lepším a navíc na tehdejší dobu velmi výkonnou korelační a spektrální jednotku. Skupina kolem Mirka Stejskala a Oldy Pekárka přišla se stavebnicovým systémem mikropočítačů značky PCS, používaly se zejména k řízení systémů. Jak už jsem řekl, experimentální zařízení jsme neměli ze začátku žádné, teprve později jsme si sice pořídili fermentor, který pořád ještě existuje v laboratoři na kraji chodby k halám, ale v důsledku absence reaktorů jsme vlastně byli „nuceni“ ke spolupráci s ostatními skupinami v oddělení.

Když jsem v roce 1978 do skupiny přišel a začal se účastnit experimentů s jinými týmy v rámci oddělení, cítil jsem občas trochu podezřívavé pohledy, jako, že přišli hoši od vedoucího oddělení, kterým je třeba vyhovět, ale já jsem tomu nevěnoval zase tolik pozornosti a snažil se s kolegy věcně domluvit. Bylo mi ale jasné, že když šéf oddělení Čermák řekl třeba Slávkovi Hartmanovi, že budeme měřit tlakové fluktuace ve fluidní vrstvě, dalo se předpokládat, že Slávek nebude nijak zásadně protestovat. Velmi podobná byla situace i v jiných skupinách. Většinou jsme se ale dohodli na tom, že jde o problém zajímavý pro obě strany, který může navíc otevřít další pole výzkumu. Z mého pohledu to tak většinou dopadlo, spolupráce fungovala a dosažené výsledky byly velmi kvalitní a dobře publikovatelné.

Jinak jsme samozřejmě měli řadu spoluprací s externími pracovišti, zmínil bych zde alespoň dva aplikační projekty v rámci týmu Drahoš, Punčochář, Selucký a Stejskal. Musím bohužel už na začátku říci, že oba skončily stejně, jako kyselina tereftalová. Prvním projektem byla diagnostika řízení režimu vysoké pece pomocí tlakových fluktuací – inicioval ho Jan Čermák a spolupracovali jsme na něm s tehdejšími VÚHŽ Dobrá a Vítkovickými železárnami. Asi všichni vědí, jak funguje vysoká pec: nahoře se sype vsádka, zahřívá se, postupně se taví atd. – nemá smysl to rozebírat detailně. Podstatné bylo, že se tzv. fučnami uváděl do spodní části pece vzduch a čím více ho tam proudilo, tím byl proces přeměny vsádky intenzivnější. Zájem podniku samozřejmě byl intenzifikovat provoz vysoké pece. Nebezpečí spočívalo v tom, že když se tam vzduchu foukalo moc, mohlo dojít k tak zvanému „zaklenování“, to znamená, že vsádka zůstala „viset“ a přestala se posouvat dolů, což znamenalo malér v produkci surového železa. My jsme byli požádáni, jestli bychom byli schopni jednak z profilu statických tlaků měřených na vysoké peci a dále z tlakových fluktuací takový nežádoucí stav předpovědět. Musím říci, že to bylo docela zajímavé prostředí pro experimenty, samotný velín vysoké pece byl asi ve výši čtvrtého nebo pátého patra, takže když jsme tam konečně nanosili těžké měřicí magnetofony, spoustu „hardware“, čidel, kabelů a dalších potřebných věcí, byli jsme vždycky na mrtvici. Dokonce jsme proti všem předpisům lezli po peci s dýchacími maskami, tahali kabely do velínu a kontrolovali umístění a funkci čidel. Pikantní na celém projektu bylo, že jsme byli sice požádáni, abychom pokud možno ověřili a zjistili, jestli jsme schopni nějaký nežádoucí stav předvídat, ale vedení pece nám nejen nechtělo umožnit toho nežádoucího stavu alespoň jednou dosáhnout, ale nechtěli ani riskovat přílišné přiblížení k tomuto stavu. Mělo to samozřejmě logické důvody: když se

vrstva zaklenbovala, byl to přece jenom určitý provozní průšvih. Situaci jsme řešili tak, že když všichni vedoucí odešli a zůstala tam jen noční směna, většinou docela bodří a vstřícní ostravští hoši, domluvili jsme se s nimi a oni, pokud měli dobrou náladu a odvalu, zvyšovali postupně průtok vzduchu, a když jsme se blížili k zaklenbování a my jsme jákali, že se konečně něco zajímavého děje, oni začali být velmi nervózní. My jsme jim zase říkali, ať ještě vydrží, ještě chvíli a ještě trochu více vzduchu a pilně jsme nahrávali tlakové fluktuace. Dodnes si vzpomínám na nechtěně rýmovaný výkřik jednoho operátora, tedy spíše na zaklení: „*k...a Pražacy, jestli se to zaklenbuje a šef rano přyjde, tak mě zabije a pak mě zabije eště moja stara, bo nebudu žadne premie!*“. Díky ochotě operátorů pece jsme tedy nakonec byli schopni nežádoucí stavy identifikovat a dokonce předvídat, celá věc vypadala velmi nadějně, s pomocí již zmíněného počítače PCS a u nás vyvinutého regulátoru jsme navrhli systém, který by varoval operátory před nežádoucím stavem. Jenže čas oponou trhnul, přišla revoluce a najednou se zjistilo, že železa je dost a že intenzifikace není potřeba a tak dále a nashledanou. Čili asi po čtyřech letech výzkumu ten projekt víceméně „vyšuměl“.

Velmi podobný osud mělo sušení „střelného prachu“ ve fluidní vrstvě a já jsem tam ty uvozovky dal schválně, protože tehdy se o tom nesmělo moc mluvit a oficiálně šlo o sušení prachového materiálu. Bylo to ve spolupráci s VÚCHZ Pardubice, sušárna měla speciální fluidní rošt se šikmo vyvrtnými otvory. Když se do nich začal uvádět teplý vzduch a na rošt se nasypala vrstva vlhkého střelného prachu, vlivem rotačního pohybu vzduchu se koláč prachu odtrhl, začal rotovat, rozpadat se a sušit. Bylo to docela vtipné, originální nápad, rošt byl patentován ve VÚCHZ. Dovedete si asi představit, že když se někde suší střelný prach, je to všechno v bunkrech, do sušárny nikdo nevidí a jakákoliv elektrická jiskra hrozí obrovským malérem. Opět byla snaha optimalizovat provoz sušárny tak, aby se tam vzduch nefoukal příliš dlouho a zbytečně teplý, aby bylo jasné, kdy už je prach dostatečně suchý. Když jsme byli požádáni o spolupráci, osadili jsme dno toho roštu našimi oblíbenými tlakovými čidly a snažili jsme se z analýzy tlakových fluktuací navrhnout algoritmus řízení procesu sušení. Po několika letech velmi plodné spolupráce dokumentované sérií výzkumných zpráv pro VÚCHZ Pardubice vznikl v roce 1988 i prototyp regulátoru, jenže ... Po revoluci jsme zjistili, že budeme-li všichni pacifisté, žádný střelný prach už nebude potřeba vyrábět, natožpak sušit. Ale jinak to byla taky jedna z docela zajímavých zkušeností, na kterou dodnes rád vzpomínám. My jsme se u obou těchto projektů, jak u vysoké pece, tak u střelného prachu, naučili spoustu věcí, které jsme pak použili při výzkumu v rámci oddělení.

Je snad symptomatické, že řada původně nadějných realizací skončila podobně, jako projekt kyseliny tereftalové. Zmínil bych ještě pro pořádek snahu kolegů z laboratoře neneutonských kapalin, kteří se zabývali dispergačními tryskami nebo vibrujícími náplněmi do absorpčních kolon, což bylo velmi zajímavé řešení. Jenže když už se začalo pracovat na poloprovozních verzích, zase pro změnu došly peníze, objevil se duch kyseliny tereftalové a projekty byly ukončeny. Řečeno slovy Ondry Weina, odnesli jsme si z toho závěr „už nikdy žádné velké technologie, budeme se věnovat daleko miniaturnějším a přístupnějším technikám“.

Takže místo dispergací a vibračních náplní se věnujeme systematicky například reometrii, filmovým tokům a elektrodifuzní diagnostice zdánlivého skluzu při stěně. Já sám jsem už v roce 1983 spolupracoval s Vaškem Sobolíkem na analýze vlnového toku filmu kapaliny po vibrující desce. Tehdy šlo o jednoduchou lineární analýzu, ale později jsme se k problému vrátili s využitím nelineární analýzy a teorie chaosu. Tok kapaliny také souvisí s dalším naším aktuálním tématem, což je tok tekutiny v mikrokanálech nebo v úzkých kanálech, které v současné době v naší skupině řeší Jarda Tihon. Jak už jsem řekl, zabýváme se zdánlivým skluzem kapaliny, máme velmi dobrou reometrickou laboratoř a Ondra Wein a spol. se zabývají také novou geometrií senzorů pro reometrická měření. Na Obr. 1 z roku 1985 je sestava skupiny inženýrství neneutonských kapalin, vidíte zde jednu mladou dámu

(Stáňa Nováková) a některé „rozhněvané mladé muže“, tedy Sobolíka, Weina a Kamila Wichterleho. Číslo 1 má – jak jinak – nepostradatelný Jarďa Malý. Skupina měla tehdy velmi intenzivní spolupráce s profesorem Onkenem z TU Dortmund, pod číslem 3 se skrývá Thomas Menzel z Dortmundu, jinak velký milovník a znalec českých hradů. Tehdejší šéf skupiny, Pavel Mitschka, již bohužel není mezi námi.



Obr. 1 Skupina inženýrství neneutonských kapalin v roce 1985

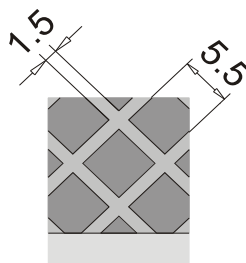
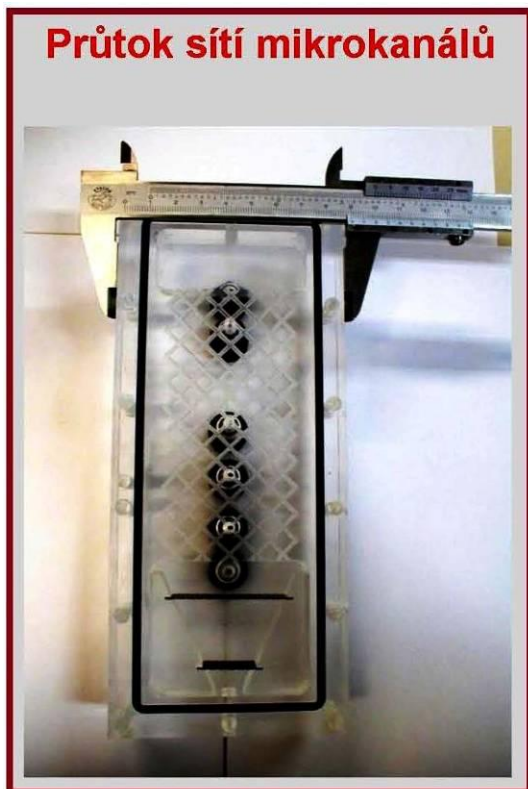
Při pohledu na Kamila Wichterleho se mi vybaví, jak za mnou někdy v devadesátých letech začal chodit a líčil mi plány svých aktivit na VŠB Ostrava, kde měl v té době už částečný úvazek. Jednou přišel a řekl mi, milý Jirko, já do té Ostravy asi přesídím úplně, nabízejí mi zajímavé místo, časem profesuru, atd. Navíc Kamilova manželka Hanka pochází z Frýdku-Místku a měla tam v té době ještě maminku. Nebyl jsem samozřejmě nijak nadšen, ale nerozmlouval jsem mu to. Kamil nám pochopitelně chyběl, asi nejvíc Ondrovi Weinovi, ale nakonec se jeho přechod do Ostravy ukázal jako skvělý tah, protože díky Kamilovi tady máme schopné doktorandy z jeho katedry, když už nám je nedodává VŠCHT Praha. Číslo 8 na fotografii má Vašek Sobolík, který je už dlouhá léta ve Francii, nicméně také s ním máme společné projekty, on sem navíc poctivě jezdí, radí, měří, publikuje pod jménem ústavu, takže já bych řekl, že takovíto agenti, vysazení ve vhodný čas na vhodných místech, nejsou úplně k zahazení.

Ještě pár slov o aplikacích v oblasti neneutonských tekutin. První je viskoelastický dostředivý tok, což je velmi zajímavé téma o anomálním chování viskoelastických kapalin. Pokud je vystavíme odstředivých silám, reagují naprosto nelogicky – přítomné dámy, které občas mixerem míchají řidší těsto, si možná všimly, že se v mixeru netvoří takový ten klasický středový vír, ale těsto šplhá po míchadle nahoru, což je typické chování viskoelastických kapalin. Proto rozhodně doporučuji před mícháním v mixeru konzultovat profesora Weina, ten vám k tomu poskytne dostatečný teoretický základ. Když už jsem zmínil Ondru Weina, ještě bych připomněl jednu jeho historku právě v souvislosti se zmíněnými

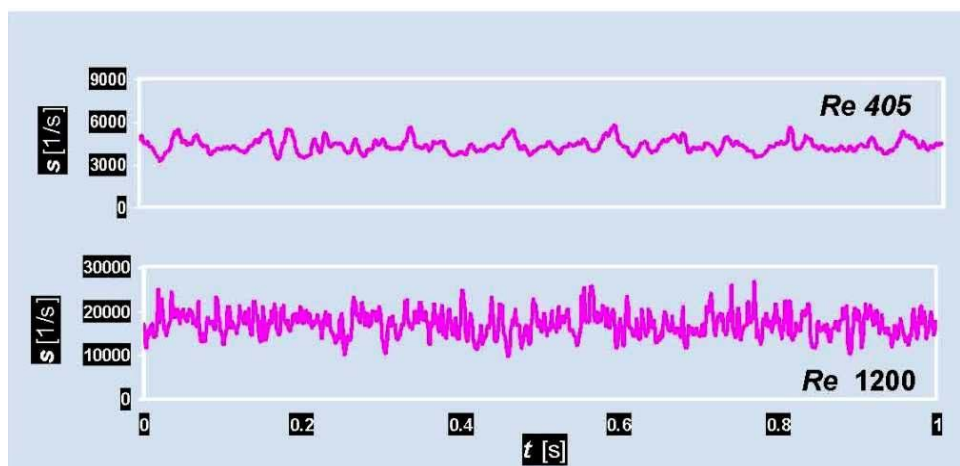
viskoelastickými dostředivými toky. Ještě za „blahé“ doby socialismu byl prý v Rudém Právu publikován článek pod názvem Dostiženija, o úspěchu sovětských vědců, kterým se podařilo vynalézt polymerní kapalinu, která levituje za antigravitačních podmínek! Všichni soudruzi se jistě zaradovali, jak jsme to zase těm kapitalistům jednou natřeli!

Druhá aplikace se týká spolupráce s TU Dortmund. Ta byla jednak v oblasti probublávaných kolon, ale rád bych zde zmínil spíše projekt v rámci produkce německého i českého národního nápoje, tedy piva, konkrétně šlo o tzv. pivní pumpu. Vím, jaká je láska řady mladých pracovníků ústavu ke Svijanskému rytíři a jiným chutným kvasnicovým ležákům, takže vězte, že v případě pivní pumpy byla snaha o to, vyvinout pomaluběžné čerpadlo s takovým designem, aby se zbytečně neničily právě ony cenné kvasinky v pivním roztoku. Ve spolupráci s TU Dortmund jsme osadili lopatky tohoto dortmundského čerpadla sofistikovanými českými elektrodifuzními čidly, měřili smyková napětí na lopatkách a snažili se navrhnout takové podmínky čerpání, aby kvasinky třeba ve Svijanském rytíři nedoznaly velké úhony.

Budoucí zaměření této části oddělení musí logicky vycházet z toho, co se zkoumá v současné době; zde uvádím pro ilustraci Obr. 2 a 3. Například použití elektrodifuzní diagnostiky při filmovém toku, nebo novější aplikace Jardy Tihona při sledování toku v mikrokanálcích a u studia přístěnné turbulence. Ve spolupráci s Vaškem Sobolíkem a francouzskými kolegy si sami připravujeme fotolitograficky i nová miniaturní elektrodifuzní čidla. Pohled na záznam lokálních stříhových rychlostí ze zmíněných mikrokanálek nesporně nabízí zajímavé pole i pro analýzu časových řad. Vyvíjíme rovněž čidla, která by byla použitelná pro detekci mikrobublin v mikrokanálcích a samozřejmě i pro diagnostiku proudění.



Obr. 2. Elektrodifuzní diagnostika v současnosti – proudění v mikrokanálech



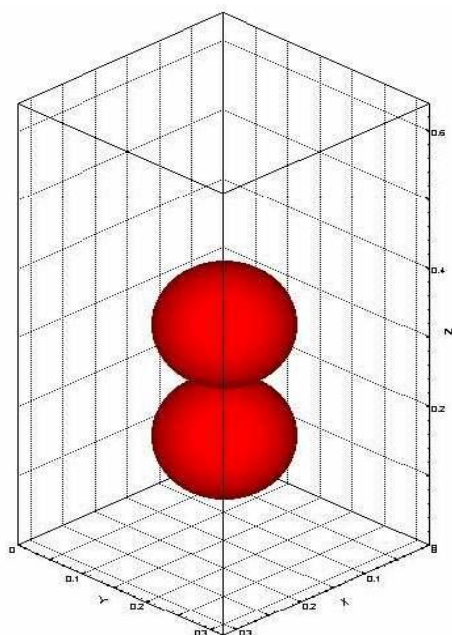
Obr. 3. Časové záznamy lokálních stříhových rychlostí

Pokud jde o probublávané kolony, jednou z důležitých veličin je mezerovitost nebo porozita vrstvy. Dlouhá léta jsme se zabývali globálním pohledem na mezerovitost i na kolonu jako takovou, měřeními změn režimu z homogenního na heterogenní, závislostí těchto přechodů na koncentraci různých příměsí v kapalině, elektrolytů, povrchově aktivních látek, a tak podobně. Postupně jsme ale dospěli k závěru, že máme-li se pohnout o kus dále, musíme zmíněné jevy zkoumat ne na úrovni celé kolony, ale na úrovni jednotlivých bublin, tedy v mikroměřítku. Lví podíl na nastartování tohoto programu má bezesporu Marek Růžička. Jedním z typických problémů je například tvorba bublin na otvoru v perforovaném patru nebo tvorba bubliny z kapiláry. Zabýváme se také koalescencí bublin, tedy chováním párů bublin generovaných třeba ze dvou kapilár těsně vedle sebe, jednak v destilované vodě nebo v nějakém roztoku soli, tedy v systémech koalescentních i nekoalescentních. Jde o velmi komplikovaný systém, chování bublin výrazně ovlivňuje i poměrně malý přídavek soli, navíc kromě vlastnosti kapaliny musíme uvažovat i konfiguraci kapilár či otvorů. Je to zajímavé téma, Jirka Vejražka a spol. k tomu nedávno vyvinuli jeden velmi užitečný nástroj pro studium dynamiky bublin, takzvaný generátor bublin. A protože jsme oddělení vícefázových reaktorů, komplikujeme si život i třetí fází a studujeme například interakci bublin s částicemi tuhé fáze. I zde stačí minimální přídavek povrchově aktivních látek a chování systému se zásadně mění – bublina už od stěny neodskakuje jako míček, ale při prvním dotyku k ní přilne. Další zajímavá situace, kdy dochází ke tvorbě bublin, je var kapaliny. O mechanice růstu a pohybu bubliny páry, tvořené u stěny v důsledku varu, se toho také ještě moc neví – velkým pomocníkem jsou záznamy z rychloběžných kamer.

Konečně, abychom pořád jenom neexperimentovali, máme v oddělení také kolegy, třeba Jarka Havlicu a Mirka Šimčíka, kteří se věnují numerickým simulacím pohybu a chování jednotlivých bublin i jejich shluků. Jarek Havlica při tom využívá numerický kód, poskytnutý profesorem Tryggvassonem z USA. To ale není nějaký rutinní software, který nainstalujete do počítače a začnou z něj padat výsledky. Havlica strávil u Tryggvassona pěkných pár pátků, tady doma kód doplnil o další části a teď ho používá například pro numerické simulace interakcí dvou kulových bublin v oblasti s periodickými okrajovými podmínkami, jak můžete vidět na Obr. 4.

Celé oddělení využívá v současnosti rovněž špičkovou měřicí techniku, zvanou PIV, particle image velocimetry, čili systém pro měření rychlostních polí v kapalině pomocí vzorkovacích částic, tedy pomocí částic, které mají stejnou hustotu jako kapalina a jsou unášeny jejím proudem. Základem je výkonný laser, který vyšle dva rychlé pulzy, a rychloběžná kamera, která vše nasnímá. Protože pro každý pulz bude sledovaná částice na

jiném místě, dá se ze snímků zjistit, kterým směrem kapalina teče, jak rychle teče a ještě další důležité informace.



Obr.4. Příklad interakce dvou kulových bublin v oblasti s periodickými okrajovými podmínkami (numerický kód front-tracking poskytl prof. Tryggvasson)

Na následujícím schématu je uvedeno personální obsazení Oddělení vícefázových reaktorů:

1993

VP: **J. Drahoš, M. Fialová, M. Punčochář, M. Růžička, V. Sobolík, J. Tihon, O. Wein, K. Wichterle, J. Zahradník, (P. Mitschka, J. Vrba)**

VŠ: **M. Fridrich, J. Slezák**

SŠ: **S. Nováková**

2007

VP: **J. Drahoš, M. Fialová, M. Fujasová, J. Havlica, S. Orvalho, M. Růžička, J. Tihon, V. Tovčigrečko, J. Vejražka, M. Večeř, O. Wein, (V. Sobolík)**

VŠ: **V. Pěnkavová, (M. Plzánková)**

SŠ: **S. Nováková**

PhD: **Z. Gogová, L. Kulaviak, P. Stanovský, M. Šimčík, (R. Bunganič)**

Nejprve k době vzniku oddělení v roce 1993. Vidíme, že tam v té době byli ještě Pavel Mitschka a Josef Vrba, byť už jako důchodci na částečný úvazek. Tenkrát k nám patřil dokonce sám veliký šéf výpočetního střediska Mirek Fridrich, nikdo nevěděl, co s ním a kam ho mají zařadit, tak jsme ho vzali pod svá křídla. On ale tenkrát spolupracoval s Markem Růžičkou na výzkumu růstu bakteriálních kolonií, takže to mělo jakousi logiku. Byl u nás ještě Jirka Slezák, který se mezitím přesunul jako konstruktér do dílen. Ze záznamu z roku 2007 je pak zřejmé, že jsme se docela slušně omladili, je tady řada mladších kolegyň a kolegů jako Marie Fujasová, Jarek Havlica, Sandra Orvalho, Marek Večeř, Jirka Vejražka. Někteří

sice odešli, jako Rado Bunganič po doktorátu do Chemoprojektu, nebo Míša Plzaková na Patentový úřad, ale takový už je život.

Na závěr svého vzpomínání bych rád připomněl, že výzkum na poli vícefázových reaktorů je nesmírně kompetitivní záležitost. Tam nemají patent na rozum jen chemičtí inženýři, jsou tam mnohdy dominantní strojní inženýři, jaderní inženýři, také v petrochemii je řada lidí, kteří se zabývají vícefázovými toky. Konkurence je tedy široká a tvrdá a já jsem docela rád, že se nám podařilo vybudovat oddělení a týmy, které na tomto poli dosáhly solidních výsledků, akceptovaných i na špičkových zahraničních pracovištích. A za to bych chtěl všem svým bývalým i současným spolupracovníkům z oddělení srdečně poděkovat.

Jiří Drahoš

K počátkům reakčních systémů plyn–tuhá látka

Protože se jedná o období časem hluboce zaváté a jediným zdrojem je paměť moje a paměť mých kolegů, omlouvám se za všechny nepřesnosti a opomenutí, která se v textu mohou vyskytnout.

Přímá syntéza organokřemičitých látek

Již při svém vzniku v r. 1960 měl ústav (tehdy Ústav teoretických základů chemické techniky ČSAV) ve vínku slibnou problematiku organokřemičité chemie. Jedním ze sledovaných směrů byla přímá syntéza organokřemičitých látek z elementárního křemíku. Jejím výzkumem a vývojem se zabývala skupina nejprve vedená zakladatelem ústavu a jeho prvním ředitelem v letech 1960–1973 Vladimírem Bažantem, poté Jiřím Rathouským (ředitel ústavu v letech 1974–1980) s pracovníky Oldřichem Kruchňou, Jaroslavem Joklíkem, Karlem Vlnou a Jitkou Sochorovou. Přímé syntézy poskytovaly základní výchozí látky organokřemičité chemie pro studie v oddělení Václava Chvalovského (zprvu Oddělení organokřemičitých sloučenin, později Oddělení homogenních reakcí). V průběhu času si oddělení Václava Chvalovského vybudovalo pro své potřeby alternativní produkční aparaturu pro přímé syntézy (Bohumil Lepeška, Jaroslav Včelák, Zdeněk Soukup aj.).

Přímé syntézy se realizovaly vsádkově reakcemi mezi jemně mletým křemíkem a plynným methylchloridem nebo chlorbenzenem za přítomnosti práškovité mědi v míchaném vyhřívaném trubkovém reaktoru při teplotách 300–500 °C. Produktem reakce s methylchloridem byla směs methylchlorsilanů (zejména methyltrichlorsilan), reakce s chlorbenzenem vedla ke směsi fenylchlorsilanů (obsahující zejména fenyltrichlorsilan). Následně se reakční směsi rozdělovaly na jednotlivé čisté látky rektifikací. Je evidentní, že práce s obtížnými chlorovanými, navíc často i aromatickými sloučeninami nebyla žádná procházka růžovým sadem. Odhodlaní a erudovaní výzkumníci se však se všemi úskalími náročných syntéz úspěšně vypořádali.

Disproporcionace benzoanu draselného

K historii ústavu neodmyslitelně patří výzkum a vývoj technologie kyseliny tereftalové jako výchozí látky pro umělá vlákna. Svým rozsahem a pracovním zápallem všech zúčastněných vyvinout a realizovat novou výrobu něčeho potřebného a užitečného, byl tento projekt zcela výjimečný. V důsledku změn v surovinových možnostech byl opuštěn prvotní záměr, založený na přesmyku draselné soli kyseliny o-ftalové na tereftalan draselný. Jako alternativní byl zvolen postup vycházející z kyseliny benzoové. Základní reakcí zamýšleného procesu byla disproporcionace benzoanu draselného na tereftalan draselný a benzen za přítomnosti kadmia nebo zinku. Reakce vyžaduje podmínky pro organickou chemii drastické: teplota kolem 450 °C a tlak přibližně 1–2 MPa. Významný je také značný rozdíl v tavitelnosti výchozího benzoanu a konečného tereftalanu. Zatímco bod tání prvního je 425 °C, bod tání tereftalanu draselného činí 550 °C.

V druhé polovině šedesátých let minulého století byl v jedné z prostorných hal právě dobudovaného ústavu postaven poloprovozní reaktor trubkového typu s hřeblovým míchadlem. Vývoj reaktoru byl provázen dlouhou řadou svízelných problémů: dávkování benzoanu, odvod produktu, tání a tvrdnutí materiálu v průběhu reakce, prašnost aj. Disproporcionální reaktor byl začleněn do Oddělení chemických reaktorů, vedeného zprvu Zdeňkem Novosadem, později Františkem Kaštánkem. Členy pracovního týmu byli Jan Kratochvíl, Artur Radvanský, Adolf Zemek, Miroslav Zíma aj. Byl to technik (Adolf Zemek), který přišel na to, jak upravit vstupní benzoan tak, aby mohl být reaktor provozován za výrazně mírnějších podmínek. Takto se podařilo nejen předejít řadě mechanických problémů,

ale i velice významně potlačit tvorbu nežádoucích balastních látek (barevných huminů). Ke zprovoznění a vyřešení nesčetných potíží s reaktorem se svým iniciativním přístupem velmi zasloužily ústavní dílny s konstrukcí (Antonín Tesař, Ferdinand Lucek, Bedřich Rathouský, František Dundáček, Jaroslav Koch, Josef Komárek aj.). Podařilo se získat tolik potřebné „know-how“ k detailnímu návrhu velkého reaktoru i vyprodukovat dostatečná množství disproporcionačního produktu nezbytného pro výzkum následných technologických operací. Výzkum technologie kyseliny tereftalové na ústavu byl směřován k vybudování kompletní poloprovozní jednotky. Z důvodu údajného nedostatku toluenu (primární suroviny procesu) bylo od celého technologického záměru upuštěno a v r. 1970 byly výzkumné práce zastaveny.

Katalytická disproporciovanie benzoanu draselného si jistý praktický potenciál zachovává dodnes. Její průběh je v mnoha směrech unikátní. Je souborem celé řady reakcí dílčích, dílem endotermních, dílem exotermních. Zdá se, že celá sekvence reakcí je ovlivňována sdílením tepla a transportem oxidu uhličitého a benzenu vně i uvnitř reagujících částic. Kuriózním a dosud jednoznačně nevysvětleným jevem zůstává i skutečnost, že reakce začíná ve středu pelet a postupuje k jejich povrchu.

Tepelný rozklad a sublimace tereftalanu amonného

V rámci technologie kyseliny tereftalové se na půdu ústavu poprvé dostala relativně nová jednotková operace – fluidace. Přesto, že v té době v Československu úspěšně fungovalo již několik průmyslových fluidních sušáren, byl pohled technické veřejnosti na fluidaci spíše kritický. Jaroslav (přezdívaný Petr) Vítovec v Oddělení separačních procesů (spolu s Jiřím Smolíkem, Josefem Kuglerem, Zdeňkem Říhou a Alenou Havlínovou-Haklovou) využil fluidní vrstvy k sublimační rafinaci kyseliny tereftalové. Jednalo se o sublimaci a tepelný rozklad tereftalanu amonného na kyselinu tereftalovou a amoniak v prostředí dusíku a vodní páry ve fluidní vrstvě korundových částic při 350 °C. Ukázalo se, že nápad s využitím fluidní vrstvy byl šťastný a proces fungoval velice efektivně. Korund pro svou čistotu a vysokou tepelnou vodivost se ukázal být nanejvýš vhodným inertním materiálem vytvářejícím fluidní vrstvu.

Druhý krok v rafinaci – desublimace (či kondenzace) byl však mnohem komplikovanější než krok první. Petr Vítovec vymyslel zcela původní způsob, jak solidifikaci technicky provádět. Horké páry byly uváděny do válcové nádoby, kde byly účinně ochlazovány na teplotu kolem 150 °C jemně rozptýlenými kapičkami vody. Klíčovým problémem bylo, jak zabránit ulpívání čerstvě solidifikovaného produktu na stěnách. S použitím pórovité stěny, kterou procházel teplý vzduch, byl tento problém úspěšně eliminován. Po řadě měsíců trpělivé práce se podařilo celý proces dovést do vysokého stupně dokonalosti a úspěšně vybudovat poloprovozní jednotku. Ta produkovala nejen velice čistou kyselinu tereftalovou, ale později se ukázala jako velmi účinná i pro rafinaci ftalanhydridu, antrachinonu aj. O mimořádné technické invenci i kvalitě výzkumné práce Petra Vítovce a jeho skupiny svědčí mimo jiné také to, že mu byla udělena celá řada patentů i v zahraničí (např. v USA).

Spalování (nekvalitních) uhlí ve fluidní vrstvě s odsiřováním

V r. 1970 byl výzkum a vývoj technologie kyseliny tereftalové předčasně ukončen. Přes velké nasazení a úsilí se původní záměr – vybudovat úplný poloprovod – naplnit nepodařilo. Nebylo tedy divu, že se dostavila deziluze a pocit vyhoření. Nebyla chuť ani vůle, pouštět se do dalších náročných technologických výzkumů s vědomím, že práce mohou být opět ze dne na den rozhodnutím vyšší moci zastaveny. Raná sedmdesátá léta minulého století byla obdobím tvrdé normalizace, kdy celá Akademie byla pod přísnou kuratelou stranických sekretariátů. Byly to nepochybně i politické tlaky, které silně přispěly k iniciaci aplikačního výzkumu fluidního spalování na ústavu. Samotná základní myšlenka spalovat sirnaté uhlí a

vázat vzniklý oxid siřičitý na oxid vápenatý v jediné operaci byla nepochybně slibná. Vážné obavy však plynuly z mechanické a strojní náročnosti celého projektu.

Úkol se stal součástí Státního plánu rozvoje vědy a techniky a partnery ústavu byly Strojírny Tlmače (Slovensko) a Vysoká škola báňská v Ostravě. Výzkum byl cílen k výstavbě menšího fluidního kotle s odsířením v Trmicích v severních Čechách. V ústavu byl projekt začleněn do Oddělení chemických reaktorů, vedeného tehdy Františkem Kašánkem, později Janem Čermákem. Vlastním řešitelem byl Jaroslav Beránek, osoba poněkud tajemná a kontraverzní. Oplýval nevyčerpatelným zdrojem nápadů, jak řešit objevující se problémy a potíže, těchto však v průběhu prací bohužel neubývalo. Řešitelský tým byl sestaven z mladších, pro věc zapálených pracovníků a jeho složení se v průběhu času měnilo (Vladimír Havlín, Vladimír Foršt, Hanka Kohoutová, Viktor Malaník, Pavel Bejblík, Zdeněk Novák, Jaroslav Pata, Bohumír Čech, Jiří Kocurek, Jana Selucká-Hronková, Milan Čárský, Václav Veselý, Jaromír Jež, Vladimír Holler, Aleš Frankenberger, aj.).

V jedné z hal bylo značným nákladem vybudováno pohledné, na ústavní poměry velké zařízení s fluidním reaktorem (tzv. Golem) o rozměrech 0,3 x 0,3 x 4 m, se zásobníky a talířovými podavači pro mleté uhlí a jemně mletý vápenec. Úvodních problémů bylo mnoho a ne všechny se podařilo spolehlivě vyřešit. Práci značně komplikoval Beránkem patentovaný, sofistikovaný způsob odvodu tepla z vrstvy. Potřebný distributor s kloboučky byl dvouúrovňový a tím konstrukčně složitý a výrobně velice náročný.

Poloprovozní fluidní kotel s odsířováním v Trmicích postaven byl. Všechny požadované zkoušky byly provedeny a celý úkol byl uzavřen závěrečnou oponenturou. K provozní realizaci však nedošlo. Pozdější vývoj ve světě ukázal, že vhodnější pro spalování tuhých paliv jsou fluidní vrstvy cirkulující, které také umožňují současné odsíření spalin mletým vápencem v jediné operaci.

Vysokoteplotní odsířovací reakce

Souběžně se stavbou „Golema“ bylo zahájeno studium vlastní odsířovací reakce. Zprvu jsem na projektu pracoval zcela sám, později se zručným technikem Jaromírem Ježem. Oříškem bylo sehnat potřebné žáruvzdorné trubky a plechy a vyřešit ohřev reaktoru na teploty 800 – 1000 °C. Samotný chemismus odsířovací reakce je velice jednoduchý: při vysokých teplotách se vápenec prakticky okamžitě kalcinuje na oxid vápenatý a ten ve spalinách reaguje s oxidem siřičitým a kyslíkem na stabilní síran vápenatý. Rychlost reakce (fixace SO₂) je ovlivňována dlouhou řadou faktorů. Nejpozoruhodnějším jevem byla skutečnost, že rychlost sorpce, jakkoli zpočátku vysoká, s postupem reakce velmi rychle klesala. Reakce (sorpce SO₂) se prakticky zastavila dříve než většina oxidu stačila zreagovat. Dohledat příčinu tohoto jevu byla výzva hodná zájmu akademického pracoviště. S vděčností jsme ocenili prozíravost, s jakou Miloš Kraus vybuďoval své tehdejší Oddělení heterogenních reakcí, zahrnující též moderní laboratoř texturních studií (Laboratoř pro texturní analýzu). S lidmi v ní působícími byla vždy radost spolupracovat. Zprvu to byli Petr Schneider, Dagmar Tomanová, Marie Fialová-Grospičová, později Olga Šolcová, Helena Součková, Hana Šnajdaufová aj. Pro tak renomovanou laboratoř nebylo příliš obtížné podrobně vyšetřit hluboké (a nepříznivé) změny v textuře původně pórovitých částic CaO vyvolané vlastní sulfatační reakcí.

Velmi příjemnou i poučnou stránkou naší práce tehdy bylo také odebrání sad vzorků českých a moravských vápenců (či vápencových hornin). Variabilita jejich vzhledu byla fascinující: měnil se od hrubě krystalických, čistotou svítících bloků barvy holubičí modří z krkonošských ložisek až po kusy nevzhledné opuky v barvě ušpiněných myších kožíšků z lomu v Čížkovicích v severních Čechách. Brzy jsme zjistili, že právě tento, vzhledem outsider, svou schopností fixovat SO₂ vysoce překonává čistoskvoucí krystalické krasavce z Krkonoše. Časem jsme se i my poučili, jak při vysokých teplotách (skoro) všechno (téměř) se vším významně reaguje.

Na základě jednoduchých představ nebylo obtížné popsat matematicky, jak původně pórovitá částice reaguje a jak se její póry postupně vyplňují produktem. Problém však nastal s numerickým řešením soustavy s velice rozdílnými časovými změnami koncentrací v plynné a tuhé fázi. Jinými slovy, jednalo se o tzv. „stiff“ (jinak též „štajf“) rovnice. V té době již velmi dobře fungovalo servisně a ke vstřícnosti vůči nám „zákazníkům“ orientované Výpočetní středisko, vedené bývalým profesním vojákem Vladimírem Horynou. Otakar Trnka, tehdy matematik střediska, se díky své vzácné invenci s těmito i se všemi dalšími výpočetními problémy, co přicházely později, dokázal ke všeobecné spokojenosti vypořádat.

Časem jsme ke kinetické (malé) aparatuře postavili ještě vysokoteplotní fluidní reaktor o průměru přibližně 10 cm. Dostalo se nám i nanejvýš vítané a vydatné posily lidské v osobnosti Karla Svobody. Takto jsme mohli rozšířit své zájmy o hydrodynamické chování a výkon vysokoteplotních reaktorů s fluidní vrstvou. S provozem integrálního fluidního reaktoru vyvstal problém sice předvídaný, ale tím o nic snáze řešitelný: jak, pokud možno přesně a reprodukovatelně, dávkovat velmi malá množství zrnitého materiálu (vápence) do reaktoru. Začali jsme s podavačem šnekovým, zkoušeli jsme systém kotoučový. Kamenem úrazu byla tvorba prachu, brzdícího pohyb otáčivých elementů. Nakonec se nám osvědčil aparát suvný (smykový) se střídavým pohybem destičky z měkkého plastu.

Vedle rozličných (i odpadních) vápenatých materiálů jsme sledovali též možnosti využití k fixaci oxidu siřičitého hořečnatých látek za vysokých teplot. Skupina se časem dále rozrostla o Otakara Trnku, Václava Veselého, Milana Čárského a Jiřího Kocurka. Že myšlenka odsiřovat spaliny suchou cestou pomocí vápence byla slibná, naznačovala též skutečnost, že se naše výsledky dobře publikovaly. V průběhu času se nám dostalo uznání i na půdě Akademie. V r. 1991 jsme obdrželi Cenu ČSAV za „Ekologicky důležité reakce oxidu vápenatého a hořečnatého s oxidem siřičitým a modelování reaktorů pro vysokoteplotní procesy odsiřování spalin“. Jistou nostalgii spojenou s odsiřováním v nás v r. 2005 vyvolal počín redakce AIChE J. U příležitosti padesátiletého výročí založení tohoto renomovaného inženýrského časopisu redaktoři sestavili seznam rovné stovky článků v něm publikovaných a v celé jeho historii nejvíce citovaných. Naše práce „Reaction of Sulfur Dioxide with Limestone and the Grain Model“ se umístila asi uprostřed žebříčku citovanosti. Dlužno dodat, že článek Petra Schneidera, také z našeho ústavu, „Adsorption Rate Constants from Chromatography“, zabodoval v první třicítce vybraných opusů.

Naše snahy o realizaci nových procesů nekončily tak, jak bychom si byli přáli. Vládní velkoprojekt „Hydrometalurgický kombinát v Bruntálu“ na zpracování polymetalických českých rud byl opuštěn již v raném stádiu. Zajímavou se nám jevila spolupráce s VTŽ Chomutov na likvidaci laguny odpadních olejů fluidním spalováním. V závodě bylo již dříve pro tento záměr postaveno větší fluidní ohniště; žel bohu, nefunkční. Návrhy úprav, které jsme považovali za nutné a účelné, se překvapivě shodovaly s názory místního hloubavého technika (Ervín Palán), i když na žádné přednášky o fluidním spalování nikdy nechočil. Zařízení uvést do spolehlivého provozu se podařilo, avšak celý podnik v raných polistopadových letech zanikl dříve, než se lagunu odpudivého oleje podařilo zlikvidovat.

Fluidní vrstva se ukázala jako nanejvýš vhodný nástroj také k realizaci rozkladných (kalcinačních) reakcí za dobře definovaných podmínek s cílem získat produkt žádaných vlastností (vysoká reaktivita, potřebná textura). Naším reaktorem prošla celá řada látek: např. exotický hydroniumjarosit (ze separace železa v bruntálské polymetalické technologii), $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$ (k výrobě neobyčejně reaktivní (aktivní) sody), $\text{AlCl}_3 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$ (k přípravě koagulantů) aj. Po fyzikální stránce byly produkty fluidních rozkladů charakterizovány vždy vlídnými kolegyněmi z Laboratoře pro texturní analýzu našeho ústavu.

V oblasti našeho zájmu byla také separace sulfánu a karbonylsulfidu z energetického uhelného plynu pomocí oxidu vápenatého. Zabývali jsme se též termodynamickými omezeními příslušných reakcí, zejména vlivem oxidu uhličitého na afinitu H_2S a COS vůči

oxidu vápenatému. Zajímavé byly rovněž studie o konverzi organického dusíku přítomného v kapalných i tuhých palivech na oxidy dusíku (NO_x) a jejich následné reakce s věhlasnou aktivní sodou, objevenou Emerichem Erdösem z Ústavu fyzikální chemie a elektrochemie Jaroslava Heyrovského.

Stavy, či chování našich inertních zrnitých materiálů (písek, keramzit, popel, korund) určené pro žhavé fluidní vrstvy jsme „nacvičovali“ ve skleněných kolonách jen za studena. Naším přáním – nikdy nesplněným – bylo pozorovat rudě žhoucí až do běla svítící „fluidum“ v průhledném válci z křemene. Jak jsme však v jiných situacích mohli vidět později, i ten nejlepší křemen se při „kremačních“ teplotách rychle zakalil a obraz dantovského inferna se opět zastřel. Abychom nějak obešli bariéru neprůhledných stěn reaktoru, použili jsme tlakovou sondu vloženou do vrstvy nebo pod distributor. Namísto vizuálního pozorování vrstvy jsme tak mohli na monitoru pohodlně sledovat fluktuace tlakového signálu citlivě reagujícího na okamžitý stav (režim) studené či žhavé fluidní vrstvy. První práce vznikly za účasti Jiřího Drahoše, Konstantina Seluckého a Miroslava Punčocháře ze skupiny „Modelování a řízení chemicko–inženýrských procesů“, vedené tehdejším ředitelem ústavu Janem Čermákem (v období 1980–1991).

V raných polistopadových letech se podařilo v rámci dvou zahraničních grantových projektů vybudovat a dále modifikovat unikátní poloprovozní fluidní reaktor o průměru přibližně 10 cm pro teploty do $1000\text{ }^\circ\text{C}$ a tlaky do 1,5 MPa. Na této aparatuře byly úspěšně realizovány studie tlakového spalování kapalných paliv obsahujících dusík a minimalizace emisí ze spalování stupňovým přívodem vzduchu.

Vítězný listopad '89 s sebou přinesl možnost a zároveň nutnost vstupovat do soutěží o finanční podporu vlastních výzkumných projektů z mimoústavních zdrojů. Prvotní myšlenka grantových systémů je jistě zdravá a chvályhodná, její realizace se však zdá být rok od roku problematičtější. Se zpocenými čely a díky přízni andělů nebeských či pekelníků rohatých se nám dařilo finance získat a své záměry realizovat.

Z projektů nedávno ukončených a publikačně velmi dobře přijatých jsou hodné pozornosti alespoň dva: Identifikace hydrodynamického stavu suspenzí plyn – tuhá látka pomocí analýzy tlakových fluktuací a problematika spalování stabilizovaného čistírenského kalu ve fluidní vrstvě.



Obr.1 Vysokoteplotní reaktor s fluidní vrstvou

Rychlými časovými změnami tlaku snímaného v ustálené fluidní vrstvě jsme byli fascinováni již od prvních našich kontaktů s fluidací, právě tak jako i všichni návštěvníci naší laboratoře. Byl to Ota Trnka, který přišel na nápad, jak efektivně a zcela původní metodou početně zpracovat a vyhodnotit fluktuující tlakový signál. Získané poznatky umožňují řídit fluidní reaktory.

Bylo naší ambicí přispět svým dílem k dosud nevyřešené likvidaci stále rostoucího objemu obtížných čistírenských kalů. Slibný způsob likvidace nabízí jeho účinné spalování ve fluidní vrstvě. Při práci se velmi dobře osvědčil suvný (smykový) dávkovač kalu, již dříve šťastně koncipovaný Karlem Svobodou. Ukázalo se, že vhodným režimem lze vytvořit ve vrstvě oxidační prostředí natolik účinné, že odcházející spalné plyny obsahují jen stopová



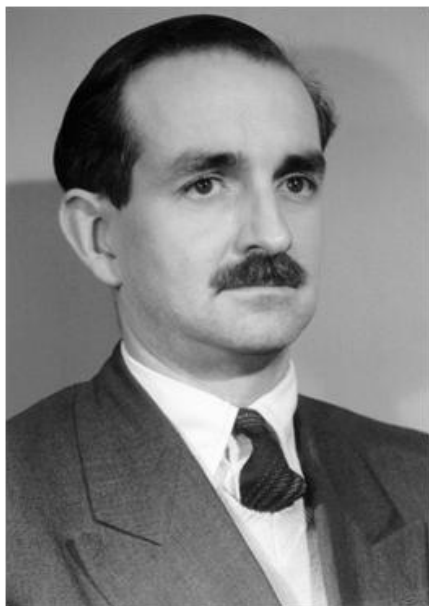
Obr.2 Vysokoteplotní tlakový reaktor s fluidní vrstvou

množství toxického oxidu uhelnatého. Bohužel, žádoucí absence CO v plynné fázi s sebou nese nežádoucí oxidaci reaktivního organického (palivového) dusíku hojně zastoupeného v čistírenských kalech. Tato skutečnost, vedle přítomnosti celé řady těžkých kovů, likvidaci kalů spalováním značně komplikuje.

Miloslav Hartman

Vzpomínka na George L. Standarta

Tvrdívá se, že George emigroval ze Spojených států, protože byl levicového smýšlení, nebo dokonce komunista, a že se bál perzekuce v době McCarthyismu. To není tak zcela pravda. George nebyl víc levicový než většina studentů v Kalifornii ve čtyřicátých letech minulého



George L. Standart (1921-1978)

století. Tenkrát to byla v Kalifornii móda. Silně levicového smýšlení však byla jeho žena Phoebe (rozená Laendel) a jeho přítel P. Gelbin. Byli to tito dva, kteří rozhodli o emigraci do některé země Sovětského bloku. V té době George pracoval v Shell Research Laboratory v Kalifornii a při práci se připravoval na doktorát na California Institute of Technology v Pasadeně, kde také graduoval v chemickém inženýrství. Téma jeho připravované disertační práce bylo o nestacionárních pochodech na destilačním patře.

George trval na tom, že může odejít jen do země s vyspělým chemickým průmyslem, takže v úvahu přicházely buď východní Německo nebo Československo. Dr. Gelbin odešel do východního Berlína, kde nastoupil do Deutsche Akademie der Wissenschaften. Standartovi se rozhodli pro Československo, protože Phoebe se upamatovala na jednoho svého dědečka (či pradědečka), který byl před první světovou válkou lékařem na císařském dvoře ve Vídni. V této funkci doprovázel členy císařské rodiny na letní pobyty

do Mariánských Lázní. Četné pohlednice z Marienbad, uložené v rodinných dokladech, přesvědčily manžele Standartovy, že “Böhmen must doch ein schönes Land sein”. Před obsazením Rakouska nacistickým Německem v roce 1938 a následném pronásledováním židovského obyvatelstva uprchla Phoebina rodina do Spojených států.

Počátky manželů Standartových v Praze, kam dorazili v roce 1949, nebyly lehké. George se ihned po příjezdu hlásil na Ministerstvu průmyslu a poté, co sebe prohlásil za odborníka na destilace, byl poslán jako konzultant do tehdejších Stalinových závodů v Litvínově. Tam když ukázal na vrátnici svůj americký pas, tak ho nepustili ani za bránu. Roztrpčen se vrátil do Prahy a prošel pak ještě několika podobnými pokusy se stejným výsledkem. Nakonec byl Ministerstvem průmyslu předán do Ministerstva školství a po dohodě s VŠCHT byl jmenován docentem na této škole s pověřením vybudovat katedru chemického inženýrství. Poněvadž neuměl slovo česky, obklopil se mladými spolupracovníky, kteří mluvili anglicky. Byli to Jan Marek, který se za války učil angličtinu ve Zlíně, Zdeněk Novosad, který prožil válku s rodiči v Baťových závodech v kteréš anglické kolonii v Africe a chodil tam do anglických škol, a Josef Landau, který za války sloužil v Československé jednotce anglické armády. Jedním z prvních úkolů bylo připravit skripta pro studenty. Pod Georgeovým vedením tato skripta napsali Jan Marek a Zdeněk Novosad. Velkou pomocí při psaní těchto skript byla kniha profesora brněnské techniky Vondráčka “Základy výpočtů v chemické výrobě” z roku 1935, která definovala české názvosloví.

Mezitím Phoebe Standart dostala místo v zahraničním vysílání Československého rozhlasu, kde připravovala programy vysílané na krátkých vlnách do Spojených států.

Ale ani na VŠCHT to neměl George lehké, poněvadž narážel na řevnivost učitelů chemických technologií, kteří po tři generace tvořili páteř výuky na VŠCHT. Nyní se cítili ohroženi tímto nástupem chemického inženýrství ve svých pozicích. K nim se připojili konstruktéři pivovarů a cukrovarů, kteří po generace šířili slávu českých cukrovarů a pivovarů v zahraničí. Jejich obor byl (a ještě je) znám pod německým názvem “Verfahrenstechnik”. U nás se pro tento obor ujal název “chemické strojnictví”. Mohu-li si dovolit srovnání těchto dvou oborů, pak bych řekl, že zatímco Verfahrenstechnik klade důraz na zařízení, chemické inženýrství klade důraz na proces, který v tomto zařízení probíhá. Ale ovšem hranice mezi těmito dvěma disciplinami je difuzní.

Tito odpůrci se spojili na platformě Komunistické strany a prohlásili chemické inženýrství za výmysl amerického imperialismu, který není třeba do českých poměrů zavádět. Za těchto okolností se George udržel na VŠCHT jen díky podpoře profesorů Františka Šorma a Ladislava Daneše, kteří oba měli silné pozice v Komunistické straně. Nicméně George si mi často stěžoval, že “jdou po něm” (“They are after me!”), a že jistě dlouho nevydrží.

Za těchto okolností jsem Georgeovi navrhl, že uspořádáme ve Zlíně, kde jsem byl tenkrát tak zvaným “průmyslovým” aspirantem, Konferenci chemického inženýrství, která tuto disciplínu, a jeho osobně, řádně zviditelní. Psal se rok 1954 a v hotelu Moskva ve Zlíně se nás tenkrát, pod pláštíkem “Dnů nové techniky“, sešla hrstka nadšenců. Byli tam chemicko-inženýrství samouci, jako Dr. Hrubý z Brna, Georgeovi asistenti z VŠCHT a aspiranti Novosad a Marek, kteří přednesli první výsledky svých měření a jejich korelace dimenzionální analýzou. Podstatnou částí programu byl Georgeův návrh vytvoření “Odborné skupiny chemického inženýrství” při Československé společnosti chemické, z níž vyrostla dnešní “Česká společnost chemického inženýrství”. Návrh byl jednomyslně schválen a tím jsme dali najevo své příbuzenství k chemii. (Viz článek Kamila Wichterleho v 9. čísle [březen 1999] Zpravodaje České společnosti chemického inženýrství, str. 12).

Na moje naléhání byl rovněž pozván představitel chemického strojnictví, prof. Jiří Dohnal, který svou přítomností a svým příspěvkem přidal to “S” k původnímu “CHI”, takže takto jsme porodili “První konferenci CHIS”. Druhou takovou konferenci jsem organizoval o rok později v Luhačovicích a na té už byly předneseny odborné referáty, které zabraly jeden celý den. Třetí konferenci pak organizovali naši kolegové z Brna, kteří přidali to “A” (= automatizace) k dosavadnímu “CHIS”, a tak se nám narodila CHISA.

V této době už nemohlo být pochyb o tom, že chemické inženýrství v Československu žije a prospívá. Nicméně George dosáhl pocitu bezpečnosti teprve, když mu Profesor Bažant nabídl pozici na ÚTZCHT. Ale o tom už napsal Jarda Procházka v předchozím Almanachu.

Chemické inženýrství se ovšem přednášelo na VŠCHT dál, ale skripta Novosada a Marka, která pomohla vychovat tři nebo čtyři generace chemických inženýrů, už nedostačovala. V důsledku obecné orientace na Sovětský svaz se základním učebním textem stala kniha sovětského profesora Kasatkina, jež je pojata spíše v duchu “Verfahrenstechnik”.

Ačkoliv George pocházel z chladného státu Illinois, jeho matka se s ním přestěhovala do Kalifornie, když byl ještě na střední škole. Tam si natolik zvykl na mírné subtropické podnebí, že mu to v Praze dosti chybělo. V zimě chodil oblékán do exotických kožešinových zábalů a čepic, které mu matka posílala ze Států. Domnívám se, že to byl hlavní důvod, proč přijal pozvání k pobytu na Kubě, která mu tolik připomínala Floridu. Nesmíme zapomínat, že španělština je prvním cizím jazykem vyučovaným na amerických středních školách. Vybudoval tam na místní univerzitě Department of Chemical Engineering s vynaložením všech sil a s velkým vypětím celé řady českých studentů, ale ani tam nebyl šťasten. Jak mi později vyprávěl, byl tam nedostatek materiálních prostředků ještě daleko větší než v Čechách.

V roce 1966 odešel George na roční stáž do Londýna na Imperial College. Během tohoto pobytu se uvolnilo místo vedoucího Katedry chemického inženýrství v Manchesteru, které

bylo Georgeovi nabídnuto. George nabídku přijal a do Prahy už se nevrátil. Phoebe pak se svými dcerami Nancy a Sally musela sama zařizovat stěhování z Prahy do Manchesteru, ale to už nepatří do historie Ústavu chemických procesů AV ČR.



Společné setkání prof. G.L. Standarta (vpravo) s autorem těchto řádků (duben 1978)

Snad ještě jednu poznámku, která George dobře charakterizuje. Po celou dobu pobytu v Československu, na Kubě a v Anglii si George ponechal svůj americký cestovní pas, ale na návštěvu Spojených států si netroufal. Měl strach, že hned na letišti bude zadržen FBI za to, že tak hanebně zradil svou vlast. Odvážil se svou vlast navštívit až po několika letech v Anglii, poté co obdržel mnohanásobná pozvání od amerických univerzit a ujištění od State Department, že mu nebude na hlavě zkřiven vlas. Ve Spojených státech byl přivítán jako přední představitel výzkumu v nestacionární termodynamice a přednášel s velkým ohlasem na všech předních univerzitách. Vrátil se pln nadšení, jednak nad technickým vybavením amerických univerzit, ale hlavně nad vysokou úrovní spolupráce mezi průmyslem a vysokými školami. Dostal několik nabídek na místo profesora, z nichž nejlákavější byla od Columbia University v New York City. Chystal se ji přijmout. Když se však vrátil do Manchesteru, čekala ho tam zpráva, že Science Research Council (Britská grantová agentura) prodloužila jeho obrovský grant na výzkum destilačních pater o dalších pět let. Já myslím, že mu to zlomilo srdce. Za několik týdnů na to zemřel.

Jaroslav Ulbrecht

Chemické inženýrství na cestě z Košinky na Suchdol

Moje setkání s chemickým inženýrstvím začalo v roce 1963 poté, co jsem byl přijat do vědecké výchovy v této disciplíně pod vedením Ing. Václava Koláře, DrSc. a dostal jsem se do areálu bývalého statku *Košinka*, kde sídlilo Oddělení chemického inženýrství. Areál *Košinky* se nacházel v Kandertově ulici v Libni a dnes tudy vede železniční spojka na Libeňské nádraží. Název *Košinka* se pak stal jakýmsi synonymem pro „jurské“ období chemického inženýrství na ústavu.

Život na *Košince* byl i pro mne, jako nováčka, příjemný až zábavný. V areálu tohoto statku sídlil ještě podnik vyrábějící zubní protézy a nevyužitými dentakrylovými zuby byly posypány cestičky, které zářily běloskvoucí čistotou. Sídlil zde i truhlářský podnik vyrábějící stoly, který předzahrádku své dílny vyzdobil sochou-aktem sochaře Famíry přioděným podprsenkou a opatřený make-upem rtů.

Dělná atmosféra oddělení pod přísným dohledem V. Koláře byla občas ozvláštněna humornou příhodou. Jednou na příklad vezl laborant Křikava z *Košinky* kanystr glycerínu, o který požádala Katedra procesů a aparátů (později Katedra chemického inženýrství) Vysoké školy chemicko-technologické vedená prof. Georgem Standartem. Při čekání na tramvaj v Libni byl nebohý laborant dotázán příslušníkem VB, co to veze; odpověděl po pravdě, že glycerín. Na otázku, k čemu je glycerín dobrý, bezelstně poučil příslušníka: „Na příklad na výrobu výbušnin“. Na to byl promptně zadržen a bylo potřeba intervence Ústavu k tomu, aby byl propuštěn.

Myslím, že za koryfeje výzkumu v chemickém inženýrství u nás je třeba považovat Ing. Václava Koláře, DrSc., prof. George Standarta a akademika Eduarda Hálu. George Standart byl Američan, který emigroval do východního bloku a svými přednáškami na VŠCHT zde založil to, co dnes nazýváme *Chemical Engineering Science*. Rozsáhlým až encyklopedickým znalostem Standarta však chyběla praktičnost. Tu měl naopak Václav Kolář díky své předchozí kariéře průmyslového technologa. Eduard Hála dodával nově se etablující disciplíně akademický punc.

V době mého nástupu na *Košinku* již probíhala výstavba nového areálu ústavu v Suchdole. Ten byl původně koncipován, zřejmě po Standartově intervencích, celý jako chemicko-inženýrský. Myšlenka mít v čele ústavu Američana se pak zřejmě zdála politicky příliš smělá a nový areál dostal charakter chemicko-technologického ústavu pod vedením prof. Vladimíra Bažanta, DrSc. Vlastní výstavba areálu však neměla dostatečnou prioritu v rámci československého stavebnictví a postup stavby se neustále zpožďoval. Jako mladí aspiranti jsme proto byli posíláni na stavbu pomáhat. Vzpomínám si, že, jsem shodou okolností pracoval právě na výstavbě budovy, kde jsem později pracoval vědecky.

O charakter stavby se vedly vášnivé diskuze. Standart hájil výstavbu toho, co dnes nazýváme *haly*. Menší budovy mezi halami měly sloužit jako *velíny*, odkud měl být chod aparátů řízen. Rovněž v menší budově (dnes sídlo OSP) byly podlahy v laboratořích opatřeny velkými otvory, zakrytými peronovým plechem. Ty měly umožnit stavbu aparatur o výšce přesahující výšku jednoho podlaží. Václav Kolář byl velkým odpůrcem koncepce *hal*, protože jako zkušený technolog znal náročnost velkých aparatur na energie, suroviny, odpady a obsluhu. Budoucnost dala jeho názorům zcela za pravdu: Prostupy v podlahách laboratoří malé budovy byly postupně zazděny. Průzory velínů do hal byly rovněž zazděny a *velíny* přeměněny na kanceláře (lidově zvané *mýslivny*) a haly byly rozděleny horizontálními podestami na několik laboratoří.

Názorové střety mezi Standartem a Kolářem byly zřetelné i v koncepci stavby pokusných aparatur. V chemickém inženýrství je důležitou vlastností výsledků jejich přenosnost na zařízení jiného, obvykle většího, rozměru (scale-up). Snahou je tedy experimentovat na co

možná velkém zařízení. To chtěl Standart obejít měřeními na tak zvaných *řezech*. S láskou o nich mluvil ve zdrobnělině a s roztomilou výslovností: “Postavíme si žížek“. Řez znamenal, že aparatura měla obdélníkový průřez, přičemž jeden z rozměrů byl výrazně menší než druhý. Průřez zařízení a tedy spotřeba materiálů byly malé a Standart předpokládal, že výsledky budou platné pro zařízení velkého rozměru daného větší stranou obdélníkového průřezu. Kolář proti tomu stavěl kolony kruhového průřezu.

Chybnost Standartových úvah byla zřejmá i mně jako začátečníkovi: V kolonách tvaru řezu docházelo k pravidelnému kolébání kapaliny podél delší strany průřezu a bylo tedy zřejmé, že hydrodynamiku v koloně typu “řez“ určuje jeho menší rozměr a nikoliv ten větší. V experimentování na řezech však Standart ve svém týmu pokračoval až do svého odchodu na Kubu.

S přibývajícimi roky v ústavu jsem si všiml napětí, které zde bylo cítit mezi zastánci na jedné straně základního a na druhé straně aplikovaného výzkumu. K tomu přispíval i schizofrenní postoj orgánů ČSAV, které sice vyzývaly k ochraně základního výzkumu, ale přitom předepisovaly ústavům stále vyšší částky příjmů z tak zvaných *kontraktů*. Kontrakty byly dohody s průmyslovými podniky, na základě kterých jednotlivé vědecké týmy prováděly za úplatu určité odborné práce, konzultace a podobně.

Po mých zkušenostech ze studijních pobytů na Massachusetts Institute of Technology (MIT) mi byly tyto spory zcela nepochopitelné. Na MIT vedle sebe pokojně pracovaly týmy na jedné straně ve vyhledávacím výzkumu a na opačné straně spektra týmy zabývající se vývojovými pracemi.

Chemicko–inženýrských skupin v oddělení separačních procesů (OSP) se tyto spory týkaly mimořádně silně, protože sama problematika je na pokraji aplikovaného výzkumu. Navíc skupiny Ing. V. Koláře, DrSc., doc. Jaroslava Procházky, DrSc., a Ing. V. Staňka, DrSc. vykazovaly značné příjmy z kontraktační činnosti. Že však základní výzkum nepřicházel zkrátka bylo snadné dokázat na značném počtu vědeckých publikací, využíváním času ve výpočetním středisku a počtech mladých aspirantů ve vědecké výchově.

Velký rozvoj zaznamenaly v těchto letech dostupné prostředky výpočetní techniky, ten je ale podrobně popsán Ivanem Wichterlem v jiné části tohoto Almanachu.

Vlastní chemicko–inženýrská měření byla původně prováděna vizuálním odečítáním přístrojů (rotametry, voltmetry, atd.). Později byly získány ručkové liniové zapisovače, kterými byl zaznamenán časový průběh určité veličiny ve formě liniového grafu. Prvním zařízením na automatizovaný sběr dat byla měřicí ústředna DYNAMCO, britské výroby. Ta převáděla časový průběh předem určeného počtu veličin do děrné pásky. Tato ústředna znamenala průlom v přístupu k měření. Nevýhodou byla ještě určitá poruchovost, protože šlo o transistorovou konstrukci.

Později jsme získali měřicí ústřednu ADIMES, výrobek Metry Blansko, primárně určený pro řízení a sledování provozu elektráren. Šlo o velmi objemné zařízení vyžadující odbornou péči (transistory), ale vybavené několika kvalitními prvky, jako například velmi přesným digitálním voltmetrem, výpočetní jednotkou a aktivními členy. S pomocí ADIMES jsme poprvé mohli experiment ovládat pomocí programu a data zpracovávat on-line.

S příchodem Ing. Oldřicha Pekárka na ústav se začaly konstruovat jednoduché mikroprocesorové systémy (PCS) pro on-line sběr a zpracování dat. Jejich výhodou byla nízká cena, nevýhodou nízká rozlišovací schopnost A/D převodníku (8 bitů). Koncem osmdesátých let dvacátého století se začaly kupovat měřicí systémy firmy Hewlett–Packard a s nimi též první osobní počítače. Dovoz těchto zařízení byl ale komplikovaný jednak nutností zajistit si nedostatkové devizy na nákup a dále tím, že tato zařízení byla zčásti pod vývozním embargem USA. Koncový uživatel (end user) musel poskytnout záruky o použití zařízení pro výzkum a/nebo výuku. V současnosti je používán pro sběr a řízení pokusu systém Labview

firmy National Instruments, USA, který využívá PC a je vybaven velmi pokročilým, pro uživatele přátelským grafickým systémem programování.

Již na *Košince* mělo oddělení svoji „cechovou dílnu“. Ta měla od počátku dva dělníky pana Jaroslava Lehovce a Jiřího Karbana a velice dobré vybavení: 2 soustruhy, 2 vrtačky, frézu, lis, vybavení pro klempířské práce, svařování obloukem i plynem. S přechodem do areálu v Suchdole se dílna rovněž přestěhovala nejprve do místnosti na konci přízemí v malé budově a později do suterénní místnosti téže budovy po bývalé kompresorovně. Konstrukční práce prováděl pro dílnu nejprve František Procházka a po jeho smrti Ing. Milan Mokošín a po něm Ing. Jiří Slezák. Cechová dílna, původně Kolářova myšlenka, se stala velice důležitou součástí Oddělení separačních procesů, zejména pro výstavbu nových aparatur, pro dílčí vývojové práce na aparaturách a rovněž při realizaci prací pro průmysl.



Obr. 1. Osazenstvo OSP v cechové dílně. (Klečící zleva: J. Čermák, J. Lehovec, M. Mokošín, A. Tesař, J. Karban, M. Němeček, J. Červenka; stojící zprava: V. Staněk, J. Bulička, J. Kopecký, M. Endršt, A. Havlíček, A. Heyberger, F. Procházka, J. Biderman, V. Kolář, K. Grigar, P. Mařík)

Cechová dílna se stala i místem setkání při drobných oslavách OSP. Při jednom takovém setkání u příležitosti návratu technika oddělení, Karla Melichara, ze zahraničí, kde působil jako tenisový trenér, ukazoval Melichar svoje údajně luxusní hodinky, které si zakoupil ve Švýcarsku. Pro demonstraci hodinky kolovaly po dílně až došly k Josefu Strickerovi, technikovi oddělení. Ten je strčil pod lis a pohupující pákou lisu se zeptal: “Karle mám?” Ten to vzal jako žert a odpověděl: “Zkus to“. A Stricker to zkusil. Sklo hodinek pod lisem zapraskalo a celá dílna ztichla v očekávání, co bude dál. Do ticha, kdy by bylo slyšet i pád špendlíku, někdo řekl: “To bylo málo!“ A Pepa Stricker znovu spustil lis, tentokrát už naplno. Zvuk drcených hodinek nenechal nikoho na pochybách o jejich smutném osudu. Karel Melichar nasupeně vypochoďoval z dílny se slovy: “Tak a já chci 300 švýcarských franků“. Stricker si uvědomil, co udělal a příští den šel k hodináři, aby hodinky spravil. Ten mu ale řekl, že hodinky jsou totálně zničené, ale že pouze schránka hodinek je švýcarská. Strojek je z laciných hodinek Glass-Hütte z NDR, asi tak v hodnotě 50 východoněmeckých marek.

Osazenstvo OSP při oslavě je vidět na Obr. 1. Dnes již zesnulí dělníci Lehovec a Karban jsou vpředu klečící v montérkách. Třetí zleva stojící je Kolář, klečící zcela vlevo je Jan Čermák, pozdější ředitel ústavu. Zcela vpravo stojí autor těchto řádků.

George Standart byl znám svojí opatrností na peníze. K tomu se váže nejedna historka. Po té, co si koupil automobil a chtěl si postavit garáž, požádal Jardu Lehovce a Jirku Karbana z cechové dílny o pomoc při stavbě, za kterou jim zaplatí. Garáž byla hotova, ale platba stále nepřicházela. Když pak přišel jednoho dne Standart do dílny a oznámil, že letí služebně do Rumunska, popřál mu Jarda Lehovce šťastnou cestu a požádal ho, že bude lépe, aby jim za garáž zaplatil hned, protože letadla prý teď často padají.

Ve druhé polovině šedesátých let minulého století se politické klima v zemi začalo uvolňovat, což se projevilo možností vycestovat i do nesocialistických států. Na zahraniční stáže se tak dostali Milan Rylek (Irák, Uganda), Mirko Endršt, František Kaštánek, Milan Čársky a Aleš Heyberger (Kuba), Vladimír Staněk (State University of New York at Buffalo, Massachusetts Institute of Technology, USA), Vladimír Jiříčný (University of California at Berkeley, USA), Helena Sovová (University of Toronto, Kanada), Zdeněk Brož a František Vašák (University of British Columbia, Kanada) a Jaroslav Bulička (University Nancy, Francie).

Invaze vojsk Varšavské smlouvy v roce 1968 způsobila odchod několika pracovníků do emigrace: Josef Landau a František Souhrada (University of New Brunswick, Kanada), Ladislav Steiner a Jiří Přenosil (ETH Zürich, Švýcarsko), Artur Gardavský (Austrálie), Jiří Tichý (Vancouver, Kanada), Karel Jonáš (USA), František Kolařík (USA) a Milada Řeháková (Columbia University, New York, USA).

Čelní pracovníci chemicko–inženýrského výzkumu byly vyznamenáni Státní cenou Klementa Gottwalda, která byla spojena i s finanční, na tu dobu vysokou, odměnou (100 000,- Kčs). Po prvé to byla cena pro George Standarta, po druhé pro tým pracovníků Václav Kolář, Josef Landau, Jaroslav Procházka a Hanuš Steidl.

Po odchodu George Standarta pracovala skupina Destilace/Absorpce od sedmdesátých let ve složení Václav Kolář (vedoucí skupiny a oddělení OSP), Zdeněk Brož, Vladimír Staněk, Jiří Tichý a Jan Červenka. Skupina řešila problematiku mezifázového přestupu tepla a hmoty. Václav Kolář vypracoval teorii mezifázového přenosu, která – na rozdíl od filmové teorie Whitney-ho, uvažující existenci filmu na mezifázovém rozhraní – předpokládala existenci ještě dvou dalších vrstev: vrstvy Higbie-ho s nestacionárním přenosem a dále Kolmogorovovy vrstvy volné turbulence. Přestupující teplo nebo hmota musely projít postupně všemi těmito vrstvami. Teorie byla velmi úspěšná v popisu přenosu v mimořádně širokém rozsahu fyzikálních vlastností, od plynů až po tekuté kovy.

Skupina pracovala dále na vývoji nových náplní pro kolony. Ideální z hlediska nízkých tlakových ztrát se jevily náplně tvořené rovinnými plochami. Jejich zásadní nevýhodou ovšem je, že kapalina po rovině nestéká ve formě filmu, ale tvoří praménky o malé mezifázové ploše. V. Kolář přišel nejprve s myšlenkou, aby náplň byla tvořena plachetkami ze sklo-textilu. Ještě lepší se však ukázala náplň tvořená deskami tahokovu. Na tahokovu kapalina ochotně tvořila film po obou stranách desky a náplň měla mimořádně nízkou tlakovou ztrátu. Náplň z tahokovu byla patentována. Na Obr. 2 je fotografie kolony s náplní z tahokovu pro stripování butylacetátu z odfenolovacích odpadních vod v tlakové plynárně Vřesová. Na Obr. 3 je znázorněno využití kolony s tahokovem k odstraňování rozpouštědel a motorových paliv z kontaminovaných podzemních vod v lokalitě Neptun, Bylany (Brož, Kuthan).



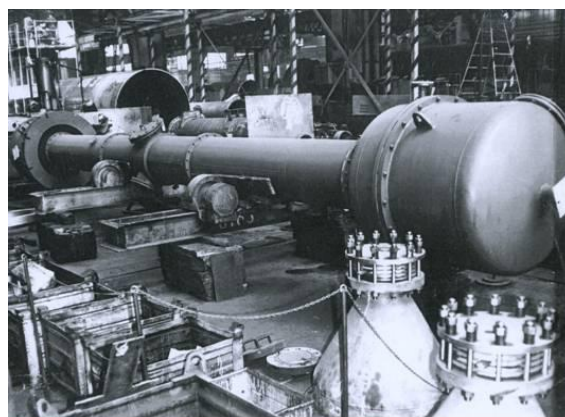
Obr. 2. Kolona s náplní z tahokovu. v tlakové plynárně Vřesová.

V Kolářově skupině byla rozvinuta teorie distribuce kapaliny podle Z. Cihly a O. Schmidta (VŠCHT, Praha) na reálné náplňové systémy, ve kterých dochází k tvorbě stěnového toku (Staněk). Práce byla publikována v časopise Collection of Czechoslovak Chemical Communications. Jaké však bylo moje překvapení, když byla teorie později publikována Eliou Ruckensteinem v Chemical Engineering Science, aniž by byla zmíněna naše práce, byť jen jako odkaz. Další náhoda tomu chtěla, že během mého studijního pobytu na State University of New York in Buffalo, Elia Ruckenstein emigroval z Rumunska a dostal místo na této univerzitě. Já jsem ovšem nelenil a ihned ho navštívil, abych mu vyčetl krádež práce. On však neztratil klid, ke všemu se přiznal a prohlásil, že to bylo třeba udělat, aby tak nezapadla dobrá práce. Tím ovšem zcela pominul podstatu svého činu. Ruckenstein, ač v Evropě byl dobře znám, neměl na univerzitě v Buffalu snadný život. Univerzita totiž nařídila svým profesorům, aby mu do začátku všichni dali 10% peněz ze svých grantů. To mu sice skutečně v začátku pomohlo, zároveň se však postaralo o jeho trvalou neoblíbenost.

Ve skupině byla rovněž vyvinuta (Jan Červenka) komplexní technologie zpracování prasečí kejdy. Prasečí kejda je problémem velkochovů prasat čítajících až 10 tisíc zvířat. Sama kejda se pro přímé hnojení nehodí pro příliš vysoký obsah čpavku. V nově vypracované technologii se tuhé podíly oddělily přidávkem vápna a nechaly aerobně vyhnít. Získaný bioplyn se využil k výrobě elektřiny v turbině. Z oddělené tekuté čpavkové vody (5% NH_3) se ve stripovací koloně s výplní z tahokovu oddělil NH_3 , který se dále absorboval ve vodě s CO_2 získaným ze spalování bioplynu. Získaný roztok byl využit jako kvalitní dusíkaté hnojivo. Licenci na technologii zakoupilo Holandsko.



Obr. 3. Kolona s tahokovem odstraňující kontaminanty z podzemních vod v lokalitě Neptun, Bylany.



Obr. 4. Výroba vibračního patrového extraktoru v Královopolské strojárně Brno.

Ve skupině Extrakce (Jaroslav Procházka, Aleš Heyberger, Jaroslav Bulička) byl vyvinut vibrační extraktor pozůstávající ze dvou nezávislých sad pater na dvou osách vibrujících proti sobě. V pozdější době byl učiněn pokus o nahrazení vačky vytvářející vibrace, lineárním motorem. Tento aparát byl úspěšně využit v celé řadě průmyslových aplikací: separace kaprolaktamu 12x, rafinace surového vosku z cukrové třtiny na Kubě, získávání lanolinu z odpadních vod po praní ovčí vlny, separace ceru z roztoku dusičnanů vzácných zemin, rafinace esteru kyseliny methakrylové, rafinace fenolu z dehtů a odpadních vod, extrakce uranových výluhů a přepracování vyhořelých jaderných paliv v Jihoafrické republice, extrakce rostlinných farmaceutických výluhů. Patrně nejúspěšnějším využitím vibračního patrového extraktoru byl prodej licence firmě Bofors, Švédsko, na rafinaci nitrosloučenin. Výroba průmyslového vibračního patrového extraktoru v Královopolské strojárně, Brno je vidět na Obr. 4. Výsledky dosažené v aplikaci vibračního patrového extraktoru, krytého 85

patenty, byly oceněny na výstavách a veletrzích INCHEBA Bratislava, 2x, INVEX Brno, 2x a ACHEMA Frankfurt, NSR.

Skupina „Náplňové systémy“ (Vladimír Staněk, Vladimír Jiříčný, Petr Vychodil, Hana Vychodilová) řešila absorpci v náplňových kolonách za neustálých podmínek. Byly formulovány matematické modely a jejich řešení využita k vyhodnocení parametrů reálných systémů. V návaznosti na práce o distribuci kapaliny v náplních byla vypracována teorie trojrozměrného toku tekutin v systémech tuhých částic (náplně, katalyzátory, pelety, atd.) s obecně nehomogenním rozdělením odporu vůči toku vlivem různé lokální velikosti částic nebo lokální porozity vrstvy.

Výsledky řady řešení spolu s vlivem nerovnoměrnosti toku tekutinu prostředím na přenos tepla a hmoty byly zpracovány do monografie (V. Staněk: Fixed Bed Operations-Flow Distribution and Efficiency, Ellis Horwood Series in Chemical Engineering) a v aplikaci na tok redukčních plynů vsázkou vysoké pece v NHKG Kunčice.

Skupina dále řešila problém řízení plnění vozů s tekutým železem, viz Obr. 5. Rovněž byly modelovány procesy plynulého odlévání oceli a aplikovány na proces v Železárnách Bílá Cerekev, Hrádek u Rokycan a proces dvouproudeho lití kruhových a čtvercových profilů slitků v železárnách Králův Dvůr. Měření povrchové teploty slitku při aplikaci modelu plynulého odlévání je vidět na Obr. 6.

Matematické modelování ve skupině se dále orientovalo na vyhodnocování redukovatelnosti železných rud, řízení procesu aglomerace prachových železných rud a na průběh tavení šrotu v kuplovacích pecích. Publikace těchto prací byly oceněny plakétou *Best Paper Award* od American Foundry Society.

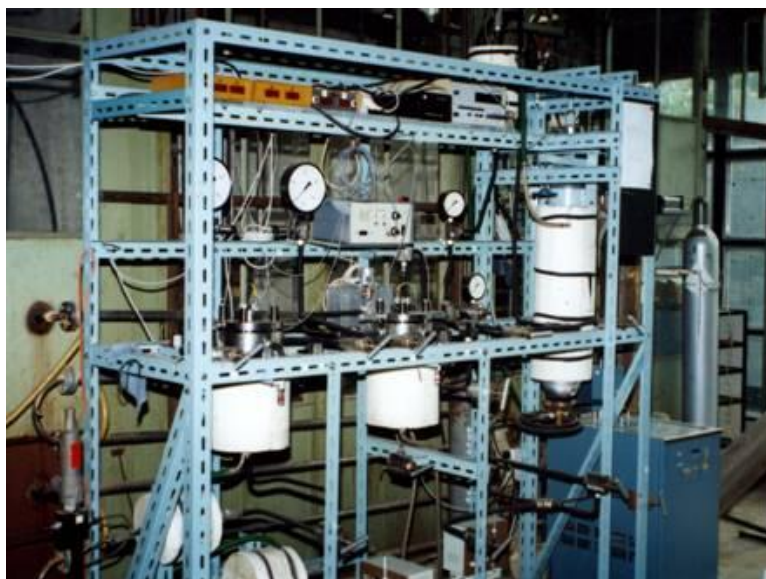


Obr. 5. Plnění převážecího vozu tekutým železem.



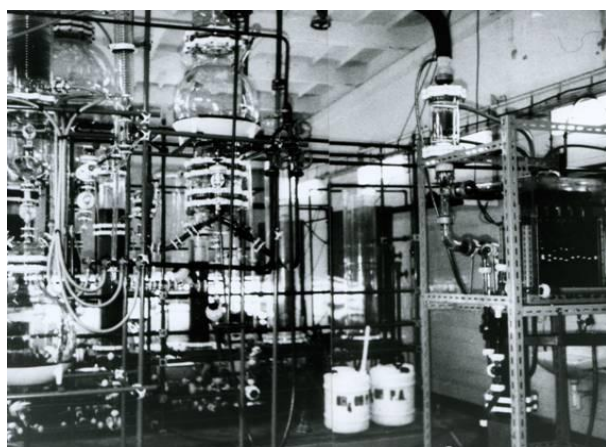
Obr. 6. Měření povrchové teploty slitku při plynulém odlévání v KŽ Králův Dvůr.

Skupina Superkritické extrakce (Helena Sovová) zahájila nový výzkum superkritické extrakce a postupně vybudovala dva extraktory. Jeden s výměnnou celou na 12 nebo 150 ml a poloproduční extraktor o objemu 1,5 litru (viz Obr. 7). Studovány jsou zejména extrakce látek z pevných buněčných matic, enzymové reakce v superkritických tekutinách a měření rozpustnosti látek v superkritických tekutinách. Prakticky jsou prováděny na příklad extrakce β -sitosterolu a scopoletinu, extrakce pigmentů a pryskyřic ze žahavých listů, extrakce tymiánového oleje, černého pepře, máty pepřné, kmínu, semen vinných hroznů a β -karotenu.



Obr. 7. Poloprovozní superkritický extraktor.

Z novějších směrů, kromě superkritické extrakce, je v Oddělení separačních procesů studován reaktor s fluidní elektrodou (Vladimír Jiříčný), který byl aplikován na patentovaný proces výroby D-arabiny (viz Obr. 8) a štěrbinový mikroreaktor (Jiří Kříšťál, Vladimír Jiříčný) v aplikaci na elektrochemickou alkoxylation 4-methylanisolu (Obr. 9), vybudovaný během řešení Evropského projektu IMPULSE (6. RP EU).



Obr. 8. Výroba D-arabiny ve fluidním elektrochemickém reaktoru.



Obr. 9. Štěrbinový mikroreaktor pro elektro-chemickou alkoxylation 4-methylanisolu.

V oblasti matematického modelování byly formulovány modely protiproudého a souproudého dvoufázového toku v náplňových kolonách. Tyto modely byly podrobeny funkcionální analýze a na jejím základě stanoveny fyzikální podmínky, za kterých v protiproudé koloně dochází k zahlcení a v souproudé koloně ke vzniku pulzního toku. Dále byl poprvé popsán a pozorován jev překmitu tlaku v protiproudé koloně.

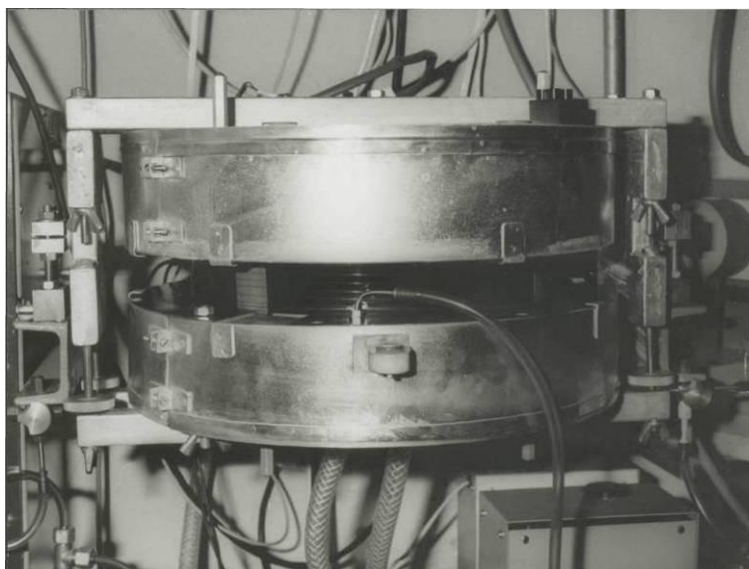
Vladimír Staněk

Cesta od sublimace k výzkumu aerosolů

Koncem sedmdesátých let vznikla v rámci Oddělení separačních procesů výzkumná skupina Sublimace, jejímž prvotním úkolem byl vývoj sublimačního čištění kyseliny tereftalové. Výsledkem bylo unikátní zařízení, postavené Jaroslavem Vítovcem, které se skládalo z fluidního sublimátoru, elektrostatického odlučovače, kondenzátoru a cyklonu a které zabíralo prakticky čtvrtinu haly 5. Celý proces zahrnoval tepelný rozklad tereftalanu amonného, dávkovaného do horké fluidní vrstvy korundových částic dvojitým šnekem, následnou sublimaci kyseliny tereftalové, separaci zbytku draselných soli z paroplynné směsi v elektrostatickém odlučovači a kondenzaci par kyseliny tereftalové v kondenzátoru se stěnou smáčenou dekalinem. Proces vyvíjený v ústavu byl původně založen na ftalanhydridu a později na kyselině benzoové vyráběné z toluenu. V roce 1970 však Ministerstvo chemického průmyslu rozhodlo, že další rozvoj výroby polyesterových vláken bude založen na p-xylynu z důvodu nedostatku toluenu. Tímto rozhodnutím byly všechny výzkumné činnosti na procesu výroby kyseliny tereftalové zastaveny. Vzhledem k vynikajícím výsledkům však výzkum sublimace dále pokračoval s cílem vyvinout sublimaci jako kontinuální proces pro čištění tuhých těkavých látek.

V té době byl způsob kontinuální sublimace ve fluidním loži ověřen na řadě organických látek, zásadní problém však byla kontinuální desublimace. V průmyslu byl tento problém řešen semikontinuálně: páry tuhých látek kondenzovaly ve velkých kondenzátorech, ze kterých po zaplnění kondenzátem a po přepnutí na paralelní aparát byla zkondenzovaná látka vytavena (např. ftalanhydrid) nebo mechanicky oškrabána a vyvezena (např. antrachinon). Naši základní představou byla kontinuální desublimace přímo v objemu plynné fáze, s odběrem vznikajících krystalů šnekem ze dna aparátu. Výsledkem byl „transpirační krystalizátor“, tvořený porézní stěnou (v praxi skelnou tkaninou), kterou byl profukován (transpirován) vzduch, zabráňující kontaktu par se stěnou aparátu. K ochlazení pak byla vyvinuta speciální dvoufázová tryska, rozprašující vodu do hlavního proudu paroplynné směsi. Celé zařízení i jednotlivé části (např. tryska) byly chráněny řadou domácích a zahraničních patentů. Aparát však fungoval pouze s několika látkami (ideální byl ftalanhydrid). Ve většině případů ale vznikaly velice malé krystalky, které se obtížně separovaly, nebo přímo mlha, která se nedala odloučit vůbec a bylo tak hned zřejmé, že je potřeba začít studovat důkladněji samotný proces krystalizace z parní fáze. Z analogie s krystalizací z roztoku jsme se proto začali zabývat nukleací (vznikem zárodků nové fáze uvnitř fáze mateřské) a tomu odpovídajícímu kritickému přesycení. Inspirovali jsme se tehdy článkem J. Katze, který použil k měření kritického přesycení par organických kapalin tepelně difúzní mlžnou komoru. To je zařízení, které využívá k tvorbě přesycených par současný přestup tepla a hmoty mezi dvěma paralelními povrchy kondenzované fáze s různými teplotami. Výsledkem je neizotermní difúze s téměř lineárními profily teploty a parciálního tlaku vypařované látky mezi oběma povrchy. Podstata procesu pak spočívá v tom, že tlak nasycených par, který je exponenciální funkcí teploty, klesá s teplotou podstatně rychleji než parciální tlak par, takže páry v komůrce jsou přesycené. Zvyšováním rozdílu teplot mezi oběma povrchy se pak může přesycení v komůrce zvyšovat až do stavu, kdy začnou vznikat homogenní nukleaci v objemu komůrky první částice. Další zvýšení přesycení pak vede k rychlému nárůstu počtu částic a k tvorbě mlhy. To vše sice vypadá poněkud uměle, stejným způsobem však vzniká ranní mlha nad řekou nebo rybníkem, kdy se voda vypařuje z teplejší hladiny do chladnějšího vzduchu (neizotermní difúze). Postavili jsme vlastní komůrku (viz Obr. 1) a na ní změřili kritická přesycení některých látek, které nás zajímaly (kyselina benzoová, ftalanhydrid, naftalen, naftoly). Komůrka měla řadu inovací a pracovala

z technických důvodů v „obráceném gardu“, tedy s vypařováním tenké vrstvičky tuhé látky z horní desky komory a kondenzací par na desce spodní.



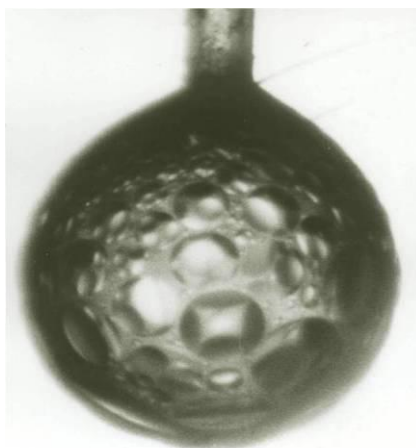
Obr. 1. Jedna z prvních tepelně difúzních komůrek

Později, když jsem objevil článek amerických autorů (C. Becker a H. Reiss) o nukleaci v přesycených parách nad kapalnou kyselinou stearovou, mě napadlo, že to je systém, kde bych mohl studovat nukleaci v parách kapalně i tuhé kyseliny a porovnat dále také klasickou komůrku s komůrkou pracující v „obráceném gardu“. Při měřeních v klasické komůrce s kapalnou kyselinou jsme si jednou všimli, že se kapky kondenzující kyseliny, které vždy padaly na spodní desku, pohybují najednou směrem k desce horní, kde jsou zachyceny. Při dalším zvýšení přesycení se ale otočily a začaly opět padat dolů. Problém nás natolik zaujal, že jsme se podívali do Chemical Abstracts a po jistém hledání našli práce, studující difuzioforézu a termoforézu (pohyb částic v koncentračním a teplotním poli). Jedná se o problém současného přestupu tepla, hmoty a hybnosti mezi částicemi a plynem. Objevili jsme tak pro sebe zajímavou disciplínu z oboru aerosolů, a to interakci částic s plynem.

Druhým tématem, do kterého jsme se pustili, byla interakce kapek vody s horkou paroplynnou směsí (vypařování kapek, ochlazování plynné fáze, kondenzace par málo těžké složky). To je poměrně komplikovaný problém i pro modelování (současný přestup tepla, hmoty a hybnosti v tříložkovém systému, s jednou složkou, která se vypařuje a další, která kondenzuje). Začali jsme proto stavět aparaturu, v které by bylo možné tento jev studovat experimentálně. V podstatě se jednalo o průtočnou komůrku, ve které byla zavěšena v proudu horké paroplynné směsi kapka vody pozorovaná mikroskopem (viz Obr. 2). V té době nastoupil do aspirantury Jaroslav Schwarz, který aparaturu dokončil a s pomocí Bohumila Třísky tento děj popsal a celý proces experimentálně ověřil. Výsledky ukázaly, že vypařovaná kapka současně působí jako kondenzační povrch. To významně přispělo k popisu transpiračního kondenzátoru.

Poté, co prakticky skončil výzkum a vývoj aparátu pro desublimaci, bylo potřeba vytvořit nový program. Protože už byla jistá zkušenost s foretickými jevy, napsali jsme na toto téma projekt. Projekt byl přijat (GA AV) a začali jsme na něm pracovat s Vladimírem Ždímalem, který byl v té době zaměstnán jako technik. Výsledkem byla řada publikací v dobrých časopisech, pěkný workshop „Phoretic Effects“, který jsme uspořádali v Praze, a nápad jak měřit rychlost homogenní nukleace v závislosti na teplotě a přesycení, nezávisle na teoretických předpokladech. Vývojem této metodiky se pak Vladimír Ždímal zabýval ve své

doktorské práci. Současně jsme spolupracovali s univerzitou v Marburgu na studiu foretických jevů při kondenzaci přesycených par alkalických kovů. Tady byl velikým pomocníkem Bohouš Tříška, který k nám přišel z Termodynamické laboratoře E. Hály, a který se pustil do modelování příslušných jevů. Nutno říci, že to byl problém pro „fajnšmekry“ a zahrnoval modelování současného přestupu tepla a hmoty v difúzní komůrce pro systém plynné cesium–helium, zahrnující i dimerizaci cesia v plynné fázi, včetně transportu diméru a dále nukleaci par cesia s následným růstem a pohybem kapek vlivem foretických jevů. To vše samozřejmě i s dimérem a přechodem transportních jevů z kinetické oblasti do kontinua. Tehdejší měření ukazovala pro malé koncentrace cesia značné odchylky od klasické teorie homogenní nukleace, které byly kolegy z Marburgu interpretovány jako důkaz přechodu kov–nekov, tedy že klastry cesia ztratí kovový charakter. Naše modelování však ukázalo, že je to opět důsledkem foretických jevů.



Obrázek 2. Kondenzace podchlazeného naftalenu na kapce vody

Dalším zajímavým tématem byla příprava nanočástic oxidu křemičitého pomocí laserově iniciovaného rozkladu par tetraethoxy-silikátu (TEOS). V té době se k nám přidal Pavel Moravec, který na tomto problému začal také pracovat. První nadšení trochu opadlo, když jsme v počátečních pokusech zjistili, že nanočástice připravované excimerovým laserem nejsou oxid křemičitý, ale nečistoty vypařované laserem z okének reaktoru. Vše vedlo k vývoji několika nových reaktorů a brzy jsme připravovali z TEOS nanočástice oxidu křemičitého oxidací par v průtočném reaktoru fotolýzou ArF laserem nebo pyrolýzou CO₂ laserem. V přípravě nanočástic pak pokračoval Pavel Moravec a v rámci různých grantů připravoval pomocí pyrolýzy, oxidace nebo hydrolýzy příslušných prekurzorů částice oxidů Al₂O₃, TiO₂ a ZrO₂. Na přípravě ZrO₂ u nás také pracovala prakticky jeden rok doktorandka z technické univerzity v Tampere. Výsledky pak byly součástí její disertace. Dalšími kroky byla příprava směsných nebo i vrstvených nanočástic uvedených oxidů a dále směsných nanočástic Cu/CuO_x, Ni/NiO, CuO_x/SiO₂ a v poslední době také Co/CoO/SiO₂. V průběhu času k nám přišla Lucie Džumbová, kterou nám poslal Kamil Wichterle z Ostravy. Ta u nás nejprve vypracovala diplomovou práci na téma vypařování malých kapek vody a pak pokračovala na své doktorské práci. Z řady našich měření vypařování kapek různých látek, na kterých se podíleli v rámci spolupráce i studenti z Finska, vznikly nové korelace pro přestup tepla a hmoty z vypařované kapky, vhodné pro neizotermní případ a pro Re < 3 (klasická korelace Ranze a Marshala platí pro Re > 3), které byly publikovány v dobrých časopisech. Jak je z předchozího patrné, brzy existovala pilná spolupráce s různými pracovišti ve Finsku.

Inspirováni doktorskou prací jednoho kolegy z Finska, týkající se měření a charakterizace velikostně rozlišených emisí ze spalování uhlí v elektrárnách, jsme se také pustili do studia emisí z procesu fluidního spalování. Práce byly prováděny ve spolupráci s kolegy z Ústavu struktury a mechaniky hornin AV ČR (příprava a charakterizace uhlí a charakterizace popílků) a Ústavu jaderné fyziky (složení vzorků pomocí metod PIXE a INAA) v rámci dvou grantů GA ČR a jednoho grantu GA AV a byly také součástí doktorské práce Lucie Džumbové. Ta k tomu ještě přidala termodynamické modelování, za vydatné pomoci Jindřicha Leitnera z VŠCHT, a dizertační práci úspěšně obhájila. Mezitím dokončil kandidátskou disertační práci také Jaroslav Schwarz a poté odjel na jednoroční stáž do Belgie studovat atmosférické aerosoly.

V následujících letech pokračovaly také nukleační studie. Na téma srovnání různých experimentálních metod pro studium homogenní nukleace jsme připravili v Praze v roce 1995 docela hezký workshop. Výsledkem byl projekt, ve kterém 14 laboratoří z celého světa měřilo rychlost homogenní nukleace v přesycených parách n-pentanolu. Všechny laboratoře používaly n-pentanol distribuovaný z jedné láhve a pro vyhodnocení stejné termodynamické a transportní vlastnosti sebrané v naší laboratoři (v podstatě Vladimírem Ždímalem). Ve finále měření pokryla prakticky 15 řádů v rychlosti nukleace. Vladimír Ždímal, který se věnoval nukleaci, odjel po dokončení doktorské disertační práce na jednoroční stáž do USA a po návratu pokračoval s Davidem Brusem, kterého nám opět poslal Kamil Wichterle, na studiu vlivu tlaku na rychlost nukleace. Během Davidova doktorského studia přijel na stáž Heiki Lihavainen z Finského meteorologického ústavu. Ten nám pomohl postavit průtočnou difúzní komůrku, kterou Vladimír Ždímal vybavil počítačem částic z Marburgu. David Brus pak odjel po obhajobě do Finska, kde pokračuje ve Finském meteorologickém ústavu na výzkumu nukleace, a kde napsal spoustu výborných článků.

V roce 1999 jsme v Praze pořádali Evropskou aerosolovou konferenci. Bylo to poprvé, kdy byla pořádána v zemi z bývalého východního bloku a s 450 účastníky a 500 příspěvky byla zatím největší. Při této příležitosti jsme také založili Českou aerosolovou společnost (ČAS). Ta má v současné době cca 50 členů a pořádá každoročně konferenci, mnohdy se zahraniční účastí. V rámci dobrých vztahů s kolegy z Finska jsme také zorganizovali v Praze 1. Česko–finské sympozium o aerosolech (s více než padesáti účastníky) a později jsme se podíleli na Finsko–českém sympoziu v Helsinkách. Za svoje aktivity byla ČAS přijata do Evropské aerosolové asociace (European Aerosol Assembly), kde má ve výboru také zastoupení autorem těchto řádků.

Pražská konference přinesla i spoustu nových kontaktů. S kolegy z Řecka (s kterými jsme již trochu spolupracovali) jsme podali několik projektů pro 6. Rámcový program EU a byli jsme docela úspěšní. Výsledkem byl projekt SUB-AERO, v rámci kterého jsme měřili kvalitu ovzduší na Krétě a na výzkumné lodi AEGAEON, křižující ve Středozemním moři v okolí Kréty, a projekty URBAN AEROSOL a URBAN EXPOSURE, kde jsme měřili kvalitu ovzduší ve vnitřním prostředí velkoměstské zástavby a zjišťovali vztah mezi vnitřním a vnějším ovzduším. Lokality zahrnovaly kromě Prahy také Milán a Oslo. To přineslo i nový program – výzkum aerosolů ve vnitřním ovzduší. Na toto téma jsme dostali spolu s ČVUT dva granty GA ČR, na kterých jsme pracovali společně s doktorandem z ČVUT a s doktorandkou z Technické univerzity v Košicích. Problematika vnitřního prostředí pokračuje i v navazujících projektech COST D42 EnviArt, ministerstva školství a Norských fondů. Zde se jedná o studium škodlivých vlivů vnitřního ovzduší na staré knihy a rukopisy, uložené v Praze v Barokním knihovním sále Klementina. Toto studium je i součástí doktorské práce Ludmily Andělové, doktorandky z Univerzity Karlovy.

Studiu atmosférických aerosolů se věnuje převážně Jaroslav Schwarz. Na tomto programu spolupracujeme s asi padesáti pracovišti z celého světa v rámci dvou projektů 6. rámcového programu EUSAAR a EUCAARI a společně s Českým hydrometeorologickým

ústavem i v projektech VaV a Norských fondů. S ČHMÚ máme uzavřenou dlouhodobou smlouvu o výzkumné spolupráci a zřízenou Společnou laboratoř pro výzkum atmosférického aerosolu. Významná je i spolupráce s pracovišti v Gentu a v Budapešti. V souvislosti se studiem atmosférických aerosolů a se spoluprací s řeckými kolegy je ještě potřeba zmínit i dvouroční stáž Lucky Džumbové a Jakuba Ondráčka, na Technické univerzitě v Chani.

Jedna z významných aktivit Laboratoře aerosolů byla také organizace úspěšné 18th International Conference on Nucleation and Atmospheric Aerosols, která se uskutečnila v létě 2009 v Praze. Shodou okolností to bylo právě čtyřicet let od předcházející konference ICNAA, kterou organizovali, spolu s prof. Othmarem Preiningem z Vídeňské univerzity, Josef Podzimek a Květoslav Spurný v Praze a ve Vídni.

Jiří Smolík

Fázové rovnováhy ve světě, v Česku a v ÚCHP

Protože nás – nejstarších pamětníků – pomalu ubývá, vynosnažím se v tomto příspěvku popsat současné i přicházející generaci, jak se historicky vyvíjel jeden z hlavních oborů studovaných v ústavu, tj. termodynamika fázových rovnováh.

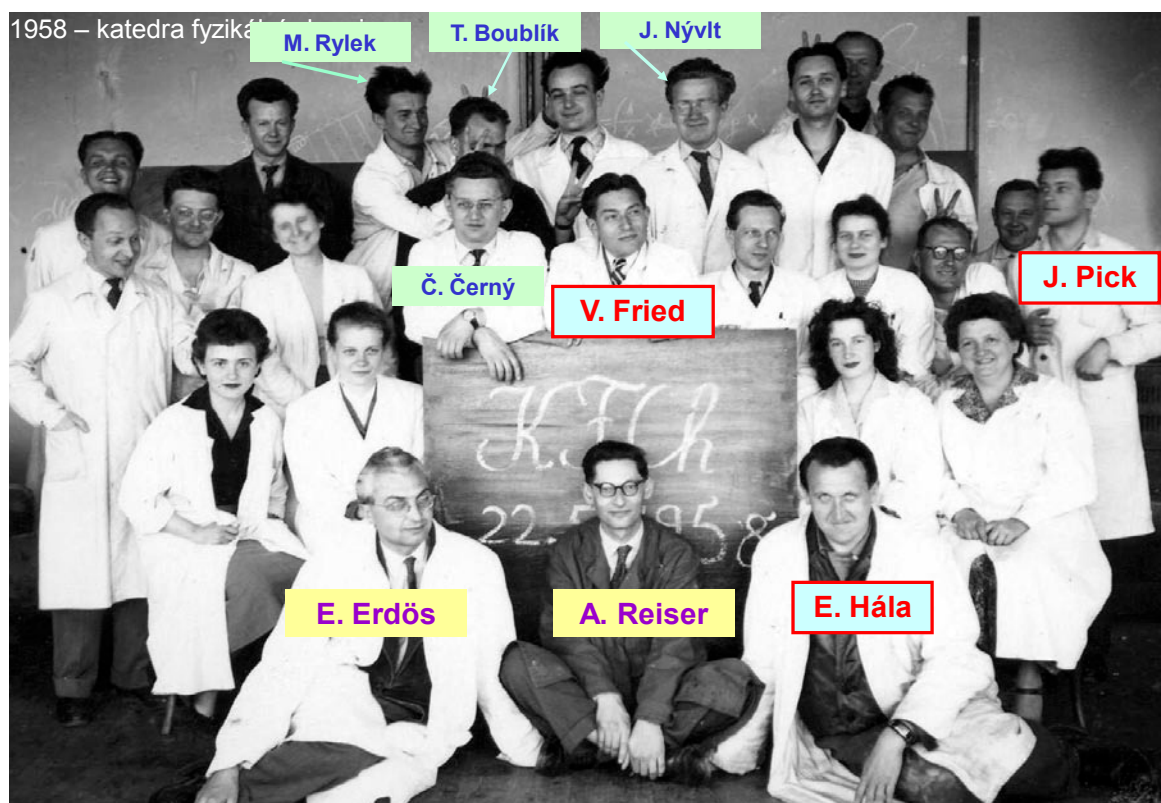
Začneme jednoduchou otázkou, a to jaké známe fázové rovnováhy ve fluidních soustavách. (Přesně česky bychom měli sice říci „tekutých“, ale termín fluidní se mi líbí daleko více). Odpověď zní: existují zhruba tři druhy, totiž (1) rovnováhy mezi nemísitelnými kapalinami, které jsou důležitá pro extrakce, (2) rovnováhy kapalina–pára (plyn), které jsou důležité pro destilace, a (3) kombinaci, kde jsou v rovnováze třeba dvě kapalně fáze a pára, nebo případně tři kapalně fáze, což je důležité pro současnou destilaci a extrakci.

Aby však obrázek byl úplný, musíme se vrátit daleko do historie, někam do 19. století, kdy tato fyzikálně–chemická záležitost začala být aktuální. V té době se již objevují první experimentální měření, a ač velmi akademického rázu, mnohá z nich měla značný praktický dopad na průmyslovou revoluci: údaje potřebovali např. lihovarníci kvůli destilaci kvasných směsí. Z dnešního pohledu byly tyto začátky velice roztomilé, a proto vřele doporučuji prolístovat si v knihovně VŠCHT Listy cukrovarnické či Listy chemické z konce předminulého století. Je to nádherné čtení. Později, ve dvacátých letech, kdy si již chemické inženýrství hledalo své místo na slunci, vypukla větší poptávka po fyzikálně–chemických datech už jen proto, aby se některé procesy daly vůbec racionálně projektovat. Pak nastal obrovský rozmach laboratorních měření, který trval až do sedmdesátých let, kdy množství publikovaných dat vedlo ke tvorbě datových bází a v osmdesátých letech se potom na základě těchto datových bank začaly vyvíjet předpovědní metody. Počítače, které se v té době už docela rozšířily, bez potíží dovozovaly výpočetní lenost, bohužel však s jedním velmi špatným důsledkem: začal úpadek experimentování.

Kde je tedy počátek studia fázových rovnováh v Československu? Především po druhé světové válce, začal prof. George Standart přednášet kurzy chemického inženýrství po americkém způsobu; zprvu to byly přednášky v angličtině a je dlužno konstatovat, že většina jeho absolventů se stala našimi nejlepšími odborníky v oboru. On byl mimo jiné také iniciátorem myšlenky, že by se měl zavést systematictější výzkum fázových rovnováh. A tak na jeho impuls vznikl v roce 1949 zárodek budoucí světoznámé pražské termodynamické školy na Ústavu fyzikální chemie, posléze Katedry fyzikální chemie a nyní opět Ústavu fyzikální chemie (pro přesnost je nutno dodat, že tehdy to ještě nebylo na VŠCHT, ale na Fakultě chemicko–technologického inženýrství ČVUT). Otcové–zakladatelé tohoto oboru vymýšleli nové experimentální metodiky pro měření fázových rovnováh od časných padesátých let. Prováděli nejen inovaci techniky, ale i způsoby zpracování dat, což bylo ovšem omezeno na nejjednodušší numerické procedury, jako je metoda nejmenších čtverců pomocí mechanických kalkulaček. Všechny sebrané zkušenosti shrnuli v roce 1954 do monografie „Rovnováha kapalina–pára“, kterou o čtyři roky později vydal Pergamon Press v prvním anglickém vydání jako světově unikátní dílo. Přeložil ji G. Standart za následujících podmínek, vyslovených se svou typicky americkou intonací: „když budou peníze, a bude jich hodně, a budou brzy“.

Na Obr. 1 je fotografie členů Katedry fyzikální chemie VŠCHT z roku 1958, kde se to vše rodilo, a kde jsou tři důležité osobnosti oboru: profesor Eduard Hála, který je také jedním z tvůrců imige ÚCHP, a dále profesori Vojtěch Fried a Jiří Pick (tehdy ovšem všichni ještě nebyli ani docenti), kteří jsou spoluautory zmíněné monografie – žádný z nich již není mezi námi. Na obrázku jsou ještě dva další charaktery, a to Emerich Erdős a Arnošt Reiser. Tato dole sedící trojice vládla rukou svornou a nerozdílnou nad katedrou v triumvirátu; oni se sice formálně střídali ve vedení, ale rozhodování bylo společné a celé katedře prospěšné. Můžeme

ukázat na další lidi, např. na Milana Rylka, kterého si mnozí pamatují; tehdy byl ovšem na této katedře jako aspirant (nyní: doktorand), společně s Jaroslavem Nývltem, který je jeden z největších, ne-li nejdůležitějších lidí přes krystalizaci v Evropě. Milan Rylek, dlouholetý inženýr na našem ústavu, je už také v penzi, ale nedávno jsem ho v ústavu viděl čiperného a veselého, tak jako na tom obrázku. Jsou tu i další jména, která možná ještě něco napoví: doc. Julius Pouchlý, emeritní profesor na Ústavu makromolekulární chemie AV; dále aspirant Tomáš Boublík, kterého je sice vidět jenom půlka, rovněž přes tři desetiletí člen ústavu, a nyní profesor v Ústí nad Labem na tamní univerzitě, prof. Čestmír Černý, druhdy porevoluční rektor VŠCHT a jiní. To bychom ale mohli vzpomínat velmi dlouho.



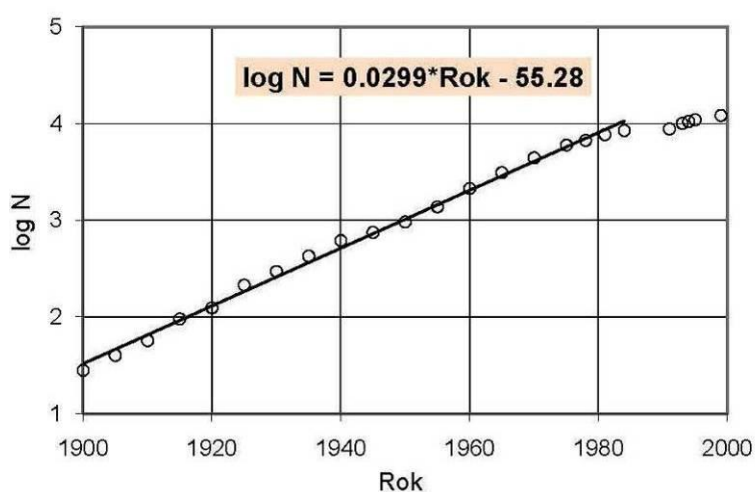
Obr. 1. Katedra fyzikální chemie VŠCHT v r. 1958.

Zleva, horní řada: J. Pouchlý, V. Vacíkar, M. Rylek, T. Boublík, M. Šolc, J. Nývlt, K. Dvořák, V. Jehlička, J. Bareš, Macek; střední řada: L. Landa, ?, M. Jirmanová, Č. Černý, V. Fried, I. Vavruch, H. Kohoutová, V. Rozvoda, J. Pick; dolní řada: Z. Jírů, M. Šišková, J. Margoliusová, ?; sedící: E. Erdős, A. Reiser, E. Hála

První experimenty byly založeny na seriálu sedmi prací, které vyšly v Chemických listech, a které pojednávaly o tomto u nás nově zaváděném oboru. Skutečně první experimentální měření však bylo vyprovokováno dost kuriózním požadavkem průmyslu týkajícím se fázových rovnováh v nezvyklých dvousloužkových a třísloužkových soustavách esterifikačního charakteru (s kyselinou mléčnou) včetně měření tlaků nasycených par čistých složek, což se seběhlo někdy okolo roku 1949. Experimentální technika se pak na katedře začala intenzivně rozvíjet, hlavně také díky tomu, že na VŠCHT byli prvotřídní skláři (pan Petrák), kteří byli schopni vyrobit poměrně složité skleněné přístroje, i když v té době ještě z měkkého skla. Celý ten rozmach se potom odrazil i na dalších pracovištích v Československu, především na Ústavu fyzikální chemie ČSAV, kam přešel doc. Hála (poté, co byl v r. 1958 „vyprověřován“ z VŠCHT), včetně T. Boublíka a mne: my jsme byli malá tříčlenná skupinka, kterou prof. Bažant přelanařil v roce 1964 do ÚTZCHT. Dále to bylo na Chemicko–technologické fakultě Slovenské vysoké školy technické v Bratislavě a v

rezortních výzkumácích jako ve Výzkumném ústavu pro petrochémiu v Novákách, Výzkumném ústavu pro chemické využití uhlovodíků (VÚCHVU) v Záluží, ve Výzkumném ústavu anorganické chemie (VÚANCH) v Ústí n/L., a trochu v Pardubicích.

Růst počtu publikací s experimentální tematikou názorně ukazuje, jak intenzívně se rozvíjel obor během 20. století. Vývoj se dá perfektně vystihnout exponenciální funkcí v linearizovaném tvaru, když proti času vynášíme logaritmus počtu publikovaných prací a je zřejmé, že zhruba do roku 1980 je to krásná přímka (Obr. 2). Její rovnice vepsaná v obrázku, umožňuje spočítat si konkrétně, kolik prací v kterém roce bylo dosud publikováno. Ale začátkem osmdesátých let začíná úpadek experimentování; kdyby však původní trend pokračoval stále tak exponenciálně, tak bychom dnes byli na padesáti, šedesáti tisícovkách prací, a ne na reálných 13 tis. publikací. Ze srovnání publikační aktivity na světě a v Československu (a poté v Česku) z toho vůbec nevycházíme špatně: dvěstěpadesát článků českých a slovenských autorů s experimentálním obsahem představuje velmi solidní 2 % celosvětové produkce, z nichž valná část pochází z ÚTZCHT (ÚCHP).



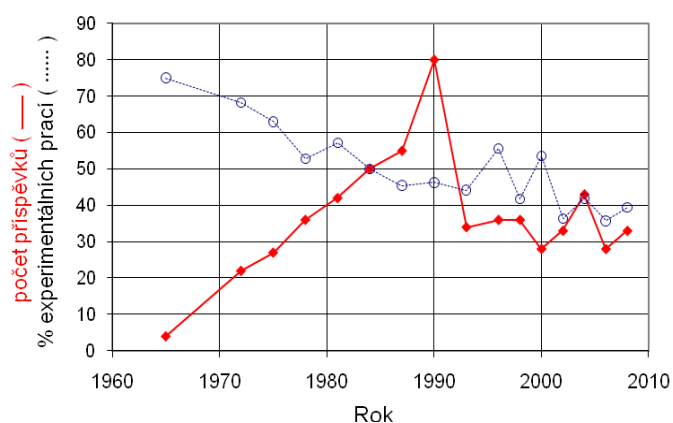
Obr. 2. Integrální počet publikovaných prací (N) ve světě.

Nemohu také nezmínit to, co jsme – jako Termodynamická laboratoř E. Hály – provozovali, a co nadále na ústavu provozujeme. Za více než 40 let naší zdejší působnosti se naměřilo pro naše akademické potřeby a také pro zakázky z průmyslu zhruba 200 dvousložkových soustav kapalina–pára a přibližně 30 tříložkových soustav za normálních tlaků a za vysokých tlaků okolo dvaceti. Vysokotlaké experimenty jsou samozřejmě náročnější, protože proměření jedné soustavy trvá řádově rok, nemluvě o problémech s průběžnou nutností upravovat experimentální techniku ad hoc. Zde je nutno vzpomenout nepřehlédnutelný příspěvek absolutně nejlepšího sklofoukače p. Alexandra Černého, jehož kvality jsme po léta „zneužívali“. Nezmiňuji zde další data, která se v našem oddělení měřila, a to jsou rovnováhy kapalina–kapalina, tlaky nasycených par, měření základních a dodatkových termodynamických veličin atd. a samozřejmě s tím související zpracování těchto údajů. Jako vedlejší produkt naší práce byla bibliografie numerických dat, kterou jsme digitalizovali již v r. 1973, a která vyšla v mnoha monografiích a na CD-ROM. Celá práce byla korunována v r. 2007/8, když tato bibliografie byla publikována jako dva zvláštní svazky Landoltovy–Börnsteinovy encyklopedie. Několik konkrétních parametrů: bibliografie zahrnuje 13600 referencí o 21000 systémech, což je odhadem okolo čtvrt milionu experimentálních bodů.

Jak však pokračovala studia fázových rovnováh v návaznosti na separační procesy? Až do šedesátých let, kdy docházelo stále více a více na počítače, fungovaly v tomto oboru a v

chemickém inženýrství vlastně jenom grafické metody. McCabeova–Thieleova metoda byla nejnámější a představovala „malování schodů“ do rovnovážných diagramů, coby teoretických pater destilačních kolon. Ta byla posléze zdokonalena Lewisem a Mathesonem a později Thielem a Geddesem, což byl poslední grafický výkřik používaný dalších asi 20–30 let. Tyto metody vycházely pouze z grafů experimentálních dat o rovnováze mezi kapalnou a parní fází. Příchod počítačové éry zapříčinil nástup výpočetně analytických metod, potřebných zejména pro zpracování dat a projekčních výpočtů separačních jednotek. Rukodílné výpočty, které se do té doby dělaly pomocí logaritmického pravítka, případně rachotících kalkulaček, se přesunuly do nového oboru „Computer Aided Process Engineering – CAPE“ a současně nastal příklon k předpovědním metodám.

Co se však stalo s experimenty týkajícími se fázových rovnovah? Komputelizace oboru měla následující důsledky. Za prvé, experimentální data se mohla kvalitněji zpracovávat, to znamená převádět je do analytických vztahů, a tak je digitalizovat pro použití při projekčních procedurách. Za druhé, počítače umožnily tvorbu datovýchází, které se – když už obsahovaly to obrovské množství experimentálních bodů – daly použít k přípravě a zlepšování předpovědních metod. Výpočetní technika naneštěstí pomohla odtáhnout ruce pryč od experimentů a vedla k tvorbě komerčních softwarových balíčků pro výpočet jakýchkoliv údajů, a to pokud možno z minimálního množství vstupních údajů a samozřejmě za peníze. A to všechno se stalo navzdory tomu, že se moc dobře ví, že data chybí právě v okamžiku, kdy se naléhavě potřebují, a kdy se s požadovanou přesností nedají vůbec žádným způsobem ani vypočítat, ani odhadnout. Data pro stále extrémnější podmínky, se kterými se setkáváme, například hlubinné vrty nebo těžba zemního plynu ze dna moří, kde jsou např. v hloubce 4000 m podmínky více než drastické: stovky barů, stovky stupňů Celsia, i když by jeden řekl, že v Severním oceánu musí být dost velká zima. Kdekdo už ví, že slušná data pro superkritické extrakce (to znamená vysokotlaké extrakce nejobvykleji pomocí oxidu uhličitého), se prakticky nedají získat jinak než z experimentu. Přitom si musíme uvědomit, že termodynamika na papíře nebo v počítači pořád není tak všeho schopný nástroj, jak to vypadá.



Obr. 3. Počet příspěvků z oboru fázových rovnovah na mezinárodních kongresech CHISA (—); podíl experimentálních prací v % (.....).

Demonstraci toho, jak se tento obor rozvíjel a jak probíhal, je názorné sledovat na příspěvcích, které byly prezentovány na mezinárodních kongresech chemického a procesního inženýrství CHISA. Počet příspěvků v závislosti na čase je ukázán na Obr. 3: První CHISA se

konala v roce 1962 a množství příspěvků týkajících se fázových rovnovah narůstalo lineárně až do devadesátých let; v roce 1990 se objevil obrovský pík díky nájezdu sovětských účastníků, nemohoucích do té doby nikam cestovat a okamžitě využili první příležitosti, aby se vypravili do západní ciziny. Potom nastal pokles a je zřejmé, že v dnešní době počet prezentací stagnuje okolo třiceti. Ještě lépe je to vidět na podílu experimentálních prací, kterých bylo na počátku okolo tří čtvrtin všech příspěvků, který trvale klesá až na současných 40 %.

Před závěrem mohu konstatovat, že v minulém století nastaly tyto posuny: za prvé to byl přechod od korelací k předpovědím, což je samozřejmě dobrá věc, která usnadňuje život fyzikálním chemikům. Druhý jev byl přechod od experimentů k datovým bankám, což je opět důležitý moment, který usnadňuje život chemickým inženýrům. Ve své podstatě byl však takový vývoj nepříliš dobrý, protože oslabil snahu experimentovat, přičemž experimentů není nikdy dost v žádné vědní oblasti. To bychom si měli uvědomovat zejména na našem ústavu, který je víceméně experimentálního ražení.

Co si tedy přát do budoucnosti? Vpád počítačů nezastavíme ani kdybychom se na hlavu stavěli, neboť nám poskytují poměrně snadný život. Prozatím ani sebelepší simulátory, Aspeny a bůhvíjak se všechny jmenují, nevystihnou skutečnost přesně a zejména ne v těch případech, kdy spolehlivý výsledek potřebujeme s téměř 100 % zárukou. Víme, že tyto simulátory budou stále hojnější a stále lepší. Co však bude s experimenty? Myslím si, že přežijí; prakticky zatím není jiné cesty, protože počítače nebudou samy experimentovat ještě nejméně padesát následujících let a budeme tedy muset spoléhat na pošetilce, kteří svého koníčka – experimentování – budou provozovat s pomocí bohatších mecenášů.

A úplně na závěr uvedu své oblíbené varování, neboť situace je opravdu velmi vážná, a proto musím znovu a ještě důrazněji zopakovat: pohodlné vysedávání u počítače zatím žádná kvalitní data nevyprodukovalo.

Ivan Wichterle

Termodynamická laboratoř E. Hály (historie, přítomnost a budoucnost)

Prehistorický úvod

Dovolím si na začátku poznamenat, že jsem svým způsobem dvojnásobně hendikepovaný pamětník: z autorů kapitol tohoto almanachu jsem jeden z nejmladších, takže jsem nejstarším událostem nebyl přítomen a musím se o nich nechat poučit od starších kolegů, na druhé straně už ale ve svém věku zapomínám i to, co já jsem sám viděl, zažil a věděl. Prosim, budiž toto laskavě vzato v úvahu.

Musím začít prehistorií, prvopočátkem rozvoje výzkumu fázových rovnováh, který v tomto státě de facto inicioval profesor Standart v rámci nově pojatého chemického inženýrství na VŠCHT. Zůstává pro mne záhadou, jak vlastně vznikla v jednom krátkém období tak silná sestava lidí na Katedře fyzikální chemie, jejíž zárodek se datuje okolo roku 1949, a která se velmi rychle rozrostla a stala se „pražskou termodynamickou školou“.

Jednou z hlavních motivací pro rozvoj oboru byly jistě požadavky průmyslu na data o fázových rovnováhách pro separační procesy, což přímo vedlo k rozvinutí nových experimentálních technik. Byla to např. průtočná metoda, jejímž hlavním autorem byl O. Vilím (1954), navržená pro soustavy látek nestabilních při vyšších teplotách tak, že látky v daných podmínkách měření byly ve varné zóně v kontaktu jen velmi krátkou dobu. Dále to byla recirkulační technika, založená na jednoduchém principu, který ještě dále zmíním, tehdy v podstatě rozvíjená od Gillespieho přístroje (1946) a jemu podobných.

Byly rovněž zaváděny nové metody zpracování dat. V té době šlo zejména o využití empirických a semiempirických modelů pro dodatkovou směšovací Gibbsovu energii, tj. rovnic vyjadřujících závislost aktivitních koeficientů na koncentraci. Ty vycházely z jednoduchých teorií roztoků nebo to byl prostě jenom empirický polynom, který se použil právě do toho stupně, který byl potřeba pro dobré vystižení údajů pro daný systém.

Výsledky všech těchto snažení byly shrnuty v rozsáhlé monografii Hála–Pick–Fried–Vilím „Rovnováha kapalina–pára“ (1954), která byla ve své době unikátní. Poté, co vyšla v roce 1958 v anglické verzi (ve Standartově překladu), se stala základní knihou – doslova biblí – oboru. Až teprve po rozhovorech s mnoha zahraničními kolegy jsme postupem času doceňovali, jak byla ve světě známa, využívána a uznávána.

Pokud jde o podrobnější pojednání o protagonistech a událostech oné „prehistorické doby“ (tj. před ustavením Laboratoře chemické termodynamiky na ústavu), odkazují na kapitulu kolegy Ivana Wichterleho „Fázové rovnováhy ve světě, v Česku a v ÚCHP“.

Léta šedesátá

Přelomovým rokem byl samozřejmě rok 1964, kdy byla dostavěna a plně zařízena budova našeho ústavu, tehdy Ústavu teoretických základů chemické techniky (ÚTZCHT) na katastru Lysolaje a poštovní adrese Suchdol, a kdy v ústavu vznikla Laboratoř chemické termodynamiky (LCHT). Jádro LCHT tvořili Eduard Hála (který byl samozřejmě vedoucím), Tomáš Boublík a Ivan Wichterle, kteří na ústav přešli z „Máchovky“, tj. z Ústavu fyzikální chemie ČSAV (ÚFCH).

ÚFCH sídlil v Máchově ulici na Vinohradech v bývalé ubytovně řádových sester, která byla generálem Čepičkou zrekvírována, ale nakonec připadla ČSAV. Dům samozřejmě nebyl postaven jako experimentální vědecká budova. Byly tam malé kamrlíky, kde čtyřčlenná Hálova skupinka pracovala ve dvou takových o velikosti 5 m². Stísněné byly tak, že se tam nevešli ani Standartovi aspiranti Jan Linek a Jiří Polák, kteří by sem také patřili, a právě proto zůstali fyzicky na VŠCHT. E. Hála přišel na ÚFCH z VŠCHT, odkud musel odejít v r. 1958 v rámci prověrek; T. Boublík přišel na ÚFCH z průmyslové aspirantury v Rybitví, zatímco I. Wichterle nastoupil na Máchovku jako Hálov aspirant.

Do LCHT v ÚTZCHT přišli již zmínění Honza Linek, Jiří Polák, technik Kamil Hloušek (z Rybitví) a další lidé. V letech 1964 až 1969 se připojili také Karel Hlavatý z Přírodovědecké fakulty UK, Ivan Mertl (Polákův diplomant) a dvě techničky alias laborantky, Jarka Polednová a Svát'a Bernatová.

Z té rané doby mohu již zmínit také osobní vzpomínku: o prázdninách v roce 1964 jsem coby student SPŠCH (Střední průmyslové školy chemické v Křemencově ulici) absolvoval praxi v tehdejší ÚOCHAB. Pracoval jsem na syntéze kyseliny tereftalové v provizorních „budnicích“, které stály v místě, kde teď vyrostla budova nové Národní technické knihovny. Každý druhý den jsme jezdili do suchdolského areálu na různé brigády (např. tahat kabely od vrátnice do hlavní budovy), takže jsem již tehdy poznal různé lidi spjaté s historií ústavu (třeba pány Eibla, Honzu Kratochvíla, Mirko Kadlece, Zdeňka Novosada i další), ale vůbec jsem neměl ponětí, co se to tady vlastně rodí, a že bych tady jednou mohl skončit.

Do ústavu jsem pak přišel poprvé až na podzim r. 1969 coby Boublíkův „pomvěd“ (pomocná vědecká síla) a posléze diplomant (1971). V té době již v sestavě chyběli Kamil Hloušek, Ivan Mertl a rovněž Jiří Polák, který v roce 1968 emigroval do Kanady. Byli zde ale aspiranti Karel Procházka, Jiří Vejrosta, Jarda Mikšovský a Ivo Nezbeda (původně externí aspirant ze Státního výzkumného ústavu materiálu v Běchovicích).



Obr. 1. Jiří Polák.



Obr. 2. Ivan Mertl
(v pozadí Karel Hlavatý).

Tomáš Boublík se již v šedesátých letech pustil do statistické termodynamiky a (po diskusích s prof. Hálou, jeho iniciací a s jeho podporou) sestudoval, co bylo v tomto relativně novém oboru k dispozici, a začal zkoumat modelové systémy tekutin tvořených tuhými tělesy. Základy oboru přehledně shrnuli v knížce (Hála–Boublík: Úvod do statistické termodynamiky, 1969), která byla na svou dobu velmi pokročilá a sloužila jako základní učebnice. V té době byl tento směr výzkumu rozvíjen jen na několika místech ve světě. Studovaly se modelové soustavy tuhých koulí, tuhých konvexních těles a postupně dalších modelů, a to s využitím relativně jednoduchých teorií („scaled-particle theory“, poruchové teorie). Do tohoto oboru byli postupně zapojeni Karel Hlavatý, Ivo Nezbeda (řčený Zrzek), Karel Procházka (řčený Zikmund, Ziki, či Liška Ryšavá; později dlouholetý vedoucí Katedry fyzikální a makromolekulární chemie na Přírodovědecké fakultě UK) i já jako diplomant.

Dovolím si teď odbočit k výzkumnému tématu fázových rovnováh (s tím, že doménou LCHT vždy byly soustavy tekuté). Kvantitativní charakterizace fázových rovnováh představuje základní údaje pro návrh separačních zařízení de facto všech procesů, které

využívají toho, že kontaktní fáze mají různé složení. To je praktická stránka věci. Co do fázové rovnováhy je chování vícefázového systému popsáno, jsou-li koncentrace všech fází koexistujících v rovnováze známy v celém oboru jejich výskytu v požadovaném rozmezí teplot a tlaků. Všechny uvedené veličiny lze v principu měřit, nejsou to však měření triviální. Experimentální stanovení rovnováh samozřejmě vždy byla a jsou relativně drahá, takže průběžně existovaly a existují snahy vyvinout kvantitativní popis (termodynamické modely), který by měl co největší předpovědní sílu, a který by tak k požadovanému popisu chování soustavy potřeboval jen minimální experimentální informaci. Takové modely vycházejí (v různé míře) z teoretických základů (různých typů). Ideálním případem je pak model, který umožní požadované vlastnosti plně předpovídat.

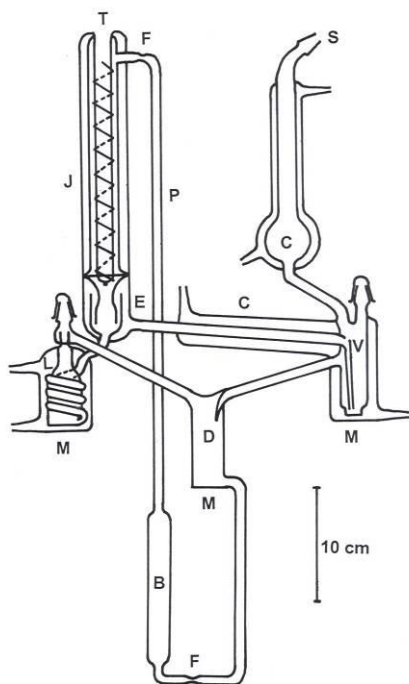
Termodynamicky konsistentní kvantitativní popis vícefázového systému vždy vychází z kritérií rovnováhy, kterými obecně jsou (za daného celkového tlaku stejného ve všech částech soustavy) rovnost teplot a chemických potenciálů jedné každé složky ve všech fázích. Pro použití obecných vztahů klasické termodynamiky k praktickým výpočtům je nutné chemické potenciály složek vyjádřit prostřednictvím měřitelných veličin. Takové vyjádření umožnil koncept fugacity, po jehož zavedení lze převést podmínku rovnováhy z rovnosti chemických potenciálů na rovnost fugacit za konstantní teploty.

Fugacitu je v zásadě možné vyjádřit dvěma způsoby: první způsob, který je založen na využití referenčního stavu ideálního roztoku a výrazů pro dodatkovou směšovací Gibbsovu funkci (resp. výrazů pro aktivní koeficienty), je vhodný pro kondenzované fáze za podmínek dostatečně vzdálených od kritické oblasti; druhý způsob je založený na použití stavové rovnice, tj. referenčním stavem je v tomto případě stav ideálního plynu.

Samozřejmě se původně začalo s ryze empirickými modely, úsilí pak postupně směřovalo přes semiempirické modely k modelům více založeným na teorii. Velmi zhruba řečeno, v případě modelů pro dodatkovou směšovací Gibbsovu funkci tak vývoj postupoval od nejjednodušších teorií roztoků (např. regulární, mřížková) po sofistikovanější modely založené na „lokálním složení“; v případě stavových rovnic šel vývoj od stavové rovnice ideálního plynu a viriálního rozvoje (pro plyny a páry za nízkých tlaků) přes Van der Waalsovou stavovou rovnici a množství jejích úprav po stavové rovnice vycházejících z poruchových teorií s využitím údajů a představ o molekulárních interakcích. Svůj význam však vždy měla a stále ještě mají i matematická vyjádření bez výraznější predikční síly, která slouží k vystižení experimentálních údajů v prakticky použitelné jednoduché analytické formě (matematické modely).

Experimentální stanovení fázových rovnováh byla a jsou dosud nezastupitelná, měření v tomto oboru se provádějí jednak pro přímé použití údajů pro návrh separačních zařízení, jednak k ověřování modelů všech zmíněných typů a subtypů.

V pojednávaném období v naší laboratoři dominoval přístroj, který byl vyvinut na počátku šedesátých let Boublíkem a Dvořákem (Obr. 3). Je to přístroj s recirkulací obou fází, kde se směs vaří ve vařáku B, Cottrelovou pumpou P–F stříká do rovnovážné komory, kde se měří teplota T, a v ekvilibrátoru E se pak rozdělí parní fáze (která z kondenzuje v zásobníku V) od kapalně fáze, protékající jímkou L. Obě fáze se znovu spojí ve směšovači D a vrací se do vařáku. Z kontejnerů V a L se odebírají vzorky pro stanovení složení. Lze ukázat, že za ustáleného stavu systému odpovídají složení v těchto kontejnerech právě složení kapalně a parní fáze v rovnováze. Tento přístroj je v dané třídě nejlepší a dá se s ním velmi přesně měřit za normálních a snížených tlaků v poměrně širokém rozsahu podmínek. Dobře nám slouží dodnes.



Obr. 3. Generický Dvořákův–Boublíkův recirkulační rovnovážný přístroj (schéma a reál).

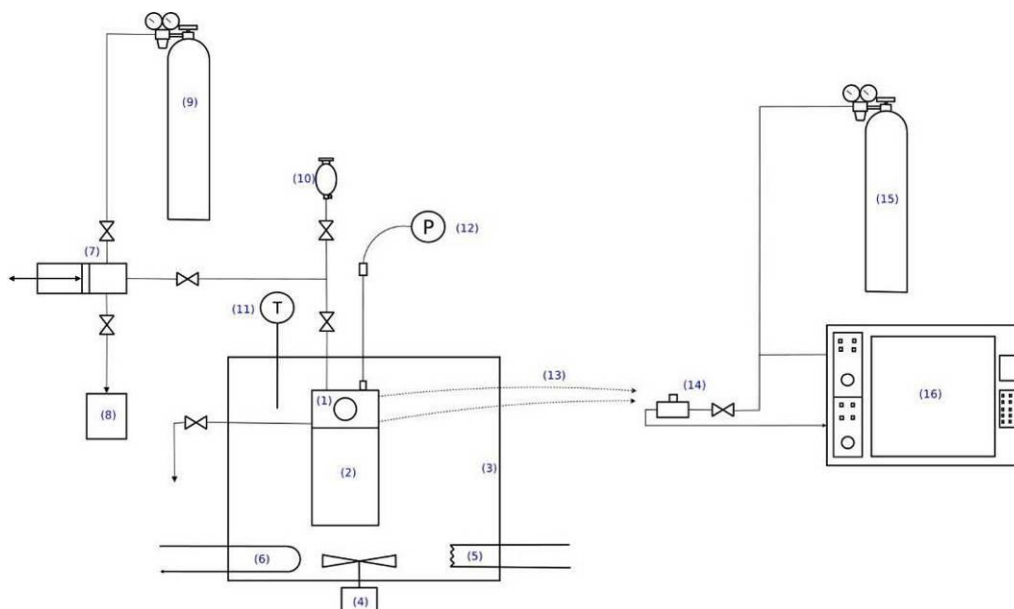
Léta sedmdesátá

Po diplomce u T. Boublíka jsem nastoupil do LCHT jako Hálův aspirant v r. 1971. Ivan Wichterle strávil část let 1969 a 1970 v Americe (u Rikiho Kobayashiho na Rice University v Houstonu), kde měřil rovnováhy za vysokých tlaků v systémech lehkých uhlovodíků. Po jistou dobu jsem ho tudíž znal jen z květnaté korespondence, kterou nám předčítal profesor Hála, a ve které Ivan posílal experimentální rady aspirantovi Jiřímu Vejrostovi.

Po svém návratu Ivan Wichterle metodiku vysokotlakých měření fázových rovnováh zavedl v LCHT. Ústřední součástí této experimentální techniky je statická rovnovážná cela, zespodu uchycená na montážní desce. Do cely, která musí být trvale těsná i při opakovaných změnách teploty a tlaku, se vpravují v přiměřeném režimu látky tvořící studovaný systém. Ten je nutné uvést do rovnovážného stavu, tj. po jistou dobu termostatovat do konstantní hodnoty tlaku systému při míchání magnetickým míchadlem. Poté se odečte teplota (ideálně s čidlem umístěným co nejbližší cely nebo přímo v ní) a tlak (zařízením, které je připojené přímo k cele nebo přes vhodný tlakový převodník) a stanoví se složení. Za vysokých tlaků je v dané metodě nutné vždy stanovit složení obou (resp. všech) přítomných fází, což se dělalo unikátní technikou odebrání vzorků pro analýzu s využitím měděných kapilár a (pokud možno) chromatograficky s využitím různých detektorů. Tyto kapiláry od průměru 0.3 mm byl skvělý nápad S. Wičara (druhdy externího Hálůva aspiranta) z brněnského ÚIACH a taháme si je dosud sami šperkařskou průvlastkovou destičkou z komerčních trubiček pro chladničky. Charakteristický pro celé uspořádání je tzv. Riki-box, kapalinový termostat se zvedacím mechanismem založeným na principu rumpálu se dvěma kladkami. Schéma je na Obr. 4.

Na různých variantách (lišících se zejména typem konstrukce rovnovážné cely) uvedené vysokotlaké aparatury pracovala celá řada lidí, počínaje aspiranty Jiřím Vejrostou a Jardou Mikšovským. Jiří Vejrosta byl zemité Moravák z Poštorné, po dokončení aspirantury přešel do Brna do Ústavu analytické chemie, kde dlouhá léta vedl velmi úspěšnou skupinu superkritických extrakcí. Byla s ním dost legrace, byl hodně požitkář a hodně choleric; Ivo

Nezbeda by mohl vyprávět o střetnutích s ním na fotbalovém trávníku ústavu. Bohužel, Jiří Vejrosta – pro všechny velmi nečekaně – zemřel v r. 2001 ve věku 56 let. Nejsem si jist, kde přesně po skončení aspirantury skončil Jarda Mikšovský, po čase se vynořil jako firemní obchodní zástupce, každopádně mimo obor a mimo výzkum vůbec.



Obr. 4. Schéma statické aparatury pro měření za vysokých tlaků.

(1) Vizuální rovnovážná cela, (2) pohon magnetického míchadla, (3) termostatovací lázeň, (4) míchadlo lázně, (5) topení, (6) chlazení, (7) vysokotlaká pumpa, (8) vakuová pumpa, (9) tlaková nádoba s těžavější složkou, (10) nádoba s méně těžavou složkou, (11) teploměr, (12) tlakoměr, (13) vzorkovací kapiláry, (14) homogenizátor vzorku, (15) tlaková nádoba s nosným plynem, (16) plynový chromatograf.

Jak vypadala sestava LCHT v r. 1973 ukazují následující dobové fotografie na Obr. 5.

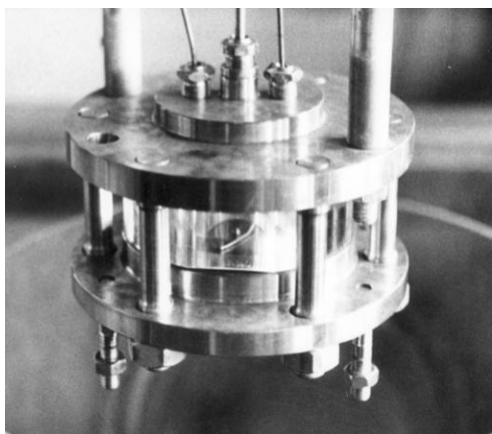


Obr. 5. Na levém obrázku zleva Ivan Wichterle, Karel Procházka, Karel Hlavatý, Jaroslav Mikšovský, Karel Aim, Jan Linek, Tomáš Boublík a Eduard Hála, sedící Jaroslava Polednová; na pravém obrázku sedící uprostřed Jiří Vejrosta.

Dalšími lidmi, kteří se zmíněnou vysokotlakou aparaturou pracovali, byli (vedle několika diplomantů) Jiří Drahoš, Vláďa Lhoták, Petr Uchytíl a Zdeněk Wagner. Vláďa Lhoták (z pochopitelných důvodů přezdívaný Kamil) byl mladý schopný kolega, kterého pamatují jen ti starší. Po skončení aspirantury po jistou dobu působil na Ústavu molekulární genetiky a uprostřed osmdesátých let s celou rodinou (manželkou Šárkou, která rovněž pracovala na ÚTZCHT, a dvěma dětmi) emigroval Kanady, kde se ale, pokud vím, ve výzkumu příliš neprosadil. Zmínku zasluhuje i svérázný Luboš Kasztura (zvaný Hužvara), který se rozhodl vyprojektovat a postavit superdokonalou experimentální stanici včetně plynového chromatografu vlastní konstrukce, která nikdy nebyla dokončena právě pro tu svoji supernáročnost.

První typy vizuálních vysokotlakých cel byly konstruovány ze skleněných či křemenných mezikruží (viz Obr. 6) resp. silnostěnných trubíc s vybroušenými plochami kolmými na osu, sevřených mezi nerezovými přírubami. Vláďovi Lhotákovi jednou taková cela při testování explodovala (naštěstí za situace, kdy se nikomu nic nestalo a ani nedošlo k významné škodě), což nám dovolilo nahlédnout, v jakém jsme byli po léta nebezpečí. Po jisté době, kdy se bezpečnějšího provozu těchto cel dosahovalo použitím ochranného krytu, se pak přešlo na modely jiné.

Byvše zaštitěni profesorem Hálou, čas od času se podařilo uskutečnit nákup i nějakého v té době špičkového experimentálního zařízení. Jedním z takových zařízení byla tlaková váha firmy RUSKA, používaná jako standard pro přesné měření vysokých tlaků a kalibraci tlakoměrů. Na Obr. 7 vidíte Jirku Drahoše coby aspiranta, který tehdy s Vláďou Lhotákem tento přístroj uváděl do provozu.



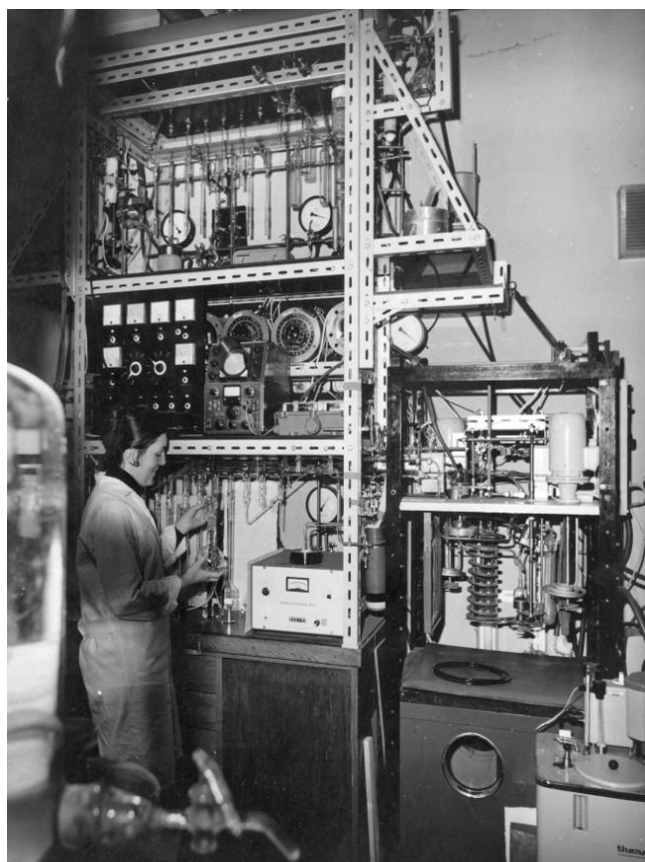
Obr. 6. Jeden z prvních modelů vysokotlaké rovnovážné cely.



Obr. 7. Aspirant J. Drahoš obsluhuje tlakovou váhu RUSKA

Další linií experimentální práce byl návrh, zkonstruování a ověření aparatury pro měření rovnováh kapalina pára za normálních a nízkých tlaků statickou metodou. To byl předmět mé aspirantury a dizertace a vlastně kus mého života. Aparaturu se mi (po jistých peripetiích, mj. i ročním přerušení vojenskou službou) ze stadia „na zelené louce“ podařilo dostavit, uvést do chodu a v mezích možností jsme tehdy vyšetřili vše, čeho je možné touto metodou v praxi reálně dosáhnout. Hlavním cílem bylo mít techniku, která je vhodná i pro měření rovnováh kapalina–pára v soustavách, kde se složky velmi liší relativní těkavostí (což není možné v Boublíkově–Dvořákově přístroji). Princip je sice velmi jednoduchý a stejný jako u vysokotlaké statické cely, realizace pak dokonce jednodušší v tom, že není nutné analyzovat složení obou fází – za nízkých tlaků je množství látek v parní fázi relativně tak nízké, že složení obou fází lze přesně spočítat z celkového složení rovnovážné směsi v cele.

První velká komplikace metody ale spočívá v tom, že když se pracuje za nízkých tlaků, vadí přítomnost jakýchkoli těkavějších příměsí či plynů. Použité látky se proto musí dokonale odplynit, přičemž odplynění těkavých látek (bez jejich velkých ztrát) je opravdový problém; otestování různých metod vedoucích k žádanému cíli tehdy stálo hodně času, ale nakonec



vedlo k návrhu originální, relativně jednoduché odplyňovací techniky. Tehdy se tím problémem zabývala ve světě řada lidí, nezávisle pak souběžně publikovali fungující metodu Van Ness a spol. Jsem však přesvědčen o tom, že ta naše zůstala nejlepší. Druhá velká komplikace metody pak spočívá v tom, že přesně známá množství odplyněných složek je nutné převést do rovnovážné cely bez kontaminace „zaplyněním“. To bylo řešeno dosti pracnou technikou s využitím vážených skleněných ampulí. Výslednou aparaturou však nakonec bylo možné dosáhnout velmi přesných dat, s koncentracemi stanovenými vážením a tlakem a teplotou měřenými přístroji „na úrovni doby“ (přičemž teplotní toluenový kontaktní regulátor dovozoval držet teplotu lázně konstantní téměř na 0.001 K). To, že aparatura opravdu nebyla jednoduchá, dokládá Obr. 8.

Obr. 8. Část aparatury pro měření fázových rovnováh kapalina–pára za normálních a nízkých tlaků statickou metodou (před dávkovací linkou se skleněnými ampulemi S. Bernatová; skleněná rovnovážná cela nad spuštěným Riki-boxem; nahoře linka pro odplyňování těkavých kapalin).

Naprosto nezbytným spolupracovníkem byl geniální sklář pan Černý (původem Maďar odpovídajícího příjmení, Fekete), který byl zároveň i trpělivým učitelem základů svého řemesla, a který mne tehdy dovedl – pokud šlo o rutinní sklářské operace na inkriminované aparatuře – téměř k úplné soběstačnosti. Pan Černý k nám chodil coby externista z Máchovky jednou týdně a vždy byl schopen udělat úplně všechno, co jsme si vymysleli. My jsme ho zpravidla obstoupili, pozorovali jsme, jak se zázračně rodí to a ono, nechávali si vysvětlit postupy a figle a pak jsme si různé operace sami zkoušeli; naučili jsme se sklářskému řemeslu alespoň do té míry, co jsme potřebovali ke zhotovení konstrukčních částí a běžným úpravám či opravám skleněných přístrojů. Umění pana Černého je dodnes přítomno ve všech variantách rovnovážných přístrojů a ebulliometrů, které máme v laboratoři. Nejsem si jist, kolik dnešních sklářů by takové věci svedlo.

Charakterizace fázových rovnováh za nízkých tlaků (založená na modelech pro dodatkovou Gibbsovu funkci, resp. aktivitní koeficienty) se v sedmdesátých letech nesla v širokém používání Redlichova–Kisterova rozvoje, Wilsonovy rovnice (z r. 1964) a modelu NRTL (non-random-two liquid) odvozeného Henrim Renonem v rámci disertace u Johna M. Prausnitze v Berkeley (1968) a v jejich různých modifikacích. U Prausnitze se rozpracovával model lokálního složení, což dále vedlo k odvození rovnice UNIQUAC – universal quasi-chemical – (Maurer a JMP, 1972) a v roce 1974 pak k odvození předpovědního modelu

založeného na příspěvcích funkčních skupin UNIFAC – universal functional activity coefficient – (Fredenslund, Jones a JMP, 1975). Všechny zmíněné modely jsou používány dodnes (byť řada lidí ví, že uvedený základní model není na molekulární úrovni úplně konsistentní), jednoduše proto, že docela dobře fungují.

Metoda UNIFAC se ukázala být opravdovým průlomem. Je to v podstatě generická metoda, která dovoluje vypočítat aktivní koeficienty ze skupinových příspěvků funkčních skupin. Pohlíží tak na kapalnou fázi jako na roztok funkčních skupin, což znamená velký pokrok a obrovské zjednodušení, protože se vystačí s maticí interakčních příspěvků pro funkční skupiny, ze kterých je možné konstituovat vlastně téměř všechny látky. Samozřejmě pro některé typy látek (jednodušší, bez specifických interakcí) metoda fuguje docela dobře, pro některé systémy (např. asociující či solvatující) metoda funguje hůře či selhává. Každopádně došla širokého použití jak pro první odhad reálného chování systémů (pro různé účely využití včetně průmyslového), tak i jako jistý „benchmark“ pro porovnávání predikční úspěšnosti nadále vyvíjených předpovědních metod.

Hlavní autor tohoto veleúspěšného modelu Aage Fredenslund (v r. 1974 postdoc v Berkeley) se stal profesorem a vedoucím Dep. Chem. Eng. na Dánské technické univerzitě v Lyngby. Velmi si vážil E. Hály a v r. 1975 (při účasti na kongresu CHISA) navštívil LCHT. Při té příležitosti byla domluvena spolupráce a mj. i stáže Vlastimila Růžičky a moje v Lyngby.

S rozvojem metod pro experimentální stanovení fázových rovnováh za vysokých tlaků došlo i k rozvoji využití stavových rovnic. Pro praktické použití šlo v drtivé většině o stavové rovnice kubické, odvozené z Redlichovy–Kwongovy rovnice (semi) empirickými úpravami, které dovolily vystihnout i chování kapalně fáze, a tudíž i popis vysokotlaké fázové rovnováhy. Nejúspěšnějšími takovými rovnicemi byly úpravy Redlich–Kwong–Soave (1974) a Peng–Robinson (1976). Různé modifikace se v úhrnu počítaly na stovky, přičemž jejich velká část byla věnována úpravám pravidel pro výpočet směsných parametrů rovnic. Novou ideou na konci této dekády bylo zapojení výrazů pro Gibbsovu dodatkovou funkci do směšovacích pravidel (např. Huron a Vidal, 1978). Tímto propojením byla otevřena možnost využití předpovědní schopnosti metody UNIFAC (a podobných modelů) i pro soustavy za vysokých tlaků.

Jedním z významných efektů vývoje předpovědních příspěvkových metod bylo, že dovolily výrazné úspory a zefektivnění „celosvětové politiky“ v oboru měření fázových rovnováh. Postupem doby vešlo dobře ve známost, které typy interakcí funkčních skupin jsou již dostatečně prozkoumány a ověřeny, takže fungují dobře, a naopak, které části příslušné matice parametrů jsou prozkoumány nedostatečně, a kde to dosud nefunguje. To samozřejmě dovoluje experimentátorům, aby se systematicky soustředili na proměření soustav, které dovolí odhadnout, resp. lépe experimentálně podložit hodnoty interakčních parametrů funkčních skupin, pro které potřebné parametry chybí. I my po dlouhá léta používáme jako argument pro ospravedlnění některých experimentálních aktivit to, že vlastně systematicky doplňujeme tabulky potřebných parametrů předpovědních metod, což lze těžko zpochybnit.

Na počátku 70-tých let byla odvozena přesná stavová rovnice modelové tekutiny tuhých koulí (Carnahan–Starling) a celá dekáda se pak nesla ve znamení studia stavového chování tuhých těles a jejich směsí. Tomáš Boublík odvodil (nezávisle na týmu Aliho Mansooriho, který dospěl k témuž) stavovou rovnici pro směs tuhých koulí, spolu s I. Nezbedou realizovali úspěšně jako první ve střední a východní Evropě molekulární počítačové simulace tekutin tuhých těles a ve spolupráci s J. Pavlíčkem odvodili stavové rovnice pro tuhá konvexní tělesa a jejich směsi. Dlužno poznamenat, že v našem lokálním slangu byla statistická termodynamika označována jako „défilambda“, prostě proto, že proměnné „ $d-\phi-\lambda$ “ se v daném oboru zhusta vyskytují. Ke konci této dekády došlo k rozvoji poruchových teorií (Barker–Henderson, Weeks–Chandler–Andersen). „Défilandácká“ část naší laboratoře se do

tohoto trendu velmi pohotově zapojila. Ivo Nezbeda a Bill Smith přišli s teorií RAM (Reference-Average-Mayer).

Sedmdesátá léta se vyznačovala tím, že jsme vyvíjeli i různé společné mimopracovní aktivity, které by z dnešního pohledu byly patrně označeny jako „team building“. Každá komunita v té době žila trochu sama pro sebe a našla si své rituály a způsoby, jak si život zpestřit. My jsme tehdy pravidelně provozovali jogging a vybíhali i několikrát týdně po různých trasách do Roztockého háje, nejdále až na Levý Hradec. O těchto „výběžích“ se vedly podrobné záznamy, které máme dodnes. Občas jsme si také hromadně zašli na stadion nebo do bazénu VŠZ porovnat fyzickou kondici s tehdy publikovanými doporučenými tabulkami.

Konaly se rovněž „polední šachy“ (nazývané „šáhlo“), téměř každý druhý den jsme s Ivem Nezbedou sehráli 3 bleskové partie na 2krát 5 minut. I výsledky těchto soubojů jsme podrobně zaznamenávali a sešitek se skóre mnoha set partií rovněž dodnes uchováváme. Seděli jsme tehdy ve dvou propojených místnostech v suterénu tam, kde je dnes NMR, a profesor Hála se na tato klání dosti často přišel podívat. Na ostatní naše mimopracovní činnosti (v jeho očích jistě infantilní) pohlížel se shovívavostí a nadhledem. Pokud však šlo o šachy, byla věc vážnější – zpravidla nám „kibicoval“ a občas projevil přání si zahrát. Pak obvykle vyvstal problém, protože – upřímně řečeno – Hála nehrál šachy nijak zvlášť dobře, ale hrozně nerad prohrával. Takže se zpravidla hrálo docela dlouho a abychom se vůbec mohli vrátit k práci, musel někdo Hálu nechat vyhrát.

Vedli jsme průběžně také kroniku, kde se zaznamenávaly různé dobové pozoruhodnosti, postřehy a hlavně příhody z konferencí. Udržovali jsme také sešit s evidencí dobrých skutků a žlutých karet (napomenutí za prohřešky) jednotlivých lidí. Ivan Wichterle má tyto archiválie v šuplíku. Když je člověku smutno, stačí se do těchto dobových svědectví podívat a hned je veseleji.

Nejpilnějším glosátorem oné epochy byl Karel Hlavatý, který si psal téměř denně své zážitky osobitým stylem do malých notýsků zvaných „Zápisky konfidenta“. Těch notýsků popsal pět, šestý už jen načal. K ukončení série vedla význačná událost, popsaná v poslední části sešitku pátého. Byla to akce „Parník“, kterou 6. června 1974 pořádala místní organizace SSM (Socialistického svazu mládeže). Výletní plavby s jídlem, pitím i tancem na parníku po Vltavě směrem k Davli se zúčastnil téměř celý ústav i několik lidí z dalších ústavů Akademie věd. Na zpáteční cestě se na nějaký čas zakotvilo pod „Mostem Inteligence“ a opékaly se tam buřty. U ohně došlo k incidentu mezi Karlem Hlavatým a exponentem KSČ Mikušíkem z Ústavu fyzikální chemie. Mikušík následně K. Hlavatého udal, což ve výsledku vedlo k tomu, že kolega Hlavatý musel odejít z ústavu. Událost pak měla významný důsledek i pro mne: Hálovi se podařilo místo po Karlu Hlavatém pro naši laboratoř uhájit a dostal jsem ho já. V tehdejších poměrech (byl monohaletý „stop stav“) bych jinak asi šanci vůbec neměl.

Léta osmdesátá

Na počátku dekády vyšly dvě knížky – T. Boublík, I. Nezbeda a K. Hlavatý: *Statistical Thermodynamics of Simple Liquids* (1980), zaměřená na matematický aparát oboru, a druhá E. Hála, K. Aim, T. Boublík, J. Linek a I. Wichterle: *Rovnováha kapalina–pára za normálních a nízkých tlaků* (1982), ve které byl aktualizován přístup „aktivitní + fugacitní koeficient“ pro výpočty fázových rovnováh a byla zavedena metoda maximální věrohodnosti pro odhad parametrů modelů.

Kulminovaly snahy o vylepšení metody UNIFAC. Vznikly a dále byly rozvíjeny dvě verze s teplotními závislostmi parametrů – modifikovaný UNIFAC Dortmundský (Gmehling a spol.) a modifikovaný UNIFAC Lyngbyský (Fredenslund a spol.). Další snahou bylo zavedení asociačních a solvatačních parametrů s cílem vytvořit model (nazývaný SUPERFAC) pro současnou předpověď rovnováh kapalina–kapalina a kapalina–pára. Tento

model se stal na čas mým osudem poté, co se mi po 6 letech (Hállova i mého) snažení podařilo v r. 1981 vycestovat na 9 měsíců do Lyngby na DTU k Fredenslundovi. Celou tu dobu jsme se snažili SUPERFAC dotáhnout, ale s odstupem času je nutno přiznat, že to bylo ohledávání slepé uličky. Model sice fungoval velmi dobře pro dvousložkové soustavy a byl schopen popsat zároveň rovnováhu kapalina–pára, rovnováhu kapalina–kapalina a občas i směšovací enthalpie, ale nepodařilo se ho rozumně rozšířit na vícesložkové systémy.



Do vysokotlakého experimentování se zapojil Zdeněk Wagner. Rovnovážná cela pro vysokotlaká měření fázových rovnováh výrazně změnila podobu. Skleněné těleso bylo nahrazeno robustní konstrukcí z nerezů a vizuální sledování obsahu cely umožňuje jen malé průhledové okénko. Objem 65 cm^3 , max. tlak 10 MPa, max. teplota $100 \text{ }^\circ\text{C}$.

Obr. 9. Vysokotlaká rovnovážná cela bezpečného typu

V osmdesátých letech jsme se začali systematictěji zabývat stavovými rovnicemi pro reálné látky, založenými na teoretických základech. Vycházelo se z poruchové teorie s využitím jednodušších potenciálů mezimolekulárních interakcí. Stavové rovnice typu „augmented van der Waals“ se už začaly pro výpočty stavového chování, ale i fázových rovnováh (metodou „fugacitní + fugacitní koeficient“) reálných látek šířeji používat. Širokého uplatnění při konstrukci tohoto typu stavových rovnic došly pro vyjádření jejich referenční části stavové rovnice tekutin tuhých těles odvozené v naší laboratoři (a jsou celosvětově používány dodnes). Podrobněji jsme se zabývali chováním jednotlivých členů stavové rovnice, a to jak ve srovnání s pseudoexperimentálními daty molekulárních počítačových simulací, tak i ve srovnání přímo s chováním reálných látek.

V roce 1983 Ivo Nezbeda uspořádal v Liblicích první konferenci o statistické mechanice kapalin. Založil tak tradici velmi úspěšné (ne-li nyní vůbec nejlepší) konference v tomto oboru. Od druhé konference uvedené řady putuje toto setkání po českých krajích se čtyřletou periodou. Jméno „Liblická“ jí zůstalo, do Liblic se ale už nikdy nevrátila.



Obr. 10. Takto jsme vypadali v osmdesátých letech

Dále se rozvíjely metodiky molekulárních simulací Monte Carlo a molekulární dynamiky. Ivo Nezbeda začal s Billem Smithem pracovat na primitivních modelech pro asociující kapaliny. Do skupiny v té době nastoupili Jiří Kolafa (Nezbedův aspirant) a Bohouš

Tříška (Boublíkův aspirant). Zajímavé bylo, že při prvním přijímacím pohovoru si Jiří Kolafa nějak neporozuměl s Hálou a neuspěl. Posléze se však z něj stal počítačový a simulační guru a byl velkým přínosem. (Je škoda, že s námi nezůstal; dal před lety přednost pedagogice v Ústavu fyzikální chemie na VŠCHT.)

Konec osmdesátých let byl pro nás smutný. Po třítydenní nemoci zemřel koncem srpna 1989 profesor Hála, což byl pro nás šok a pocit osiření, který jsme dosud neznali.

Léta devadesátá a nultá

Došlo ke znovuspojení obou skupin, které po jistou dobu fungovaly jako dva nezávislé útvary (jeden vedený E. Hálou, druhý vedený T. Boublíkem). Na doporučení profesora Jakoba de Swaan Aronse (v r. 1991) laboratoř přijala jméno Termodynamická laboratoř E. Hály (TLEH). Posílili nás Martin Strnad (absolvent MFF UK, aspiranturu dělal u Roberta Ponce) a zejména Martin Lísal (absolvent fakulty strojní ČVUT) v r. 1996, poté, co přes dva roky strávil v Japonsku.

Počátek devadesátých let byl ve znamení studia soustav, jejichž molekuly integrují prostřednictvím Lennard–Jonesova potenciálu. Jedním z vyústění této práce byla přesná stavová rovnice pro Lennard–Jonesovskou tekutinu (Kolafa a Nezbeda, 1994). Dalším důležitým počinem bylo odvození metody reakčního souboru („reaction ensemble method“) pro počítačové simulace chemických a fázových rovnováh (Smith a Tříška, 1994), což je průlomová a vysoce citovaná práce. Rozvíjena byla poruchová teorie pro anisotropní molekuly s využitím Kiharova potenciálu. Molekulární počítačové simulace postoupily do fáze aplikací pro realistické potenciály a „reálné látky“. Ivo Nezbeda a spol. se začli věnovat teoriím pro vodu a další asociující tekutiny a práci na stavových rovnicích další generace, s použitím primitivních modelů asociace pro formulování referenčního členu. Martin Lísal se úspěšně soustředil na pokročilé metody počítačových simulací (např. pro reagující systémy).



Obr. 11. TLEH na prahu nového tisíciletí

Zleva: J. Slovák, K. Aim, Z. Wagner, M. Předota, I. Nezbeda, M. Strnad, S. Bernatová, J. Linek, J. Kolafa, I. Wichterle, Š. Psutka, M. Lísal

Obsazení TLEH na přelomu devadesátých a nultých let ilustruje foto na Obr. 11. Od té doby Jirka Kolafa přešel na VŠCHT, technik Štěpán Psutka odešel v r. 2007, Martin Strnad bohužel tragicky zahynul na horolezecké výpravě v Alpách. Honza Slovák odešel, tuším, v roce 2003. Milan Předota, další bývalý doktorand Ivo Nezbedy, strávil přes 3 roky v Americe, teď je na Jihočeské univerzitě, ale u nás stále má úvazek a společné granty s Ivem Nezbedou a Martinem Lísalem.

V nultých letech došlo i k jisté renesanci experimentálních aktivit. Přišla Lenka Morávková a zabývá se densimetrickými měřeními kapalin a kapalných směsí za normálních a zvýšených tlaků. Můj doktorand Babič oživil vysokotlaké experimenty a proměřil soustavy alkanolů s oxidem uhličitým. Za normálních tlaků byly pro sérii soustav studovány fázové rovnováhy v kombinaci s esterifikační či transesterifikační reakcí. Z VŠCHT k nám nastoupila Magdalena Bendová, která si s sebou přinesla problematiku experimentálního studia rovnováh v systémech s iontovými kapalinami a uvedla do provozu zákalovou i objemovou metodu pro stanovení rovnováh kapalina–kapalina.

Mezinárodní spolupráce

Lze stručně zmínit jen ta nejdůležitější jména zahraničních partnerů. Patrně daleko nejvýznamnější byla a stále je spolupráce s již zmiňovaným Williamem R. (Billem) Smithem, původně vedoucím Katedry matematiky na Univerzitě v Guelphu, Ontario. Spolupráce s Billem se datuje od roku 1977, kdy se s ním Ivo Nezbeda náhodou potkal na Rice University v Houstonu a spřátelili se. Od té doby spolu (a zpravidla s dalšími spoluautory z Česka) napsali asi 40 článků. Bill občas do Česka přijížděl, postupně se seznámil s celou naší scénou v oboru statistické termodynamiky a snad všichni kolegové z tohoto oboru u něj absolvovali (mnozí opakovaně) delší pracovní pobyty. Před několika lety se stal zakládajícím děkanem nově budované University of Ontario Institute of Technology v Oshawě. V r. 2008 slavil 65. narozeniny a při této příležitosti vydal Collection zvláštní číslo, protože Bill pro českou vědeckou komunitu udělal opravdu velmi mnoho.

Zásluhy širšího dosahu měl i Aage Fredenslund z Dánské technické university v Lyngby, kde vedl Dept. Chem. Eng., což bylo po dlouhá léta v našem oboru jedno z nejlepších evropských pracovišť. Kromě mne měli příležitost pracovat u něho delší dobu i Vlastimil Růžička, Tomáš Míšek, Zdeněk Wagner a další. Bohužel, Aageho jsme tady viděli naposledy na CHISE v roce 1994, zemřel v listopadu 1995.

Yura Kalyuzhnyj a Andrij Trokhymchuk, původem z Ústavu teoretické fyziky ze Lvova na Ukrajině, jsou další Nezbedovi spolupracovníci, kteří u nás mnohokrát hostovali. Mezi dlouhodobé spolupracovníky v kategorii „ $d-\phi-\lambda$ “ patří také Horst Vörtler z Lipska a Johann Fischer z University v Bochumi, nyní již přes 10 let na Universität für Bodenkultur Wien.

V oblasti molekulárních počítačových simulací probíhala v posledních letech intenzivní spolupráce se skupinou Alaina Fuchse (Université Paris-Sud, Orsay), zejména s jeho kolegy Bernardem Rousseauem a Philipem Ungererem z Institut Francais du Petrole.

Maurizio Fermeglia je skvělý kamarád z University v Terstu, se kterým jsem sdílel místnost v Dánsku a pracovali jsme spolu na inkriminovaném modelu SUPERFAC. V Terstu jsem jim pak pomáhal se zavedením experimentálního programu měření za vysokých tlaků. Dnes jsou Maurizio s Martinem Lísalem partnery v již končícím projektu 6. Rámcového programu MULTIPRO.

Henry V. Kehiaian byl zajímavou a charizmatickou osobností. Po rodičích byl snad turecko-arménskému původu, narozen v Rumunsku. V šestnácti letech přešel do Polska, kde působil na Polské akademii věd, a kde se oženil. Pak emigroval, strávil nějakou dobu v Americe a zakotvil v Paříži. Jeho životem byla práce s termodynamickými daty, byl velmi činný v IUPAC a CODATA, mluvil plyně mnoha jazyky. Pracovní styky jsme s ním měli od počátku osmdesátých let, posledních asi 15 let byl hlavním spolupracovníkem Ivana Wichterleho a spol. při završení jejich dlouhodobé systematické práce s vydáváním bibliografie rovnováh kapalina–pára. Tato bibliografie měla počátek už v Hálově monografii z 50. let a byla průběžnou aktivitou až do ukončení před třemi roky. H. Kehiaian ve zmíněné fázi velmi přispěl co do metodiky, up-to-date softwarového řešení a marketingu. (Henry bohužel zemřel před vánoce 2009.)

Bylo by možno uvést mnohé další, zmíním ale už jen Petera T. Cumingse (původně z University Tennessee, Knoxville, nyní Oak Ridge National Laboratory a Vanderbilt University), který je dnes jednou z největších autorit a u něhož dlouhodobě pobýli Ivo Nezbeda, Milan Předota a Lukáš Vlček.

Budoucnost

V budoucnosti bude samozřejmě záležet na tom, jak se bude vyvíjet prostředí a jak se bude vyvíjet bádání. O perspektivní směry výzkumu jak v experimentální termodynamice, tak i v teoretické statistické termodynamice a molekulárních simulačních výpočtech, nouze nebude. Otázkou je, na co budeme stačit a v jakém personálním obsazení. Když odečtu naši starší generaci, tak mi z toho vychází, že zanedlouho teoretická část zůstane na bedrech Martina Lísala a Saši Malijevského, zatímco experimentální část převezmou „mladé dámy“ Magdalena Bendová s nedávnou posilou Zuzanou Sedlákovou, za podpory Zdeňka Wagnera. Ještě jim nějakou dobu pomůžeme a pak už jim jen budeme držet palce ...

Karel Aim



Obr. 12. TLEH v prosinci 2009

Výpočetní zázemí ústavu

S datem založení ústavu přibližně souhlasí začátek běžnějšího používání elektronických počítačů; ty byly u nás do té doby vyhrazeny jen matematickým specialistům, protože jejich zkrocení bylo velmi pracné a jejich programování ještě pracnější. Z těchto důvodů byl proto velmi záslužný počín průkopníka československého chemického inženýrství, ing. Jana Marka, CSc. z Chemoprojektu, který v r. 1962 zorganizoval jeden z prvních kursů programování v “autokódu”. Šlo o jazyk, který měl šanci stát se opravdovou pomůckou a ne jen přítěží (přestože složité výrazy se stále ještě musely rozepisovat na jednotlivé matematické úkony.) Před érou autokódu se programování dělalo pomocí příkazů ve dvojkové či osmičkové soustavě. Do tohoto kursu mne – coby aspiranta – přihlásil prof. Eduard Hála, aniž měl jasnou představu, k čemu že to může být dobré, ale budoucí vývoj jen potvrdil jeho obvykle všestrannou intuici.

Ke skutečné praxi pak zakrátko došlo na počítači **Sirius** (Výzkumný ústav hutnictví železa, dvě zastávky za Balabenkou, tj. bez metra v ukrutné dálce), kde jsem se též poprvé setkal s Pavlem Mitschkou a Petrem Schneiderem, kteří tam také začínali své kroky v numerickém experimentování. Byl to úžasný a docela nový svět: programy se psaly v poněkud zjednodušenější modifikaci autokódu, přepisovaly na dálnopisech Creed do pětistopé papírové děrné pásky, a pak četly snímacím zařízením. Výsledky tehdy neuvěřitelně komplikovaných a dosud těžko proveditelných výpočtů (např. nelineární regrese) zdánlivě bleskově vycházely přes rychloděrovač pásky Facit (pár set znaků/s), a vyděrované pásky výsledků se pak musely přečíst a vypsát na dálnopise. Facit byl opravdu špičkový přístroj, jehož činnost (tj. “vrtání dírek”, jak jsme říkali) ohodnotil prof. Hála přivedený na exkurzi, profesionálním povzdechem fyzikálního chemika, že “entropie se tady z toho jen valí“. Zařízení byla umístěna asi na dvaceti čtverečních metrech a každý si musel sám všechno poměrně složitě obsluhovat.

V r. 1965 pak byly připraveny projekční podklady pro výstavbu a zřízení výpočetního střediska v ústavu, který měl být osazen sovětským počítačem Minsk-22. Nic z toho se však nerealizovalo, zřejmě pro chronický nedostatek Minsků.

Další, pro nás znamenité zlepšení podmínek znamenal návrat do Chemoprojektu na **National Elliott 803B** (anglický počítač vyráběný od r. 1961). Zpočátku byl umístěný na Ministerstvu chemického průmyslu ve Štěpánské ul. v sále, jehož “tapety” byly tvořeny zbytky elektronkového URALu-1. Ten však podle tamních techniků nikdy nefungoval (údajně museli každý den donést nůši nových skleněných elektronek k výměně a gumovou paličkou zlepšovat kontakty ostatních). Elliott měl 4 kB RAM (to není chyba, opravdu čti: čtyři kilobajty), pracoval stejnou technologií jako Sirius, ale technicky byl lepší. Sem již začínalo docházet stále více lidí z ústavu, úměrně tomu, jak výhody výpočetní techniky pronikaly do povědomí odborné veřejnosti. Stále bylo ale nutné si objednávat omezený strojový čas týden předem. Zakrátko se objevila i první řádková rychlotiskárna Analex, čímž odpadla zhruba polovina manipulací s papírovou děrnou páskou a snížilo se tak riziko jejího přetrhávání (velmi častého). Slepování pásek a ruční vykrajování dírek tzv. děrovátkem byl vůbec náš denní chlebiček. Velkou pomocí proto bylo, když si ústav pronajal od pošty dálnopisný stroj a umístil do místnůstky řidičů za dílnami, kde se daly poškozené pásky nejen kopírovat ale i opravovat. Chemoprojekt však koncem šedesátých let vyměnil Elliott za děrnoštítkový **IBM**, a tak jsme my – zvyklí na děrné pásky – hledali náhradní možnosti.

To se zase už mnohde pracovalo jen s osmistopými páskami, což byla pro nás další komplikace. Např. na nevídaný dánský stolní počítač **GIER** do Řeže jsme jezdili, jak se dalo: někdy vlakem ze Sedlece, jindy nás odvezl pan Nežerka ústavním autem do Podmoráně, odkud se muselo jít asi kilometr mezi Vltavou a železnicí po pěšince vydatně zarostlé

kopřivami. Programy se již psaly v tehdy moderním Algolu, který umožnil snadné programování logiky, o složitějších matematických výrazech nemluvě.

Další dostupnou početní stanicí byl **Minsk** na “hnojárně“ v Suchdole. Jeho nespornou výhodou byla krátká vzdálenost od ústavu a poměrně vysoká odolnost, protože počítač byl zřejmě konstruován na sibiřské podmínky. Klimatizace, bez níž dosud žádný z počítačů nefungoval, se provozovala tak, že když bylo na sále moc teplo, tak se jednoduše vyvětralo. Jeden z problémů bylo formální vzezření výsledků, neboť rychlotiskárna používala roli běžného balicího papíru bez vodící perforace, takže řádky zpravidla neměly konstantní rozteče. Naproti tomu uměla azbuku, čehož se dalo využívat k produkci legračních textů zejména po r. 1968. Jiná tiskárna uměla zase produkovat jen uzoučkou telegrafní pásku, tak jak ji můžete vidět v Menzelových Ostře sledovaných vlacích. Zkrátka: pokrok.

Rok 1970 byl pro ústav přelomový – na zelené louce se začalo stavět naše vlastní výpočetní středisko (dnes v té budově sídlí Technologické centrum). Při tom jsme už docházeli do PVT v Karlíně, pomalu si zvykat na děrnoštítkový systém. Nové středisko bylo osazeno počítačem **TESLA-200**, naštěstí pro nás postaveného ještě z licenčních francouzských součástek; byl to velký sálový počítač (na ploše 100 m²) s děrnoštítkovým vstupem, magnetopáskovými jednotkami, velmi kvalitní tiskárnou a 128 kB RAM. Projekt výpočetního střediska odpovídal dobovým zvyklostem: ve dvou podlažích byli kromě vedení centra (ing. Vladimír Horyna + sekretářka), 4 systémoví programátoři, 4 technici-elektronici a nejméně 6 operátorek pro trojsměnný provoz. Na vrcholu slávy tam pracovalo přes 20 lidí. Ústavní uživatelé si rychle zvykli na pohodlí oprav na štítcích. Mechanickým problémem však zůstávala nutnost opakovaného “vhánění“ krabic štítků s programy a daty do stroje, a to i po jediné nepatrné opravě. Snímač, trpící mechanickými poruchami, občas způsobil rozžvejkání papírového štítku k velké nelibosti uživatelů i techniků, kteří museli zbytky papíru vydlobávat. Téměř neomezený přístup ke strojovému času a počítač v domě představovaly nespornou výhodu. Pozitivním přínosem pro chemické inženýrství bylo, že s narostlými a přiblíženými výpočetními možnostmi se mohly otvírat dosud neřešitelné problémy. Prakticky jediným programovacím jazykem se stal univerzální Fortran.

Tesla však pomalu dosluhovala, a možnou náhradou na konci sedmdesátých let se stal výkonnější sovětský **EC-1033**. Tak jako tak, nic jiného nebylo na výběr. Znamenalo to ovšem odstávku střediska na dlouhé měsíce, protože budovu bylo nutno zevrubně rekonstruovat. V té době jsme museli vzít zavděk těžkopádným (3x týdně) dovážením krabic programů a magnetických pásek k astronomům do Ondřejova, do ÚTIA na Mazance, či kamkoliv jinam, kde nás vzali na milost. “Écéčko” se po dlouhé době mnoha dětských neduhů nakonec přece jen rozběhlo, a pokud fungovalo, tak znamenalo vydatnou intenzifikaci práce. Později přibýly i diskové svazky pro přímý přístup, což umožnilo jednou provždy uložit programy či data a změny dělat jen pomocí opravných štítků, čímž se podstatně minimalizovala potřeba mechanických operací. Koncem osmdesátých let se dokonce začala budovat interní síť s terminály (bylo jich po ústavu více než 10), ze kterých se téměř vše dalo autonomně řídit bez osobních návštěv střediska. V té době došlo též ke stavbě (dosud stojící) ocelové věže, nazvané podle tehdejšího šéfa střediska “Rosenbaumovo ucho“, přes kterou se zkoušela komunikace s ÚTIA na protějším vltavském břehu. Fyzikálníci si tehdy pořídili pokojový počítač Robotron východoněmecké produkce, který se tvářil, že už pracuje na principech dnešních PC. Mimo jiné se dal použít i jako terminál k “uchu“ pro dálkové úkolování rychlých počítačů na Mazance. Přenos dat byl většinou zdlouhavý – a jak se zdálo – závislý na množství vran prolétajících optickou trasou.

Nedlouho před sametovou revolucí bylo na „vyšších“ místech rozhodnuto, že se výpočetní středisko přebuduje na centrum celoakademického významu, a tak byl nainstalován nový, podstatně rychlejší sovětský počítač – **EC-1045**. Dlouho jsme si ho však neužili, protože v rámci delimitace byl provoz stále víc a víc omezován. Kromě toho se počátkem

devadesátých let objevila – jako vzácnost a jako převeliká investice – první písíčka (i jen obyčejná slušovická 286-ka stála čtvrt milionu korun!). Osobní počítače pak v krátké době zajistily rychlou záhubu již zkomírajícího výpočetního střediska a další překotný vývoj už na sebe nedal dlouho čekat. Dnes po dvaceti letech, kdy má prakticky každý svůj vlastní počítač, se nám zdá celá zde popsaná historie k neuvěření. Stejně tak jako možnosti, které přinesl Internet: vždyť už se ani nenamáháme jít přes dvůr do knihovny přečíst si některé časopisy. Všecko máme na stole jen za námahu několika kliknutí.

Ivan Wichterle

Od katalýzy k textuře a transportu v pórech

Jedna z cest, kterou se ubírala heterogenní katalýza v našem ústavu začínala takto: Existoval Chemický ústav (dnes Ústav organické chemie a biochemie AV ČR) na Flemingově náměstí a jednou z částí tohoto ústavu bylo oddělení technologické, kterému šéfoval profesor Vladimír Bažant; z tohoto oddělení potom vznikl náš ústav, který se tenkrát jmenoval Ústav teoretických základů chemické techniky (dneska je to zkrácené na Ústav chemických procesů) a v tomto oddělení se pracovalo na dvou problémech. Nejdůležitější byly silikony a přímá syntéza alkyl- a arylchlorsilanů, na druhém místě byla heterogenní katalýza. Katalýza teprve začínala a nebyla konstituována jako nějaký obor. Vzpomínám si, že na vysoké škole jsem se setkal s katalýzou jedině v organické chemii, a to, že na hydrogenaci byl dobrý Raney nikl nebo platina na alumině. S katalýzou se dalo setkat na technologických katedrách, v případě hovoru o kyselině sírové, amoniaku a kyselině dusičné. Tam se obvykle probíraly technologické aspekty a katalýza jako obor se teprve začala konstituovat.

V takové situaci začala katalýza na Ústavu organické chemie a biochemie a později tedy na našem ústavu. Impulzem pro to, jak se má katalýza studovat, se staly postupně dvě knihy. Jednou byly Chemical Process Principles a tu napsali Hougen a Watson v roce 1944 a k nám se dostala až teprve po válce. Druhou byl Ingoldův spis o fyzikální organické chemii; ten vyšel v roce 1953 v Anglii a u nás byl poměrně promptně přeložen. Ingold tuto knihu nenapsal o katalýze, ale ve snaze klasifikovat nebo pochopit organické reakce. Propagoval takové věci, jako byla Taftova rovnice, která dokázala říci, jak bude (když známe rychlost reakce jedné látky) vypadat rychlost reakce v případě, že na reakčním centru obměníme nějaký substituent. Rovnice měla dvě konstanty, jednu pro substituent a druhou pro typ reakce.

Doktor Miloš Kraus tenkrát přišel s ideou, že by bylo možné tento přístup aplikovat i pro heterogenně katalytické reakce. Proto se změřila celá řada reakcí s proměnnými substituenty; třeba dealkylace alkylfenolu, kde se alkyly měnily co do struktury i co do polohy na fenolovém kruhu a docela to fungovalo. Druhý směr byl více chemicko–inženýrský a založený hlavně na tom, co řekli tenkrát Hougen s Watsonem. Pro nás to bylo velmi podstatné, protože katalýza byla v takovém stadiu, že se katalytické reakce studovaly obvykle ve vsádkovém reaktoru, na který byli všichni zvyklí. V tomto reaktoru však nešlo odlišit průběh reakce od časových změn katalyzátoru. Tyto dva děje se daly odlišit v integrálním reaktoru, tj. v trubce s nasýpaným katalyzátorem, kterou protéká reakční směs a určuje se výstupní koncentrace z reaktoru. Všichni uživatelé byli vedle z toho, jak vyjádřit reakční rychlost. Do té doby se ve fyzikální chemii reakční rychlost psala jako derivace koncentrace nějaké klíčové složky podle času, dc/dt , ale v integrálním reaktoru žádný čas neexistuje. Proto se zkoušelo, co by se hodilo místo času, aby se dostala reakční rychlost. Právě Hougen s Watsonem ukázali, že se musí udělat materiálová bilance integrálního reaktoru. Z toho vyplynulo, že reakční rychlost se dá určit jako derivace konverze podle veličiny, která se mohla zhruba nazvat „doba setrvání“ reakční směsi v reaktoru. To byla jedna podstatná věc z této knihy a druhou byla Hougen-Watsonovská kinetika (dnes se často používá název Hougen–Watson–Langmuir–Hinshelwoodovská: HWLH). Do té doby se ve fyzikální chemii učila obvykle kinetika prvního a druhého řádu. Hougen a Watson ukázali, jak se dají odvozovat kinetické rovnice pro různé průběhy reakce na povrchu tuhého katalyzátoru. Kromě toho prokázali, že se věc silně zjednoduší, když se bude pracovat s počátečními reakčními rychlostmi, tj. s rychlostmi získanými v případě, že integrálním reaktorem protéká reakční směs natolik rychle, že množství produktu je velmi malé. Pak se dala HWLH kinetika poměrně snadno analyzovat. S HWLH kinetikou byla spojena ještě další otázka, a to ovlivnění katalytické reakce transportem látek ve formovaných tabletách katalyzátoru, které

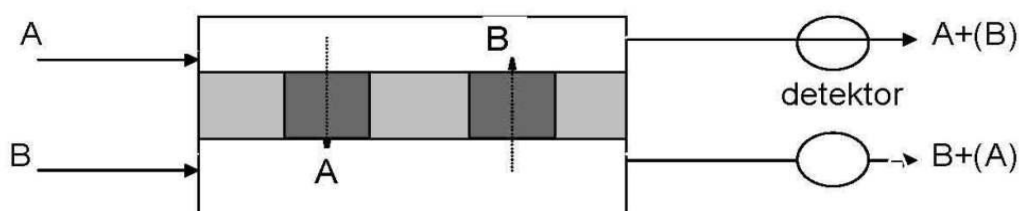
se používají v průmyslových reaktorech. Do takových reaktorů se nedá nasypat práškový katalyzátor (obvyklý v laboratoři), protože reaktorem, který je naplněný jemným práškem, se neprotlačí žádná reakční směs. Proto se katalyzátor musí upravit do nějakých tablet, které se do reaktoru nasypou a potom je průtok možný. Bylo zřejmé, že aktivní povrch katalyzátoru již není ve styku s objemovou fází reakční směsi, a že musí nastat nějaký transportní proces, který z objemu reakční směsi reaktanty přinese k vnějšímu a hlavně vnitřnímu povrchu (pórů) a produkty vynese zase z těch pórů ven. Ovlivnění katalytické reakce takovým transportem bylo známo již před druhou světovou válkou. Thiele v té době publikoval analýzu problému, zavedl pojem „faktor účinnosti“ a po válce problém vyřešil (pro nejjednodušší kinetiku prvního řádu).

Protože v ústavu jsme pracovali s Hougen–Watsonovskou kinetikou, začali jsme se věnovat faktorům účinnosti pro tento druh kinetických rovnic. Vznikal ovšem problém, protože v této kinetice se vyskytovaly koncentrace nejen výchozích složek reakce, ale i produktů. Jak tedy vyjádřit koncentrace různých složek i produktů pomocí koncentrace výchozí složky? Všeobecně se pro transport používal Fickův zákon, tzn. že látkový tok složky je úměrný gradientu koncentrace a konstantou úměrnosti je něco, co se píše jako D a dnes se tomu říká efektivní difuzní koeficient, a přitom nikdo vlastně neví, co to je. Úvaha byla, že se změní kinetika reakce na prášku, pak kinetika reakce na tabletovém katalyzátoru, spočte se faktor účinnosti a porovnáním s teoretickým řešením se vypočte Thieleho modul, který v sobě obsahuje informace o kinetice, difuzi a velikosti částice a z tohoto modulu se pak vypočte efektivní difuzní koeficient.

U faktorů účinnosti se používal Fickův zákon. To je ovšem záležitost stopadesát let stará. Publikoval ho Fick, který byl demonstrátorem v anatomii, tedy ne fyzikální chemik nebo chemický inženýr. Tenkrát ovšem Fickův zákon nebyl pro porézní látky, byl pro difuzi v kapalinách. Proto byl difuzní koeficient pro pár A–B stejný jako pro pár B–A. To se nedalo použít pro transport v pórech; už někdy za války totiž v USA používali difuzní procesy pro separaci uranu 235 a dospěli k tomu, že v difuzním koeficientu je něco, co závisí na velikosti pórů porézní látky. To něco je Knudsenův difuzní koeficient, který charakterizuje Knudsenovu difuzi. Pro velmi úzké póry a/nebo velmi nízký tlak, se molekuly srážejí nejen mezi sebou, ale i s druhou složkou, ale mohou se srazit i se stěnou póru a od té stěny se odrazit. Knudsenův transport je tím významnější, čím jsou póry užší, nebo čím menší je tlak. Popis difuze, potřebný pro porézní prostředí, začal někdy asi před dvěma sty lety. Byl to Thomas Graham, který zjistil, že když dva plyny difundují porézní látkou proti sobě není difuze ekvimolární transport, což se vždycky tradovalo ve fyzikální chemii. V případě, že difunduje např. vodík proti dusíku, pak transport vodíku je zhruba 4x rychlejší než dusíku v opačném směru. Tedy v porézním prostředí neplatí běžná úvaha, že difuze je ekvimolární. Tento zákon znovu objevili Rothfeld někdy po válce a potom ho Mason spojil se Stefan–Maxwellovou rovnicí, takže se dostala jaksi modifikovaná Stefan–Maxwellova rovnice, která je až do dneška základem modelování transportu hmoty v porézním prostředí. Mason v roce 1967 vytvořil model pro n -složkovou plynou směs, když řekl, že se bude zabývat $n+1$ složkovou směsí, kde $(n+1)$ složkou jsou částice prachu s omezením, že částice prachu se nepohybují. My jsme později ten model odvodili jednodušeji, ale v podstatě se stejným výsledkem. Protože se v modelových rovnicích vyskytuje rozměr pórů, potřebovali jsme se nějak k rozměrům pórů dostat. Mysleli jsme si, že použijeme nějakou texturní metodu. V té době existovala jenom adsorpce dusíku a vysokotlaká rtuťová porozimetrie. V dnešní době jsou tyto metody širší, poměrně běžný je i elektronový mikroskop a pro fyzikální adsorpci se dneska vyrábějí kompaktní, ale i drahé přístroje. Předtím se musela adsorpční aparatura pro měření fyzikální adsorpce postavit vlastními silami. Skleněná aparatura zabrala jednu stěnu laboratoře a pan autor jí musel sám sesklít dohromady. Tlak se tehdy měřil rtuťovým manometrem, nebo McLeodovým manometrem, když tlak byl nízký. Dnes je to

nesrovnatelné, aparatury se prostě naprogramují a v podstatě pracují automaticky. Dříve měření byla otázkou jednoho či dvou měsíců, dneska to trvá, podle toho kolik bodů izotermu se chce, od jednoho dne do druhého nebo třetího dne. Důležité ovšem je, jak se data z těchto metod vyhodnocovala. Porozimetrie vyžaduje něco, čemu se říká Washburnova rovnice, tj. že velikost pórů, do kterých se může vtlačit rtuť je nepřímo úměrná tlaku potřebného pro vtlačení. Čím vyšší tlak tedy máme, tím menší je poloměr pórů, do kterých se rtuť vtlačí. Pro adsorpční isotermu, tj. výsledky měření fyzikální adsorpce nejčastěji dusíku, se používá rovnice BET podle pánů Brunauera, Emetta a Tellera. První dva před druhou světovou válkou měřili všelijaká fosforečná hnojiva, získávali isotermu, ale vlastně nevěděli, jak z těch isoterem získat informace. Až k nim přišel Edward Teller, což byl Maďar, který utekl před Hitlerem. Byl to teoretický fyzik, který byl schopen podle představ pánů Brunauera a Emetta dát dohromady rovnici, která se používá dodnes. Velký hřích však je, že nejméně 50 % autorů tuto rovnici používá hlava nehlava. Rovnice byla odvozena pro případy, že neexistují v té látce žádné mikropóry a je platná jenom pro mezoporézní látku a jenom v takové oblasti tlaku, kdy ještě nenastala kapilární kondenzace v pórech. To se dnes zanedbává, v každé druhé publikaci vidíte, že se analyzuje mikro- a mezoporézní látka a používá se BET rovnice. To vede k velmi vysokým specifickým povrchům. My jsme tuto rovnici modifikovali, takže se dá použít i pro látky obsahující jak mikro-, tak mezopóry. Další metoda je založená na porovnávání adsorpční isotermu vzorku s isotermou chemicky stejného vzorku, ale neporézního, tj. tzv. t-plot, ze kterého se dá zjistit, jaký je objem mikropórů a povrch mezopórů. To ovšem vyžaduje, abychom měli knihovnu izoterem neporézních vzorků nebo sami takové měření provedli. To ovšem není jednoduché, a proto se v literatuře uvádějí adsorpční isotermu různých standartních vzorků a my jsme k nim také přispívali. Distribuci pórů se v padesátých letech zabývali Barret, Joyner a Halenda a s použitím Kelvinovy rovnice dokázali z části isotermu pro vyšší tlaky určit distribuci pórů. Vyskytly se i komplikovanější modely, které předpokládají, že tloušťka filmu na vnitřním povrchu póru není stejná jako na plochem povrchu. Dnes přicházejí v úvahu fyzikální metody, které dovedou vypočítat teoretickou isotermu pro určitý rozměr pórů. Bohužel, tyto postupy v sobě stejně obsahují předpoklad válcových pórů a vyžadují velké množství poměrně přesných údajů o vztazích mezi molekulami adsorbentu a adsorbátu. Je to tedy spíše vítězství lidského ducha nad praktickou aplikací.

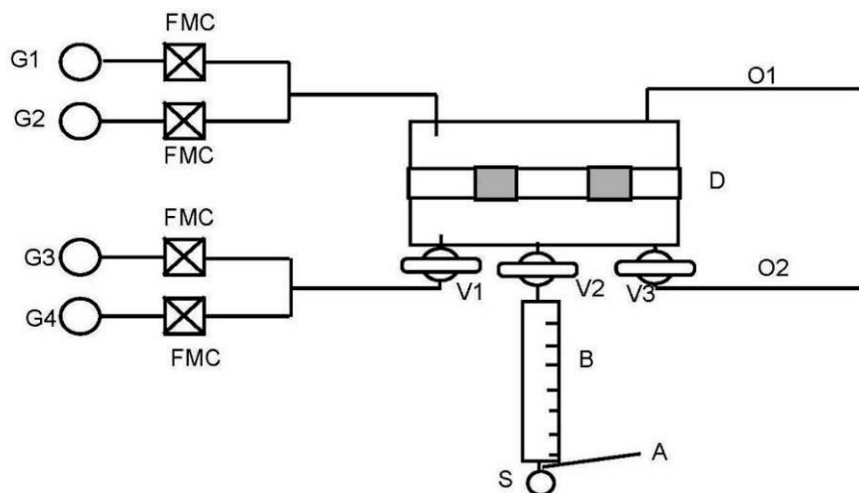
My jsme vyšli z poměrně jednoduché filozofie, že když chceme použít modifikovanou Stefan–Maxwellovu rovnici, která předpokládá jak válcové póry s nějakým rozdělením velikosti, tak údaje o velikosti pórů získáváme z měření jednoduchého fyzikálního jevu, který pracuje se stejným modelem. Použili jsme jednoduché transportní procesy a pro vyhodnocení experimentálních dat jsme použili model, který se shoduje s tím, který bychom potřebovali pro předpověď transportu v porézním katalyzátoru. Těmito transportními procesy byla binární nebo ternární difuze v difuzní cele (schematicky znázorněná na následujícím obrázku).



Obr. 1. Wicke–Kallenbachova cela

Cela je rozdělena nepropustnou přepážkou, ve které jsou otvory, do kterých se vsadí válcová tableta porézní látky. Jednou částí proudí jeden plyn (A), druhou částí proudí druhý plyn (B). Plyn A difunduje porézním prostředím do části s plynem B a obráceně. Ve vystupujícím proudu plynu B se objeví i A. Stejně tak se ve vystupujícím proudu A objeví B. Složení vystupujících proudů se musí analyzovat, např. chromatograficky, musí se také přesně udržovat stejný tlak, aby difuze byla isobarická. Vcelku je to aparaturně velmi náročné.

My jsme vymysleli difuzní celu (označujeme ji jako „Grahamova“, viz obr. 2 a 3), která vychází z toho, že víme, jaký je poměr mezi tokem jedním a druhým směrem. Pak můžeme jednoduchým způsobem bez analýz složení výstupních proudů určit celkový difuzní tok a z něj určit difuzní toky jednotlivých složek.

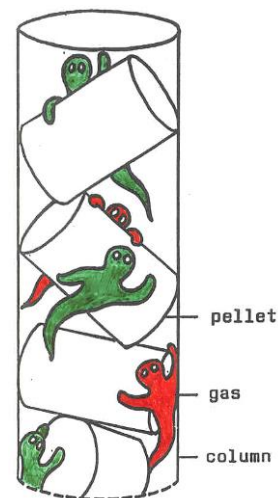


Obr. 2. Schema Grahamovy cely



Obr. 3. Grahamova cela

Další metoda, která se dá použít, je metoda chromatografická. Chromatografická kolona se zaplní porézní látkou, a to tak, že kolona má jen o něco větší průměr než tablety porézní látky (single pellet-string, SPSC, viz obr. vpravo). Kolonou protéká nosný plyn, do kterého se nastříkne stopovací plyn a na výstupu z kolony se sleduje tvar píku stopovacího plynu. Poměrně složitou teorií se pak dá tvar výstupního píku zpracovat. Dříve se to dělávalo pomocí momentů, které se z výstupního píku dají určit, dnes už se to dělá tak, že se modeluje celá křivka, takže transportní parametry se dostanou fitováním teorie na chromatografickou křivku.



Jinou metodou, kterou často používáme je pseudostacionární permeace, kdy se měří transport čistého plynu pod malým tlakovým spádem; toto měření se může opakovat při různých celkových tlacích. Z výsledků dostáváme informace, důležité pro popis permeace, čili toku čistého plynu pod vlivem gradientu tlaku. Tyto metody se dají použít i v nestacionárních podmínkách. Dá se měřit současná difuze a permeace. Další metodou, kterou zavádíme je perporometrie, tj. permeace plynu porézní látkou, kde část pórů je zaplněna vhodnou kapalinou. V případě postupného vyprazdňování pórů, ve kterých je kapalina obsažena, se může stanovit distribuce velikosti pórů. Je možné, že v budoucnu se bude něco podobného dělat nejenom s permeačním transportem, ale také s difuzním transportem, ale to je komplikovanější věc.

Shrnuto, dnes používáme modifikovanou Stefan–Maxwellovu rovnici pro difuzi, Weberovu rovnici, což je jakési rozšíření d'Arcyho zákona, pro permeaci plynu porézní látkou. Tento model má tři parametry: integrální střední hodnotu poloměru, integrální střední hodnotu kvadrátu poloměru a faktor, který v sobě obsahuje tortuozitu (křivolakost) pórů. Model se dá upravit do stejné formy jako je model prášného plynu (DGM), takže lze pracovat s oběma modely. My jsme dosud kinetiku žádné katalytické reakce na tabletě katalyzátoru a na prášku neměřili, ale simulovali jsme hydrogenaci benzenu a syntézu amoniaku a našli značné rozdíly, které se dostanou, když se použije náš postup, nebo postup, vycházející z Thieleho modulu. To je dáno tím, že když toky složek nespĺňují Grahamův zákon a jsou vázány stechiometrií, vznikne gradient tlaku, který s sebou přináší permeační tok, který se musí vzít v úvahu. To jsme nedávno zkusili s katalyzátorem pro výfukové plyny z automobilu.

V oddělení máme Texturní středisko, které je slušně vybavené přístroji pro texturní analýzu. Vypracovali jsme tříparametrovou modifikovanou BET rovnici, která se hodí pro mikro- a mezoporézní látky, pro transport látek máme nyní model průměrného transportního póru (MTPM) a Weberovu rovnici, které umožňují popsat transport za komplikovanějších podmínek a máme experimentální metody, kterými můžeme vyhodnotit parametry modelu. Dále máme k dispozici Grahamovu difuzní celou, permeační celou, zařízení pro chromatografickou metodu a software pro fitování v časové doméně, jakož i pseudostacionární a dynamické cely, kde se současně vyskytuje více transportních procesů.

Petr Schneider

Laserově iniciovaná chemie a její začátky v ÚTZCHT / ÚCHP

Po návratu ze stáže v SUNY, USA mi bylo v roce 1976 nabídnuto Dr. Ing. Václavem Chvalovským, DrSc., členem korespondentem ČSAV a vedoucím Oddělení homogenních reakcí a skupiny organokřemičité chemie zabývat se novou problematikou – chemickými reakcemi iniciovanými zářením infračervených laserů. Chemické aplikace laserů byly do té doby předmětem zájmu především optiků, fyziků a matematiků a Dr. Chvalovský podotkl, že to může být “otrávené maso”.

Navržené téma bylo zcela odlišné od zábleskové fotolýzy organických sloučenin, kterou jsem studoval v USA a vybavení pro daný výzkum bylo zcela minimální. Se zkušeným panem Josefem Vítkem jsme měli k dispozici pouze obstarožní plynový chromatograf a mohli používat kontinuální CO₂ laser a IČ spektrometr v laboratoři Dr. Milana Horáka a Ing. Pavla Engsta na blízkém pracovišti Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského. Začátky výzkumu nebyly proto lehké – bylo třeba vyvíjet metodiku a věnovat se problémům, jejichž řešení bylo s danými možnostmi zvládnutelné.

Vybavenost našeho malého pracoviště se však po 2–3 letech zlepšila o vlastní kontinuální CO₂ laser a příslušenství zhotovené v dílnách ústavu s přispěním ing. Pavlíka, ing. Masáka, p. Vachalovského a p. Kocha, a také koupí pulsního CO₂ laseru z univerzity v Plovdivu za “měkké” rubly. Náš dvoučlenný tým byl rozšířen o RNDr. Marii Jakoubkovou a RNDr. Zlatu Papouškovou, které byly zkušené v oboru vibrační spektroskopie. Ústavem byl též zakoupen přístroj GC/MS a některé další komponenty.

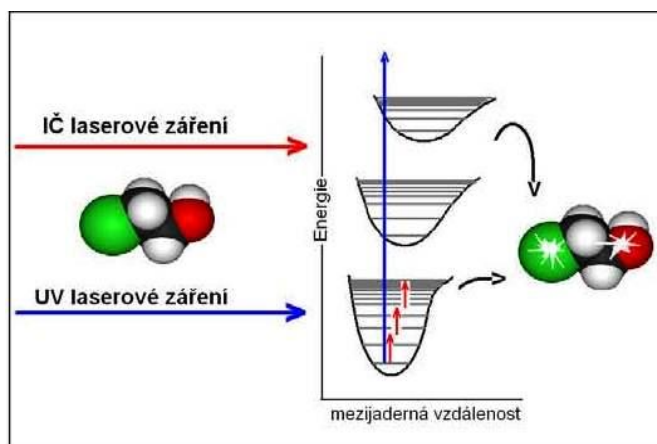
Prvé období výzkumu bylo věnováno studiu homogenního rozkladu organických sloučenin a bylo zdařilé. Podařilo se nám odhalit průběh (mechanismus) řady rozkladů organických sloučenin, které se významně lišily od konvenčních pyrolýz a tyto pozoruhodné výsledky publikovat v mezinárodních časopisech. Tématice prospěla účast prvých aspirantů, ze kterých je třeba jmenovat zejména Dr. Pavla Kubáta a Dr. Radka Fajgara, kteří svým poctivým a tvořivým přístupem dosáhli výsledků publikovatelných v amerických časopisech. Náš tým tehdy existoval jako neoficiální skupina laserové chemie a dovolil si, s ohledem na získané a publikované výsledky, pořádat pod záštitou FECS (Federation of European Chemical Societies) dvě mezinárodní konference v letech 1986 (Chemistry by Infrared Lasers) a 1989 (Laser induced Chemistry). Ty měly značný úspěch a poprvé umožnily setkání odborníků z obou politických zón.

Další období výzkumu bylo ovlivněno nákupem některých potřebných přístrojů (UV a IČ lasery, FTIR, UV spektrometry aj., které byly pořízeny ústavem a díky grantu AID, USA), zvýšením počtu výzkumných pracovníků, velmi významnou mezinárodní spoluprací a rozšířením tematiky infračervené laserové chemie o laserovou chemii iniciovanou UV laserovým zářením.

Neobyčejné chemické reakce v laserovém paprsku

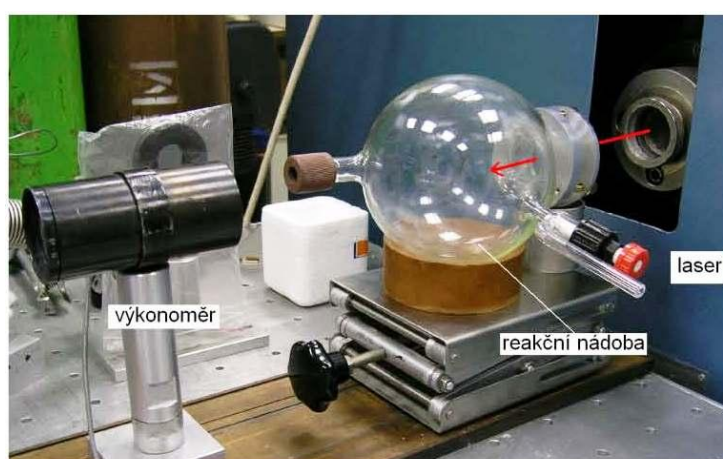
Laserová chemie je velmi atraktivním vědním oborem. Lze ji považovat za fotochemii indukovanou optickou excitací molekul a atomů účinkem záření o vlnové délce 0,1 – 10 μm. Výjimečné rysy chemických reakcí iniciovanými laserovým zářením souvisí především s možností lokální excitace absorbérů krátkými pulsy záření, vysokou intenzitou, monochromaticností a též laditelností vlnové délky záření. Na rozdíl od konvenční fotochemie (jednofotonová excitace a reakce v termodynamicky rovnovážných podmínkách) lze laserovým zářením iniciovat zcela neobyčejné chemické reakce v důsledku specifické excitace reaktantu do definovaných vibračních či elektronově excitovaných stavů (obr. 1). Ojedinelých reakcí však lze dosáhnout i kontinuálním zářením IČ laserů. V Laboratoři laserové chemie ústavu probíhá již přes 30 let výzkum UV a IČ laserově iniciovaných reakcí v plynné, kapalné i pevné fázi. Během tohoto období bylo objeveno mnoho důležitých

laserově iniciovaných chemických reakcí, které jinak neprobíhají a nebo vedou ke zcela odlišným produktům.



Obr.1. Schéma dodání energie reaktantu (obvykle molekule) laserovým zářením.

Laboratoř má světový primát ve studiu tzv. *studených pyrolýz*, tj. reakcí, které probíhají ve studených reaktorech v důsledku ohřevu reaktantu v malém objemu plynné fáze. Vyloučení vlivu horkých stěn umožňuje provádět tepelně iniciované reakce výlučně homogenním mechanismem, čehož nelze jinak dosáhnout. Studium homogenních rozkladů mnoha sloučenin (obr. 2) pak vedlo k objevu dosud nepoznaných mechanismů rozkladu celé řady organických a organokovových sloučenin. Získané výsledky přispěly k lepšímu chápání průběhu monomolekulárních rozkladů a bimolekulárních reakcí, z nichž některé mají význam v preparativní chemii. Velmi zajímavou tepelně iniciovanou reakcí je např. reakce mezi hexafluoridem sírovým a oxidem uhelnatým vedoucí k synteticky užitečným fluoračním činidlům. Ta normálně probíhá jen při 500 °C a 400 MPa, ale účinkem infračerveného laserového záření nastává již při subatmosferickém tlaku a pokojové teplotě. S cílem zjistit environmentální dopad reakce olefinů s ozonem byl také studován homogenní rozklad sekundárních ozonidů – sloučenin vznikajících danou reakcí v ovzduší.



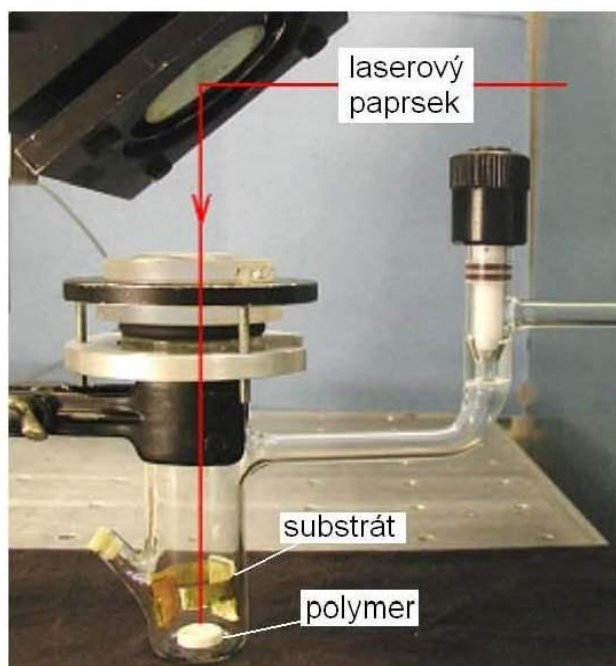
Obr. 2. Aparatura pro laserově iniciované chemické reakce v plynné fázi. Laserový paprsek je absorbován plynem v reakční nádobě a tím je zahájena reakce mezi jeho komponentami.

Jinou kategorií laserově iniciovaných reakcí v plynné fázi, díky které Laboratoř získala světové renomé, jsou laserově iniciované reakce vedoucí k *chemické deposici polymerů* z

plynné fáze. Podstatou tohoto procesu je homogenní rozklad vhodného plynného prekurzoru na velmi reaktivní částici, která v plynné fázi podléhá polymerizaci. Tato reakce dovoluje depozici polymerů na studené substráty a je vhodná pro přípravu nových typů povlaků a práškových materiálů. Některé typy deponovaných polymerů [poly(oxokarbosilany) nebo poly(boroxokarbosilany)] vykazují vysokou tepelnou stabilitu a mohou najít použití jako ochranné povlaky v tepelně namáhaných zařízeních. Jiné typy polymerů, např. poly(pyridin) se osvědčily jako součásti velmi citlivých sensorů škodlivých plynů a jiné (polythien vzniklý ojedinělou polymerizací CS radikálu a mající strukturu nanorozměrných prázdných koulí) mohou perspektivně najít zajímavé použití.

V laboratoři byla též vyvinuta metoda **depozice nanostrukturovaných kovů** (Se, Te, Ge) a metoda **přípravy nanorozměrných chalkogenidů kovů v plynné fázi**. Nanorozměrné sulfidy, selenidy a teluridy germania, cínu a křemíku vznikají současným rozkladem dvou těkavých organokovových sloučenin v plynné fázi a následnou reakcí mezi shluky chalkogenu a kovu. Získané nanorozměrné chalkogenidy si hledají významné použití v nelineární optice, při uchovávání dat a v solárních článcích.

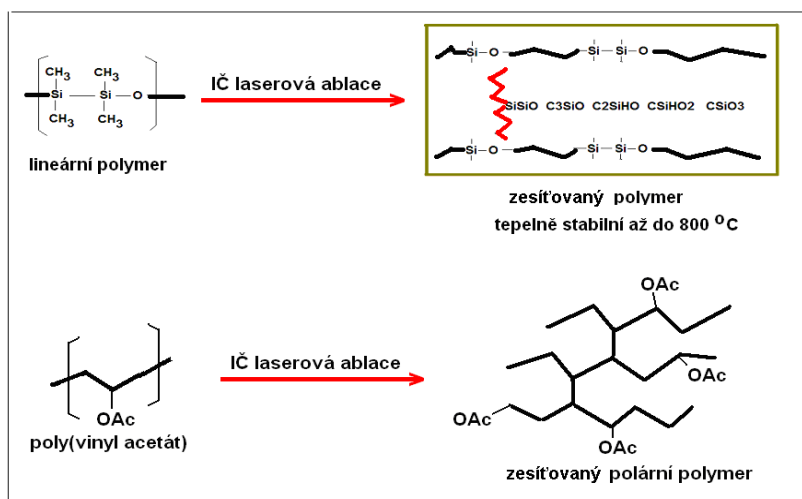
Laboratoř laserové chemie provádí též výzkum laserově iniciované **degradace a modifikace polymerů**. Také tato reakce má homogenní charakter a je řízena velmi rychlým zahřevem a velmi rychlým ochlazením malé části polymeru exponované krátkým pulsem záření (obr. 3). Laserově iniciované degradace některých polymerů (PVC, PVA) účinkem



Obr. 3. Jednoduchá aparatura pro laserovou ablaci polymerů.

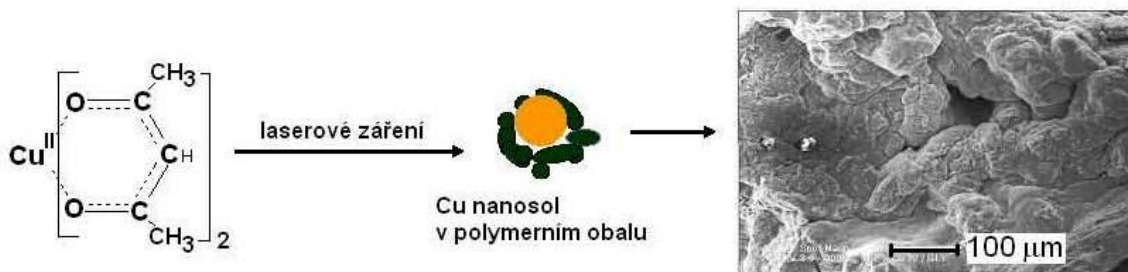
(V důsledku absorpce laserového paprsku v polymerním terčíku dochází k ablaci a deposici chemicky modifikovaného polymeru na substrát.)

málo energetického záření vedou k dosud nepopsané tvorbě monomeru. Účinkem vysokoenergetického záření dochází k vypuzení aglomerátů v proudu vzniklých molekul (ablaci) a k jejich depozici na blízké substráty. Metodou laserově iniciované ablace byly deponovány nové typy adhezivních filmů prokřížených polárních polymerů (obr. 4), ve kterých je obsah polárních skupin a stupeň prokřížení řízen ozařovacími podmínkami. Lze



Obr. 4. Schéma laserově ablativní modifikace polymerů, během které dochází ke strukturálním změnám lineárních polymerů.

očekávat, že získané polymerní (reaktivní) filmy najdou použití např. při přípravě gelových polyelektrolytů nebo navázání biologických molekul. Jiným studovaným oborem je laserově iniciovaná chemická **depozice amorfních kovů** účinkem laserového záření na organokovovou sloučeninu v roztoku. Laserové fotolýzy organoměďnatých a organoželeznatých chelátů jsou účinnými metodami přípravy nanokompozitů obsahujících vzácnou formu amorfni mědi a železa. Přechodně vznikajícími produkty jsou koloidy typu kov/polymer, které stárnutím přecházejí na nanokompozitní depozity kov/polymer (obr. 5).

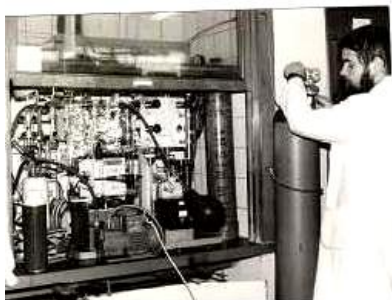
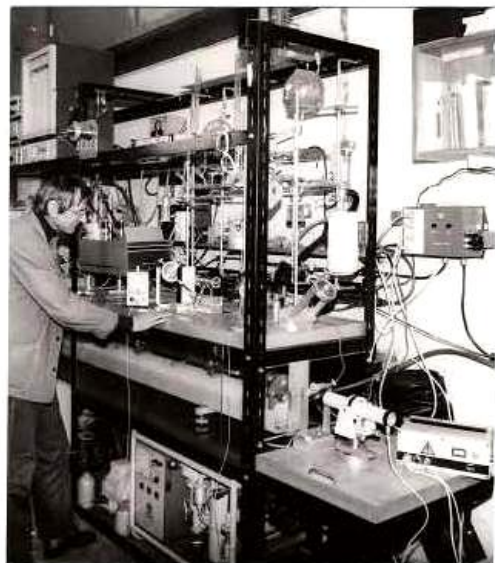


Obr. 5. Tvorba amorfního kompozitu měď/polymer. Laserová fotolýza roztoku organoměďnaté sloučeniny vede nejprve k tvorbě koloidních roztoků částic mědi, které jsou pokryty polymerem. Tyto roztoky stárnutím poskytují sraženinu Cu/polymerního nanokompozitu.

V současnosti laboratoř pokračuje ve výzkumu laserově iniciovaných reakcí vedoucích převážně k nanomateriálům, např. nanočásticím a nanokompozitům uhlíku a nanoslutinám kovů. V rámci tohoto výzkumu byla mimo jiné provedena gigawattová laserová fotolýza aromatických sloučenin a připravena velmi vzácná nanorozměrná forma feromagnetického uhlíku nebo uhlíkatého chaoitu, který se vyskytuje pouze v meteoritech.

Četné výsledky mohly být dosaženy pouze díky spolupráci s laboratoří elektronové mikroskopie Ústavu anorganické chemie, laboratoří fotoelektronové spektroskopie Ústavu

Výzkum laserové pyrolýzy v polovině 80 let



Josef Víték, Pavel Kubát, Marie Jakoubková a Josef Pola “v akci”.

fyzikální chemie J. Heyrovského AVČR a Národním ústavem pro průmyslovou vědu a technologii v japonské Tsukubě.

Obor studované laserové chemie představoval plejádu odlišných chemických reakcí, které nelze jinak iniciovat. Jednalo se např. o laserově iniciované reakce jako alternativa chemie vysokých tlaků, “studenou pyrolýzu” (pyrolýzu probíhající v reaktorech se studenými stěnami), specifické (molekulární) rozklady organických sloučenin, specifické oxidace halogenalkenů, tvorbu velmi reaktivních částic a jejich polymerizaci na nové materiály, chemickou depozici nových materiálů z plynné a kapalné fáze, syntézu nových polymerů a anorganických materiálů laserovou ablací, syntézu anorganických chalkogenidů v plynné fázi, studium průběhu reakcí ozonu a ozonidů v atmosféře a také laserovou syntézu nových kompozitů uhlíku s oxykarbidy křemíku.

Od roku 1990 tým pracoval v poměrně optimálním složení a jeho činnost se opírala o Dr. Radka Fajgara, Ing. Markétu Urbanovou, Ing. Danu Pokornou, Dr. Vladislava Dřínka a Dr. Jaroslava Kupčíka. Z řady PhD studentů je třeba vyzvednout Ing. Marii Sedláčkovou, Ing. Savu Simeonova a Ing. Jadranku Blazevskou-Gilev. Jako stážisti se velmi osvědčili Dr. Lavrentij Kchachatryan a Dr. Radmila Tomovska. Specialisty týmu byli Dr. Karel Vacek (EPR spektroskopie) a Ing. Anna a Anastas Galíkovi (termogravimetrie). V tomto období byl tým často navštěvován odborníky ze zahraničí a takřka všichni jeho členové byli na několika zahraničních stážích. Je nutné podotknout, že všechny spolupráce s 22 zahraničními institucemi vedly k publikacím ve významných časopisech. Veškeré výsledky za dobu existence laboratoře pak byly prezentovány ve více než 250 sděleních v mezinárodních časopisech.

Josef Pola

NMR spektroskopie na ÚTZCHT a ÚCHP

Aby vyprávění o historii NMR na našem ústavu nebylo jen trapným vyprávěním mého odborného životopisu, soustředím se spíše na vývoj našeho přístrojového vybavení, které limituje možnosti NMR. Doufám, že současní uživatelé NMR je shledají úsměvným a snad si i budou více vážit možností, které dnes mají.

Ačkoliv NMR bylo objeveno již v roce 1945 (objevitelé Purcell a Bloch byli oceněni Nobelovou cenou v r. 1952), chemický posun (základ analytického využití NMR) v roce 1951 a firma Varian inzerovala "NMR at work" již asi od r. 1954, slyšel jsem na Karlově univerzitě o NMR spektroskopii prvně až těsně před promocí v r. 1961, když mne ing. Václav Chvalovský, DrSc. vyzval, abych se ucházel o místo aspiranta v tomto oboru.

Mým školitelem se stal ing. Otto Knessl (ÚOCHAB), který sám sice aspiranturu neměl, ale zato měl ve své laboratoři NMR spektrometr, vyvinutý a vyrobený v Ústavu přístrojové techniky ČSAV Brno (dále ÚPT). Byl to toho času v Československu jediný NMR spektrometr; ÚMCH ČSAV Praha a VÚOS Pardubice získaly komerční spektrometry firmy JEOL až o něco později.

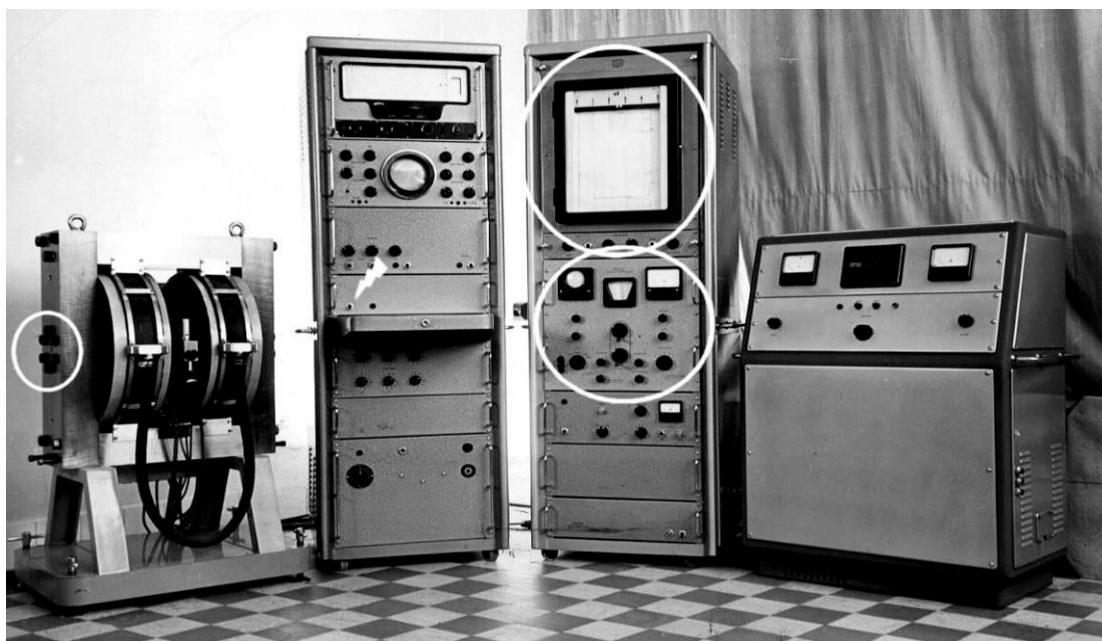
Jaký to byl vlastně zázrak, že se partě několika nadšenců v ÚPT okolo ing. "Jožky" Dadoka (ing. O. Chramostovi, ing. K. Švédovi a dalším) podařilo díky neobyčejné invenci sestrojít funkční NMR spektrometr, současníci asi ani nedocení. Dnes je těžko představitelné, že v šedesátých letech tady nebyla literatura (řadu amerických časopisů dostávaly naše knihovny s ročním zpožděním v podobě čínských nelegálních kopií). Jediná existující kniha o NMR spektroskopii (J. A. Pople, W. G. Schneider, J. J. Bernstein: High-resolution Nuclear Magnetic Resonance, McGraw-Hill, New York 1959) byla v celé zemi v jedné kopii a "Xerox" (kopírka) ještě nebyl zkonstruován. Všichni jsme byli začátečníky, nebylo s kým se poradit a ani konstruktéři neměli co okoukat, takže někdy objevovali "Ameriku", jindy se jim podařilo "Ameriku předejnat" (např. spektrometr ÚPT používal elektronickou stabilizaci magnetického toku, zatímco spektrometr Varian používal zrcátkový balistický galvanoměr, který reagoval na mnoho jiných podnětů).

V době, když Ing. Josef Dadok začínal pracovat na konstrukci spektrometru, existovaly mezi všemi elektrotechnickými firmami světa jen dvě, které dokázaly komerčně vyrábět NMR spektrometry vysokého rozlišení: americký Varian a švýcarský Trüb-Täuber, který se neujal. Až o pár let později se objevil japonský výrobce JEOL a ještě později vznikl Bruker.

Patří k atmosféře té doby, že "vinu" za vývoj NMR spektrometrů v Brně má vedle politického vlivu akademika Františka Šorma i embargo uvalené kongresem USA na export NMR spektrometrů za železnou oponu. Akademik Šorm dokázal prosadit, že byla v ÚPT (ústav, známý úspěchy v oblasti elektronové mikroskopie, např. světově první stolní elektronový mikroskop prof. A. Delonga) vydělena skupina pro konstrukci NMR spektrometru pod vedením Ing. Josefa Dadoka, s příslibem pozdějšího převodu do komerční výroby v Tesle Brno, podobně jako se stalo dříve v případě elektronových mikroskopů.

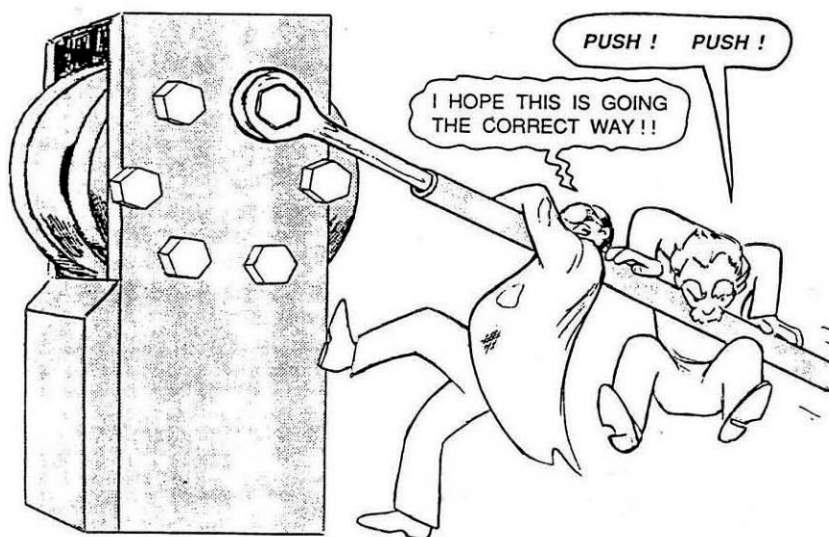
První Dadokův spektrometr pracoval na frekvenci 30 MHz. Po krátké době byl předělán na 40ti megahertzový, převezen do Prahy a instalován na ÚOCHB. Na tomto spektrometru (obr. 1) byly řešeny první úkoly pro náš ústav. Samozřejmě, měřit bylo možno pouze protonová spektra, $^1\text{H-NMR}$.

Pro dosažení vysokého rozlišení bylo nejdůležitější součástí magnetu šest šroubů (na obrázku v kroužku) na každé straně magnetu. Šrouby byly předchůdci dnešních digitálně ovládaných cívek pro jemné ladění homogenity magnetického pole. Šrouby se utahovaly nebo povolovaly pomocí klíče s rukojetí dlouhou asi 1 m. Šrouby držely tzv. pólové nástavce (válce ze speciální slitiny železa) ke jhu magnetu. Různým šponováním šroubů se empiricky dosahovalo homogennějšího nebo méně homogenního magnetického pole v místě vzorku



Obr. 1. 40 MHz spektrometr z ÚPT instalovaný na ÚOCHB
(proznačené zprava: šroub pro ladění magnetu, přepínač, zapisovač, tónový generátor)

mezi nástavci. Jak vypadalo takové ladění magnetu, výstižně ukazuje karikatura na obr. 2, která též dokládá, že stejnou metodu užívali světoví výrobci. Když jste za klíč vzali, mohli jste jen doufat, že táhnete tím správným směrem. Pokud jste tlačili špatným směrem a homogenita se zhoršila, bylo velmi obtížné vrátit se třeba jen do předchozího stavu.

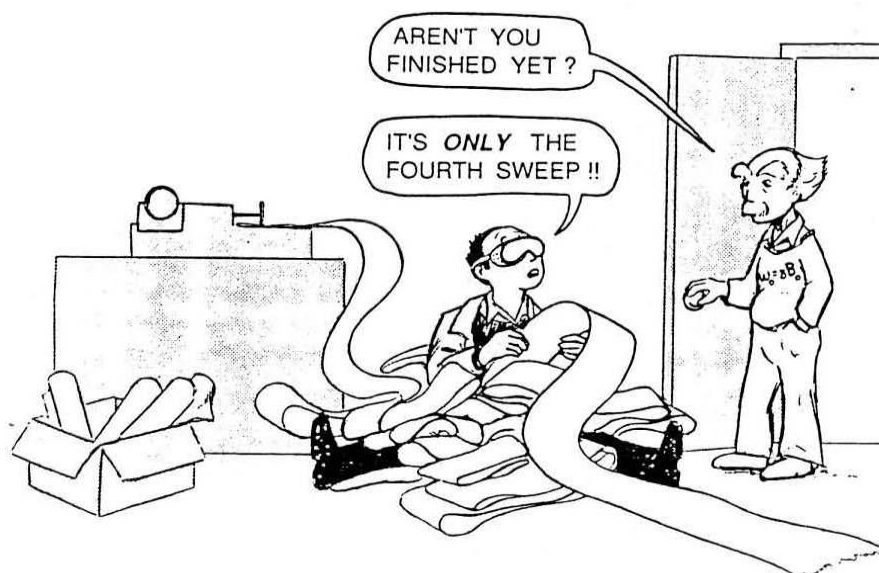


Obr. 2 "Jemné ladění homogenity magnetického pole"
(obrázek reprodukován s laskavým svolením autora D.D. Traficante, Concepts in Magn. Reson. 3,13,1991.)

Magnet byl napájen stejnosměrným vysoce stabilizovaným proudem, ale chlazen vodou přímo z vodovodního kohoutku. Spotřeba vody byla velká. Jelikož klimatizace místnosti byla v té době zcela nedostupná, měření měla naději na úspěch jen za vhodného počasí. Naději na výsledek často zhatilo v té době běžné, ač neplánované, vypínání elektrického proudu. Ustálení stavu po opětovném zapojení proudu trvalo kolem 8 hodin.

Nejdůležitější a nejnebezpečnější částí spektrometru byl "čudlík" (přepínač) označený na obr. 1 šipkou. Ten byl na pultu umístěn na tak nešťastném místě, že kdykoliv jste pohnuli poznámkovým blokem, čudlík jste překlopili. Podle jeho polohy magnetické pole buď s časem rostlo nebo klesalo, takže když jste omylem polohu změnili uprostřed měření, bylo měření znehodnoceno.

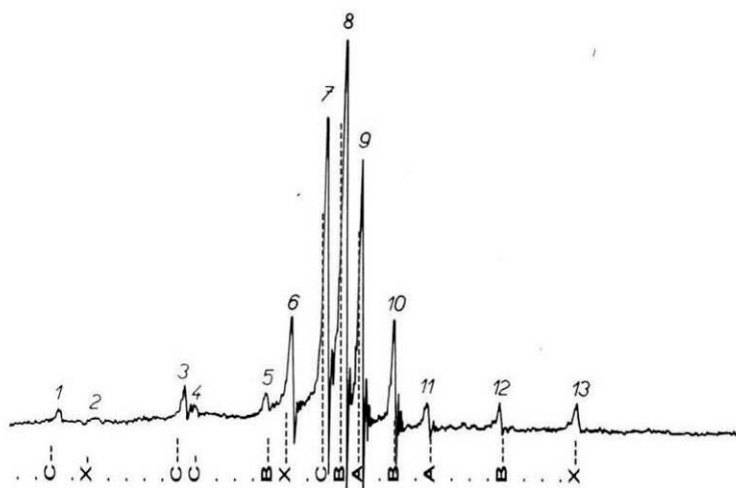
Jako vysílač sloužil válečný konfiskát po německé armádě Lambda. Za zmínku stojí i zapisovač. Na "nekonečný" pruh papíru se psalo jedno spektrum za druhým – viz karikatura na obrázku 3. Spektra byla na papíru jednou kratší, podruhé delší, podle toho, jak magnetické



Obr. 3. Opakovaný zápis spekter na "nekonečný" pás papíru
(obrázek reprodukován s laskavým svolením autora D.D. Traficante, Concepts in Magn. Reson. 3,13,1991.)

pole "vandrovalo nebo couralo". Proto se spektra musela frekvenčně kalibrovat. Ke kalibrování sloužil tónový generátor (viz obr. 1). Abychom zjistili kolik Hz je mezi referenčním signálem a linií spektra, což je údaj, který ve spektroskopii potřebujeme, musela se pustit z tónového generátoru tónová frekvence (tj. 10 Hz – 16 kHz). Ve spektru tak přibýly další dvě linie, umístěné symetricky od hlavní linie ve vzdálenosti použité tónové frekvence. Pak se prostou úměrou přepočítala vzdálenost mezi liniemi v mm na vzdálenost v Hz jednotkách. To pro jednu každou čáru ve spektru.

Obr. 4 ukazuje, jak vypadá 40 MHz spektrum tří vinylických protonů. Z takového spektra bylo nutno analýzou vydolovat 3 chemické posuny a 3 interakční konstanty. V principu se jedná o jednoduchý postup: simulačním výpočtem přiřadíme pozorované linie teoretickým energetickým přechodům a pak iteračním výpočtem zpřesníme hodnoty posunů a konstant. Ale praxe byla velmi těžkopádná: tehdejší počítače nebyly vybaveny zapisovači. Spektra se simulovala na psacím stroji velice hrubým způsobem patrným z obr. 4. Tisknul se jeden řádek po druhém, každý řádek je jedna tečka na začátku řádku. Co řádek, to posun frekvence o x Hz; spektrální intenzitu na této frekvenci (tj. na tomto řádku) pak simuloval počet pomlček vytištěných v řádku. Simulované spektrum se iteračně nastavovalo na shodu s experimentálním spektrem. Ke své hrůze zjišťuji, že v mé disertační práci frekvenční poloha jedné každé experimentální čáry byla výsledkem 23 opakovaných měření a kalibrací. Samozřejmě všechny potřebné počítačové programy na výpočet a simulaci teoretických spekter byly pouze vlastní výroby, byly napsány ve velmi jednoduchých jazycích a výpočty bylo možno provádět ve výpočetních střediscích obchodních organizací. Nutno ale přiznat, že



Obr. 4. Experimentální (nahore) a simulované (dole) ^1H NMR spektrum tří vinylických protonů (ABC) dimethylvinyl(*t*-butoxy)silanu

obrovská pracnost získávání výsledků byla vyvážena jejich cenností, neboť NMR dat byl naprostý nedostatek. Podle mých informací, naše práce z r. 1964 (Cudlín J., Schraml J., Chvalovský V.: Collect. Czech. Chem. Commun. 29, 1476 (1964)) byla první československou prací s analýzou NMR spekter.

Od r. 1964 přebírala Tesla (ing. Josef Sapík a ing. Vladimír Zeman) výrobu 60 MHz spektrometru, vyvinutého skupinou ing. Dadoka. Profesor Šorm přislíbil Tesle Brno, že Akademie bude spektrometry od Tesly kupovat (cena v té době nebyla důležitá). Od Akademie jsme tedy nemohli dostat prostředky na koupi jiného spektrometru a museli čekat na vyrobení prvního spektrometru v tomto podniku. Díky tomu mne prof. Vladimír Bažant poslal na roční stáž k prof. E.G. Rochowovi do USA, což byl po odborné stránce omyl. V jeho laboratoři byl sice NMR spektrometr, který sestavili studenti radioamatéři, ale byl to širokopásmový spektrometr a nikoliv spektrometr vysokého rozlišení. Mohl jsem však pracovat na jiných spektrometrech katedry (Varian A60) a na nich zajišťovat NMR servis pro ústav na dálku.

Ve stejnou dobu se ústav stěhoval do Suchdola, kde byl již vyhrazen (stísněný) prostor pro NMR laboratoř v suterénu hlavní budovy. Stavební a jiné úpravy přidělených prostor jsem si mohl za oceánem v klidu vymýšlet, do praxe je uváděla neskutečně svědomitá Maruška Jakoubková (jménem firmy "SchraMery"). Podařilo se prosadit tepelnou izolaci místnosti, klimatizaci i samostatný přívodní kabel z trafo stanice. Optimální nábytek, který sloužil i jako oddělovací stěna navrhl ing. Ferdinand Lucek z ústavní konstrukční kanceláře, technické detaily řešil pan Jaroslav Koch (tč. Kobit). (Pro ilustraci: abychom ušetřili prostor a splnili bezpečnostní předpisy, jsme potřebovali šoupací vchodové dveře. Žádné na trhu nebyly, natož zamykatelné. Ty, které nakreslil ing. Lucek, a pro které pan Koch vymyslel a udělal kování, vydržely přes 20 let.)

Na 60 MHz spektrometru odexperimentovali své diplomové práce pánové Jan Pich (analýza NMR spekter disubstituovaných benzenů, které připravil Dr. Jiří Hetflejš) a Jiří Dědina (asociace alkoholů). Jiří Dědina pak v aspirantuře pokračoval studiem intramolekulárního NOE (nukleárního Overhauserova efektu). Publikace dokončoval až v období tuhé politické "normalizace", a tak práce povinně publikované v Collections zůstaly bez odezvy, ačkoliv v řadě ohledů předběhly svou dobu (ing. J. Dědina, DrSc, který musel z ústavu odejít, se velice úspěšně věnuje atomové absorpci v Ústavu analytické chemie, Brno).

V upravených prostorách se postupně vystřídaly 60 a 80 MHz spektrometry a nakonec po malých stavebních úpravách i 100 MHz spektrometr, všechny z výroby Tesly Brno.

Koncepčně to byly výborné přístroje, jejich problémem však byla nízká spolehlivost daná dostupnou (zastaralou) součástkovou základnou.

Ten poslední, který byl v provozu až do r. 1991, někteří současníci možná pamatují (viz obr. 5).

Jeho pozoruhodností byl magnet, který vážil 4 tuny, měl obrovskou spotřebu proudu a vody na chlazení. Jednoduchá nebyla ani otázka, jak ho dostat do laboratoře. Problém tenkrát geniálně vyřešil pan J. Koch. Dal magnet na dřevěné trámy, protáhl lano chodbou přes celou budovu až ven na trávník a tam zapřáhl traktor. Když celou chodbu v suterénu budovy namydil tekutým mýdlem, magnet na trámech po něm dojel až na místo, aniž by poničil jedinou dlaždičku v chodbě. Samozřejmě 100 MHz spektrometr už byl pulzní a měl souřadnicový zapisovač. Kamenem úrazu byl počítač. Na pulzní spektrometr musíte mít



Obr. 5. 100 MHz spektrometr Tesla BS 567A (fotografii poskytnul doc. Ján Imrich, CSC, Košice), bez počítače

počítač, minimálně na to, aby prováděl digitální Fourierovu transformaci. Spektrometr byl vybaven počítačem ADT, který programy a data ukládal a četl z papírové děrné pásky. Celá paměť počítače pozůstávala z 8 kB slov o 8 bitech. Jelikož paměť byla ferritová, bylo nutné po každém výpadku proudu znovu nahrát jak celý operační systém tak NMR program z děrné pásky. Předtím ovšem bylo nutno ručně vygenerovat několik 8-bitových instrukcí v binárním strojovém kódu na načítání pásky. Fourierova transformace jednoho spektra, kterou na současných počítačích ani nepostřehnete, trvala kolem 8 minut. Zato software dokázal neuvěřitelné – detekoval IQ operátora podle chyb, které dělal. Nejpozoruhodnější hlášku dostal pan Miroslav Pultr (laborant, který obsluhoval většinu spektrometrů Tesla) když opakovaně místo čísla zadával písmeno. Pomalá tiskárna (elektrický psací stroj) mu písmenko po písmenku vyřukala „Ty jses takovy vul, ze kdyz se vedle Tebe da hrnek s vodou, stane se z nej hovezi polevka“.

Spektrometr i počítač byly několikrát upgradovány zejména v souvislosti s pokusy měřit selfdifusní koeficienty. Ve spolupráci s ÚPT (Ing. V. Bartušek) se Vráťovi Blechtovi podařilo v rámci kandidátské práce postavit potřebné zařízení a měřit difusní koeficienty podstatně dříve, než vznikla dnes tak populární DOSY metoda.

Po změně politiky, ÚOCHB zakoupil 100 MHz (kontinuální, tedy nepulsní) spektrometr od firmy Varian (kolem r. 1966). Díky dobrým vztahům s firmou se pak zrodila myšlenka

zřídit při ÚOCHB "Centrální NMR laboratoř", která by byla vybavena špičkovým spektrometrem a sloužila všem chemickým ústavům Akademie věd. K našemu obrovskému štěstí se podařilo myšlenku zrealizovat (mj. díky dr. V. Chvalovskému, který v té době šéfoval kolegiu chemických ústavů Akademie) a v r. 1979 zakoupit supravodivý multinukleární spektrometr Varian XL 200. (Byl to spektrometr s tehdy největší kapacitou paměťových disků. Výměnné disky o průměru asi 60 centimetrů a váze asi 3 kg měly kapacitu 5 MB. Jehličková tiskárna psala 16 znaků na řádek speciálního úzkého papíru v roličkách.) Podle rozvrhu měl náš ústav spektrometr k dispozici 24 hodin každý pátý den. Čas jsme plně využívali, ať už pátý den připadl na sobotu, neděli či vánoce nebo velikonoce. Tak jsme byli prvně vybaveni (každý pátý den) stejně dobře jako naši konkurenti ve světě a mohli jsme sami měřit NMR spektra různých atomových jader včetně křemíku-29.

V roce 1989 byl spektrometr upgradován (elektronika a počítač) a zakoupil se další 500 MHz spektrometr. Bylo ironií, že americká exportní omezení přežila naši sametovou revoluci a my nemohli dovézt se spektrometrem nejmodernější počítače. Naše měřicí možnosti se rozšířily nejenom díky dvěma spektrometrům, ale i tím, že z konsorcia ústavů, využívajících Centrální NMR laboratoř, odpadly ÚMCH a ÚFCH. Přesto tato kapacita našim potřebám přestávala stačit. Značnou překážkou byl i pevný rozvrh měřicího času a nutnost převážet vzorky mezi ústavy. Všechny tyto problémy zmizely v r. 2002, kdy se ústavu podařilo zakoupit NMR spektrometry Mercury 300 a Inova 500, který je kombinovaný s HPLC NMR i vybudovat vlastní dobře vybavenou NMR laboratoř.

Na popsanych spektrometrech jsme samozřejmě zajišťovali analytický servis, který byl triviální, na rozdíl od podobného servisu na ÚOCHB; organokřemičité sloučeniny měly v naprosté většině velmi jednoduchou strukturu. Vlastní tématica odpovídala celkovému zaměření oddělení organokřemičité chemie. Analyzovali jsme spektra systematických řad organokřemičitých sloučenin s cílem doplnit studie kolegů z oblasti IČ, dipólových momentů, substitučních a jiných vlivů o další poznatky vedoucí k pochopení specifického chování těchto látek. Brzy bylo jasné, že s omezením na ^1H NMR se moc dopředu nedostaneme, že je potřeba mít možnost měřit spektra ^{29}Si NMR. První, kdo NMR spektra křemíku změřil, byl P.C. Lauterbur, který je publikoval už v roce 1954. (Lauterbur měřil jako první ^{29}Si NMR spektra řady jiných jader, např. C-13). V roce 1965 se mi podařilo se s Lauterburem sejít na konferenci v Pittsburgu a "škemrat" na něm, jestli by nebyl ochotný pro nás měřit. Bylo ku prospěchu lidstva a jeho samotného, že to zdvořile odmítl. Zanedlouho po konferenci publikoval práce o "Zeugmatography", předchůdkyni dnešní NMR tomografie, za což se spolupodílí na Nobelově ceně za fyziologii a medicínu (2003).

Zlom pro nás nastal až někdy kolem roku 1971, kdy byl v Československu prof. M. Lippmaa (Tallinn), který upravil komerční NMR spektrometr pro měření ^{29}Si NMR spekter. Je ironií, že jsme smlouvu o spolupráci s tehdejším občanem Sovětského svazu napsali v období nejtvrďší politické "normalizace" anglicky tužkou na zadní stranu jídelního lístku v (dnes již neexistující) Klášterní vinárně. Smlouva byla naprosto jednoznačná: my dodáme látky, oni dodají měření, výsledky opublikujeme společně a v publikacích se budeme střídat, jednou budou první oni, podruhé my. Bohužel došlo k jisté zpronevěře z naší strany, ale podařilo se to vysvětlit a ve spolupráci jsme pak velice plodně řadu let pokračovali a společně publikovali řadu prací o substitučních vlivech na chemické posuny křemíku. "Naše" experimentální možnosti se asi po 5 letech rozšířily o japonský NMR spektrometr, který byl instalován ve spřáteleném ústavu ZIPC (Zentralinstitut für physikalische Chemie) ve východním Berlíně (dr. G. Engelhardt), kam bylo snazší cestovat. Tam jsme se věnovali zesilujícímu efektu kyslíku a sterickým vlivům.

Velikou posilou bylo, když někdy na začátku osmdesátých let nastoupil Vráťa Blechta na volné místo po panu M. Pultrovi. Aspiranturou při zaměstnání se podařilo obejít výhrady kádrového oddělení a získat dost času na řešení obtížného tématu jeho dizertace – měření

samodifuzních koeficientů na 100 MHz přístroji. Již v průběhu aspirantury byl Vráťa významnou podporou všech dalších projektů, zejména když se jednalo o vývoj nové experimentální metody.

Studium strukturních závislostí a jejich interpretace byly bodem sváru mezi dvěma rivaly, Dr. Krausem a Dr. Chvalovským. I když oni sami osobně tak nevystupovali, v zákulisí nebo přes jejich tlampače, jsme slyšeli "u Chvalovského, tam se pořád koumá, co ty (p-d) π orbitály dělají. Nikdo si na ně nemůže šáhnout, jsou to jenom spekulace". Na to měl Dr. Chvalovský zase standardní odpověď "věda začíná až když se ptáme proč, nikoliv u popisu". Pro nás měly představy o (p-d) π interakci při nejmenším objevnou cenu. Substituční vlivy obvykle klesají s rostoucím počtem vazeb mezi substituentem a atomem křemíku. Podle představ o (p-d) π interakci ale mohou být substituční vlivy zesíleny, jsou-li přenášeny na křemík touto interakci (např. přes O–Si vazbu).

Protože naše syntetické kapacity byly téměř nulové, sháněli jsme modelové sloučeniny, na nichž by bylo možno tuto hypotézu ověřit. Vhodnou modelovou řadu sloučenin jsem našel zapomenutou v šuplíku v Berlíně. Sloučeniny čekaly již několik let na změření, protože byly pro tamní NMR experty nezajímavé. Oni nebyli stoupenci (p-d) π interakce a měření pokládali za ztrátu času, protože substituent vzdálený o ještě jednu vazbu nemůže mít již žádný vliv. Podařilo se je přesvědčit, a tak jsme zjistili, že vložený atom kyslíku zhruba dvakrát zesiluje substituční efekt přesto, že prodlužuje přenosový řetězec. Příklad ukazuje, jak chybná je ve vědě jakákoliv předpojatost.

Vysoká citlivost k substituci naznačila, že by bylo možné používat křemík jako indikátor funkčních skupin (pro metodu se později ujal název ^{29}Si NMR tagging). Nápad se zrodil u nás v Praze, bylo jen nutno jej experimentálně ověřit, zjistit jestli v silylovaných polyfunkčních sloučeninách ^{29}Si NMR spektroskopie rozliší křemíky na různých skupinách. Dnes tato otázka vypadá jako banální, ale v té době se to nevědělo. Následující historka je příklad toho, jak by bylo dobře postupovat a čeho se při tom vyvarovat. Druhý den po zrodu myšlenky nám docent M. Černý (PřF UK) dodal vhodnou modelovou sloučeninu (1,6-anhydro- β -glukopyranosu), další den ji Dr. Josef Pola nasilyloval, třetí jsem s ní odletěl do Berlína, čtvrtý den jsem se vrátil s ^{29}Si NMR spektry zpátky a pátý den šla publikace do tisku. Spektra potvrzovala naše očekávání: cukr se třemi hydroxylovými skupinami měl po trimethylsilylaci v ^{29}Si NMR spektru 3 linie (obr. 6). Pět dní od nápadu k realizaci není špatné, ale pak jsme udělali chybu, která je poučná. Rukopis jsme odeslali do Tetrahedron Letters. Recenzent označil práci za vynikající, ale požadoval doplnění o informaci, která ze 3 linií patří kterému ze tří křemíků v molekule. (To byla v té době velmi obtížná otázka, vyřešili jsme ji až za několik let.) Rukopis jsme raději poslali do spřáteleného časopisu, práce vyšla v podstatě současně jako práce našeho konkurenta z univerzity, na které sídlil šéfredaktor Tetrahedron Letters. Naš konkurent nasilyloval tři jiné cukry. Z celkem dvanácti křemíků, měl jeden přiřazený signálu pomocí izotopické substituce. Pointa je v tom, že je nutno vážít, kam posílat články do časopisů i s ohledem na to, kde sídlí redaktor a kdo z konkurentů je na stejné univerzitě.

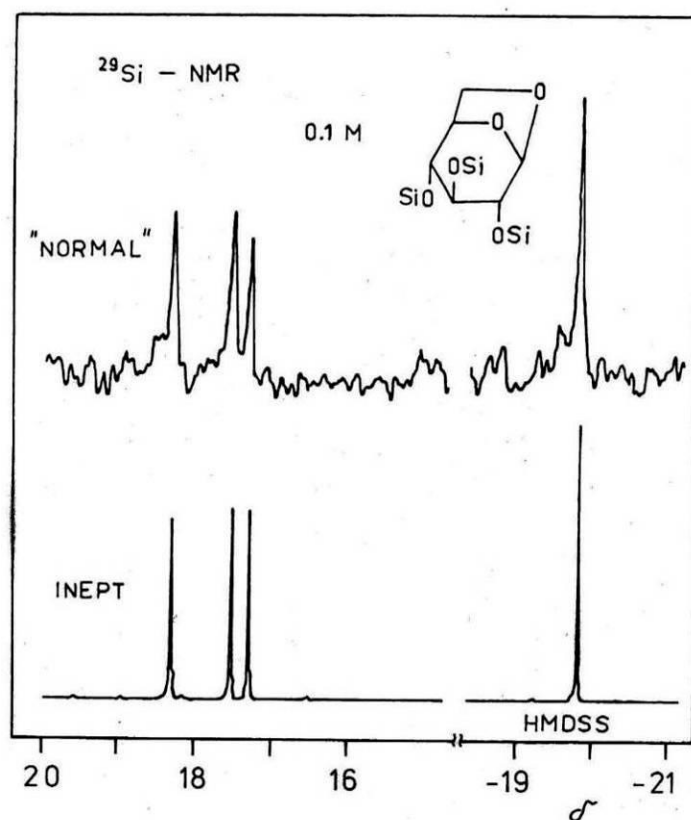
Naproti tomu jsme měli obrovské štěstí, že v roce 1979 dr. Morris objevil metodu INEPT, která velice zvyšuje citlivost NMR měření. My jsme si všimli, že v případě pro nás zajímavých trimethylsilylovaných sloučenin lze používat INEPT rutinně, s obrovským zvýšením citlivosti patrným z obr. 6, kde jsou uvedena spektra měřená za stejnou dobu tradičním způsobem a metodou INEPT. Očividné zlepšení poměru signálu k šumu představuje neskutečný nárůst produktivity práce, který nám umožnil celou řadu aplikací. Jestliže jsme v sedmdesátých letech potřebovali 1 gram látky, při měření metodou INEPT jsme se dostali do oblasti desítek miligramů. Tím šlo jednak měřit i vzácnější sloučeniny, jednak vyloučit efekty asociace nebo naopak pozorovat vlivy asociace s rozpouštědlem. Podařilo se nám dokázat, že rozdíly v chemických posunech křemíku u silylovaných steroidů

jsou způsobeny různou sterickou dostupností atomu kyslíku, přes který je křemík vázán ke steroidnímu skeletu.

Na silylaci nejrozličnějších řad sloučenin v rámci studia ^{29}Si -NMR taggingu spolupracovala řada našich chemiků, kromě již zmíněných to byli ing. Jaroslav Včelák, CSc, ing. Otto Pihar, ing. Jan Zelený, ing. Magda Kvíčalová a ing. Ludmila Soukupová. Řady sloučenin nám poskytli pracovníci jiných ústavů, např. cukry Dr. Eva Petráková a doc. Miloslav Černý, ligniny ing. Karel Brežný, steroidy ing. Alexander Kasal, DrSc. a další.

INEPT nám též dovolil hrát si s metodou DOSY na silylovaných cukrech. Ve ^{29}Si -INEPT-DOSY spektrech vidíme signály křemíku jednak rozdělené jako v ^{29}Si NMR spektrech podle chemických posunů, ale také v druhém směru rozdělené podle velikosti difusních koeficientů molekul, ve kterých se dané atomy křemíku nacházejí.

Tak krásně od sebe oddělíme spektra různých oligomerů, aniž by se ty látky od sebe fyzicky separovaly. Samozřejmě v LC-NMR dochází opravdu k dělení těchto látek a má to samozřejmě univerzální použití. My jsme vybaveni, na rozdíl od ostatních LC-NMR laboratoří, pro měření ^{29}Si -LC-NMR, máme možnost měřit i křemíková spektra uvnitř LC-NMR zařízení. Aplikací z oblasti silikonů je veliký počet, některé z nich jsou vystaveny na chodbě suterénu hlavní budovy ústavu.



Obr. 6. ^{29}Si NMR spektra trimethylsilylované 1,6-anhydro- β -D-glukopyranosy měřená normálním způsobem a INEPTem .

Jen pro ilustraci, světová produkce silikonů byla v roce 2002 odhadnuta na 850 tisíc tun; poslední dobou jsou akcentovány hlavně tzv. high-tech materiály, jejichž aplikace jsou nejrozličnějšího druhu, od sprejů na vlasy, povrchovou úpravu toaletního papíru až po těsnění betonových konstrukcí.

V průběhu let jsme se dotkli nad rámec servisních prací i chemie jiných sloučenin. Byly to zejména hydroxamové kyseliny, kde jsme objasnili struktury mnoha derivátů do té doby neprokázané.

Již jsem zmínil několik jmen kolegů, kteří byli s NMR na našem ústavu nějak spojeni. Těm, na které jsem zapomněl, a bylo jich mnoho jak z ústavu tak mimo něj, se omlouvám. Všem děkuji za plodnou spolupráci. Na následujícím obrázku (obr. 7) připomenu podobu alespoň těch, kteří se významně podíleli na našich pracích z oboru ^{29}Si NMR.



Obr. 7. Silylace měl na starosti dnešní doc. Ing. Jan Čermák, CSc, metody spinového inženýrství vyvíjel RNDr. Vratislav Blechta, CSc, přístroje upravoval a udržoval v chodu Ing. Jan Pelnař, CSc, a šéfoval nám čl. kor. Ing. Václav Chvalovský, DrSc.

Jak se bude dále vyvíjet NMR spektroskopie vysokého rozlišení ve světě je obtížné předvídat. Již v minulosti se zdálo, podobně jako nyní, že NMR již dosáhla mezí svých možností. S příchodem vícerozměrné spektroskopie ale nastala renesance a další podstatný rozmach NMR. Podobná druhá renesance NMR asi není v dohlednu. Výrobci se soustředí na konstrukční zlevňování spektrometrů a na zvýšení citlivosti. Zásadní změna by mohla nastat s nalezením vysokoteplotních supravodičů pro konstrukci magnetů. V měřítku našeho ústavu nemůže být vývoj NMR laboratoře odtržen od vývoje ostatních oborů pěstovaných na ústavu. Ing. Milan Kurfürst, CSc a ing. Jan Sýkora, CSc mají zájem o kombinaci LC-NMR a jejich zapojení do spolupráce se skupinou aerosolů a dalších.

V oblasti ^{29}Si NMR bych byl rád, kdyby se nám podařilo dokončit studium spin-spinových interakcí křemík–uhlík a křemík–křemík a vysvětlit, proč jsou NMR linie křemíku-29 podstatně užší než linie uhlíku-13.

Jan Schraml

Jak procházel život a lidé oddělením analytické chemie

Máme-li se podívat na historii dnešního oddělení analytické chemie, musíme je rozdělit na „analytiku“ vlastní (sídlící ve druhém patře hlavní budovy) a NMR laboratoř (v suterénu téže budovy). Jejich historie jsou značně odlišné, stejně tak jako naše možnosti je popsat. Dnes již není mezi zaměstnanci ústavu nikdo, kdo by prožil celou historii analytiky osobně; nikdo z nás nemá osobní zkušenost s tím, co by prof. Ondra Wein nazval pravěkem analytiky. Musíme proto těžit ze vzpomínek bývalých kolegů. Naproti tomu vyprávění o NMR na našem ústavu mohlo být velice podrobné, a proto je přesunuté do samostatné kapitoly.

Už tu bylo několikrát zmíněno, že ústav byl založen v roce 1960 odštěpením od ÚOCHABu. S jistou dávkou cynismu a zjednodušení se dá říci, že tehdejší všemocný vědecký sekretář Akademie a ředitel ÚOCHABu, prof. František Šorm, se odvděčil svému kamarádovi Volod'ovi Bažantovi a zřídil mu vlastní ústav. Šormovu ÚOCHABu to zároveň slibovalo snížení nebezpečí požáru a odstranění zdroje koroze (v laboratořích prof. Bažanta se studovala přímá syntéza silikonů z chlorsilanů, které dokáží zkorodovat všechny materiály).

Oslovení „Volod'o“ bylo samozřejmě vyhrazeno lidem z nejbližšího okolí prof. Vladimíra Bažanta. Pro nás, tehdejší aspiranty, byl prof. Bažant velkou osobností se značným a pečlivě pěstovaným majestátem, jednotně podporovaným všemi vedoucími oddělení. Na porady přicházel prof. Bažant vždy včas, ale vždy jako poslední a s jeho příchodem porada ihned začínala. Podobně jako prof. Šorm i prof. Bažant každý týden navštívil jedno oddělení ústavu, kde probral poslední pracovní výsledky s každým vědeckým pracovníkem.

Než jsme se v r. 1964 přestěhovali do Suchdola, chemické analýzy pro nás zajišťovalo Analytické oddělení ÚOCHABu. Dva pracovníci, Dr. Jiřinec a Dr. Houda, zde dělali analýzy pro potřeby našeho ústavu, zejména ty silikonářské. Oni, spolu s panem Neubertem (C,H-analýza), pak byli základem naší vlastní analytiky.

V roce 1961 došlo k masivnímu náboru mladých lidí. Téměř všichni, které zde vzpomínáme, byli přijati právě v této vlně. Odborná oddělení se konstituovala do podoby, která pak v podstatě vydržela až do r. 1989. Chemická oddělení byla dvě, jejich názvy se v průběhu doby měnily, ale v podstatě to byla stále oddělení Dr. M. Krause a oddělení Dr. V. Chvalovského. Zatímco v oddělení Dr. Krause pracovala již v r. 1961 řada zkušených pracovníků (např. Dr. K. Kochloefl, Dr. L. Beránek, patřila sem i laboratoř přímých syntéz prof. V. Bažanta, Dr. J. Joklík, ing. O. Kruchňa), musel Dr. Chvalovský pro svoji koncepci fyzikálně–chemického nebo fyzikálně–organického studia organokřemičitých sloučenin nabírat čerstvé nezkušené absolventy pro studium IČ (Dr. M. Jakoubková), dipólových momentů (Dr. V. Vaisarová), NMR (Dr. J. Schraml). Aspiranti (Dr. J. Hetflejš, Dr. J. Hradil) v chemických oborech (organická syntéza, chemická technologie) mohli mít za školitele zkušenější pracovníky ústavu, v oblasti fyzikální chemie a spektroskopie byly školicími pracovišti jiné ústavy.

Po přestěhování do Suchdola se oddělení analytické chemie rozrostlo o větší počet lidí; důležitá byla zejména akvizice ing. Zdeňka Šíra (1964). Pod jeho vedením analytika doznala největšího rozmachu a uznání zejména v souvislosti s řešením otázek technologie výroby kyseliny tereftalové. Analytika asi prošla ze všech oddělení nejvíce reorganizacemi. Ne vždy byly reorganizace vyvolány skutečnými odbornými nebo věcnými potřebami ústavu, často se tím řešily různé personální otázky. V době jejího největšího rozmachu pracovalo na analytice 18 lidí. V průběhu let se zde vystřídala řada vedoucích a univerzálních analytických chemiků (Jakubec, Vilímec, Janšta, Svitáková, Dušková, Valentová, Balejová a další). Řada analytických metod, které byly v arsenálu analytiky, se již u nás neprovozuje. Např. polarografie (pí. L. Jadrníčková), IČ spektroskopie (Dr. R. Řeřicha), C,H analýza (pánové

O. Neubert a R. Šída); požadavky na elementární analýzy jsou tak malé, že by dnes nebylo rentabilní ji provozovat).

Řada pracovníků analytiky byla nucena spolupracovat na epochálním díle "Organosilicon Compounds". Toto rozsáhlé dílo (o celkovém počtu 21 svazků a asi 11 tisících stran) bylo ve své době velice významné a zajistilo ústavu světové renomé v "silikonářských" kruzích. Pro zapojené pracovníky (vedle analytiků to byli všichni vysokoškoláci z oddělení Dr. Chvalovského a z laboratoře přímých syntéz) to však byla značná pracovní zátěž, kterou si dnešní svobodomyšlní absolventi jen těžko mohou představit. Každý byl povinen (v rámci pracovních povinností) pravidelně číst a excerptovat jemu přidělené (2 – 4) odborné časopisy a kapitoly Chemical Abstracts. Odborným článkům a v nich uvedeným organokřemičitým sloučeninám bylo nutno přiřadit kódy podle způsobu přípravy, reakce nebo měřených fyzikálních vlastností. Všechny publikované elementární analýzy musel pan O. Neubert na kalkulačce přepočítat. Přehledy od nás shromažďovala pak paní E. Šandarová do kartotéky. Ony slavné "Organosilicon Compounds" vlastně nebyly nic jiného než tato kartotéka celá přepsaná na psacím stroji do souvislého textu. Přepisoval ji jediný člověk – "malá Jana" (tj. dnešní paní Karasová).

Součástí analytiky byla poměrně velká skupina plynové chromatografie. Kraloval jí pan Miloslav Švihla a jeho dámy (J. Wolfová, D. Řečinská, I. Schelová, V. Kanková, A. Kadlecová, J. Lněničková, J. Kubešová a další) se střídaly téměř v dvousměnném provozu na čtyřech nebo pěti chromatografech. Odborný dohled nad chromatografií měl Dr. R. Komers, který do analytiky někdy organizačně patřil, jindy zase ne. Dnes se nám čistá plynová chromatografie smrskla na jeden chromatograf. Naproti tomu provozujeme dva přístroje GC-MS. Starší přístroj, který začal na ústavu provozovat Dr. R. Řeřicha, spravuje dnes Dr. J. Včelák (i když sám organizačně nespadá do oddělení analytické chemie). S novějším přístrojem řeší Dr. J. Karban analytické otázky související zejména s různými ekologickými problémy řešenými na ústavu.



Oddělení analytiky v roce 2009

Zajímavá byla historie kapalinové chromatografie, přesněji HPLC. S HPLC si začal hrát aspirant Milan Minárik (dnešní úspěšný podnikatel) kolem roku 1970. Jeho na kolenou vyrobený přístroj byl nahrazen komerčním přístrojem. Dnes provozují HPLC na novém semi-preparativním chromatografu (Watrex), inženýrky M. Bártlová a E. Macháčková. Druhý HPLC je v systému LC-NMR, jak o tom je zmínka ve spojení s NMR laboratoří.

V neposlední řadě provozujeme zhruba od roku 1988 atomovou absorpční spektroskopii, kterou se zabývají inženýrky L. Soukupová a E. Macháčková. Od r. 1991 spadá do analytiky laboratoř NMR spektroskopie, ale o té podrobněji v samostatné kapitole.

Tolik asi o tom, jak se vyvíjela analytika personálně. Analytika je servisním útvarem, a tudíž se musí přizpůsobovat aktuálním potřebám ústavu. To je její hlavní odborná koncepce. Ponechání možnosti zabývat se navíc vlastním výzkumem je výhodné pro všechny. Pracovníci mají jistý pocit svobody, ústav snadněji získává kvalifikované pracovníky s vyhraněnými odbornými zájmy, grantové projekty přinášejí ústavu další prostředky a volná kapacita je lépe využívána. Nároky na analytický servis jsou totiž velice nerovnoměrné. Vedle období, kdy vzorků k analýze je velice mnoho (např. konec roku), máme období "okurkových sezon". V těch se mohou pracovníci analytiky věnovat vlastnímu výzkumu. V současné době řešíme čtyři vlastní grantové projekty.

Jan Schraml a Jan Horáček

Jmenný rejstřík

A

Aim K. · 20, 60, 64, 66, 68
Andělová L. · 49

B

Babič A. · 67
Balejová J. · 92
Bártlová M. · 94
Bažant V. · 4, 5, 7, 13, 14, 18, 20, 29, 36,
38, 52, 72, 86, 92
Bejblík P. · 31
Bendová M. · 67, 68
Beránek J. · 16, 20, 31
Beránek L. · 11, 16, 92
Bernatová S. · 57, 62, 66
Biderman J. · 40
Blazevska-Gilev J. · 82
Blechta V. · 87, 88, 91
Boublík T. · 52, 56, 57, 58, 59, 60, 63, 64
Brož Z. · 9, 11, 41
Brožek J. · 21, 22
Brus D. · 49
Bulička J. · 40, 41, 42
Bunganič R. · 27, 28

C

Čársky M. · 31, 32, 41
Čech B. · 31
Čermák J. · 4, 9, 11, 16, 20, 21, 22, 31, 33,
40
Čermák Jan ml · 91
Černý A. · 62
Černý Č. · 52
Červenka J. · 16, 40, 41, 42
Chvalovský V. · 4, 7, 29, 77, 88, 89, 91,
92, 93
Cihla Z. · 42

D

Daneš L. · 36
Dědina J. · 86

Dohnal J. · 36
Drahoš J. · 18, 22, 27, 28, 33, 61
Dřínek V. · 82
Dundáček F. · 30
Dušková M. · 92
Džumbová L. · 48, 49, 50

E

Eibl J. · 57
Endršt M. · 8, 40, 41
Erdős E. · 33, 51, 52

F

Fajgar R. · 77, 82
Fialová M. · 13, 15, 27, 31
Foršt V. · 31
Frankenberger A. · 31
Fridrich M. · 27
Fried V. · 51, 52
Fujasová M. · 27

G

Galík A. · 82
Galíková A. · 82
Gardavský A. · 41
Gogová Z. · 27
Grigar K. · 40

H

Hála E. · 4, 5, 11, 20, 38, 51, 52, 56, 57,
59, 60, 63, 64, 66, 69
Hanika J. · 5, 18
Hartman M. · 9, 10, 11, 12, 13, 20, 22, 34
Havlica J. · 26, 27
Havlíček A. · 16, 21, 22, 40
Havlín V. · 31
Havlínová-Haklová A. · 30
Herman Z. · 4
Hetflejš J. · 4, 18, 86, 92
Heyberger A. · 18, 40, 41, 42
Hlavatý K. · 57, 60, 64
Hloušek K. · 57

Holler V. · 31
Horáček J. · 94
Horák M. · 77
Horyna V. · 32, 70
Houda M. · 92
Hradil J. · 92
Hrubý M. · 36
Huml M. · 9, 10

J

Jadrníčková L. · 92
Jakoubková M. · 77, 81, 86, 92
Jakubec K. · 92
Janšta L. · 92
Jež J. · 31
Jiříčný V. · 4, 41, 43, 44
Jirinec S. · 92
Joklík J. · 29, 92
Jonáš K. · 41
Jůza J. · 21

K

Kadlec M. · 57
Kadlecová A. · 93
Kanková V. · 93
Karasová J. · 93
Karban Jindřich · 93
Karban Jiří · 40, 41
Kaštánek F. · 4, 19, 20, 29, 31, 41
Kasztura L. · 61
Kchachatryan L. · 82
Kiefmann J. · 21
Koch J. · 8, 30, 77, 86, 87
Kochloefl K. · 7, 92
Kocurek J. · 31, 32
Kohoutová H. · 31
Kolafa J. · 65, 66
Kolář V. · 8, 10, 11, 17, 38, 39, 40, 41
Kolařík F. · 41
Komárek J. · 30
Komers R. · 93
Kopecký J. · 40
Kratochvíl J. · 13, 29, 57
Kraus M. · 4, 7, 16, 31, 72, 89, 92
Křišťál J. · 44
Kruchňa O. · 29, 92
Kubát P. · 77, 81
Kubešová J. · 93

Kubička R. · 7
Kugler J. · 30
Kulaviak L. · 27
Kupčík J. · 82
Kurfürst M. · 91
Kuthan K. · 41
Kvíčalová M. · 90

L

Landau J. · 8, 35, 41
Lehovec J. · 40, 41
Leitner J. · 49
Lepeška B. · 29
Lhoták V. · 61
Linek J. · 56, 57, 60, 64, 66
Lísal M. · 66, 67, 68
Lněničková J. · 93
Lucek F. · 30, 86

M

Macháčková E. · 94
Malaník V. · 31
Maléterová-Purová Y. · 16, 22
Malijejský A. · 68
Malý J. · 24
Marek J. · 35, 69
Mařík P. · 21, 40
Masák V. · 77
Melichar K. · 40
Menzel T. · 24
Mertl I. · 57
Mikeš J. · 21, 22
Mikšovský J. · 57, 59, 60
Minárik M. · 94
Mitschka P. · 8, 20, 24, 27, 69
Mokošín M. · 40
Moravec P. · 48
Morávková L. · 67

N

Nekola J. · 16, 21
Němeček M. · 40
Neubert O. · 92, 93
Neužil L. · 20
Nezbeda I. · 57, 60, 64, 65, 66, 67, 68
Nežerka M. · 69

Novák Z. · 31
Nováková S. · 13, 24, 27
Novosad J. · 11, 13, 18, 20
Novosad Z. · 11, 12, 13, 14, 29, 35, 57
Nývlt J. · 52

O

Ondráček J. · 50
Orvalho S. · 27

P

Papoušková Z. · 77
Pata J. · 31
Pavlíček J. · 63
Pavlík O. · 77
Pekárek O. · 21, 22, 39
Pelnař J. · 91
Pěnkavová V. · 27
Pich J. · 86
Pick J. · 51, 52
Pihar O. · 90
Plzáková M. · 27, 28
Pokorná D. · 82
Pola J. · 81, 82, 89
Polák J. · 56, 57
Polednová J. · 57, 60
Ponec R. · 66
Pouchlý J. · 52
Předota M. · 66, 68
Přenosil J. · 11, 41
Procházka F. · 40
Procházka J. · 8, 36, 39, 41, 42
Procházka K. · 57, 60
Psutka Š. · 66
Pultr M. · 87, 88
Punčochář M. · 21, 22, 27, 33

R

Radvanský A. · 13, 18, 29
Rajlich J. · 22
Rathouský B. · 30
Rathouský J. · 29
Řečinská D. · 93
Řeháková M. · 9, 11, 13, 41
Reiser A. · 51, 52
Řeřicha R. · 92, 93

Říha Z. · 30
Rod V. · 11, 12, 13, 20
Rosenbaum M. · 70
Růžička M. · 13, 15, 26, 27
Rylek M. · 9, 11, 12, 13, 41, 52

S

Šandarová E. · 93
Schelová I. · 93
Schmidt O. · 42
Schneider P. · 4, 7, 18, 31, 32, 69, 76
Schraml J. · 91, 92, 94
Schwarz J. · 47, 49
Sedláčková M. · 82
Sedláková Z. · 68
Selucká-Hronková J. · 31
Selucký K. · 21, 22, 33
Setínek K. · 11, 16
Šída R. · 93
Šimčík M. · 26, 27
Simeonova S. · 82
Šír Z. · 12, 16, 92
Skřivánek J. · 8
Slezák J. · 27, 40
Slovák J. · 66
Smolík J. · 13, 30, 50
Šnajdaufová H. · 31
Sobolík V. · 23, 24, 25, 27
Sochorová J. · 29
Šolcová O. · 31
Šorm F. · 7, 36, 83, 86, 92
Součková H. · 31
Souhrada F. · 41
Soukup Z. · 29
Soukupová-Strnadová L. · 12, 13, 16, 90, 94
Sovová H. · 9, 41, 43
Standart G. · 4, 7, 8, 9, 10, 11, 15, 35, 38, 39, 41, 51, 56
Staněk V. · 4, 11, 39, 40, 41, 42, 43, 45
Stanovský P. · 27
Steidl H. · 7, 11, 41
Steiner L. · 41
Stejskal M. · 21, 22
Stricker J. · 40
Strnad M. · 66
Sulek B. · 21, 22
Švihla M. · 93
Svitáková R. · 92

Svoboda K. · 32, 34
Sýkora J. · 91

T

Tesař A. · 30, 40
Tichý J. · 41
Tihon J. · 23, 25, 27
Tomanová D. · 31
Tomovska R. · 82
Tovčigrečko V. · 27
Tříška B. · 47, 48, 66
Trnka O. · 32, 34

U

Uchytíl P. · 61
Ulbrecht J. · 4, 11, 13, 37
Urbanová M. · 82

V

Vacek K. · 82
Vachalovský P. · 77
Vaisarová V. · 92
Valentová P. · 92
Vašák F. · 41
Včelák J. · 29, 90, 93
Večeř M. · 27
Vejražka J. · 26, 27
Vejrosta J. · 57, 59, 60

Veselý V. · 31, 32
Vilímeček J. · 92
Vítek J. · 77, 81
Vítovec J. · 12, 30, 46
Vlček L. · 68
Vlna K. · 29
Vrba J. · 16, 21, 27
Vychodil P. · 43
Vychodilová H. · 43

W

Wagner Z. · 61, 65, 66, 67, 68
Wein O. · 11, 13, 18, 23, 24, 27, 92
Wičar S. · 59
Wichterle I. · 11, 20, 39, 55, 56, 59, 60, 64,
66, 67, 71
Wichterle K. · 11, 13, 24, 27, 36, 48, 49
Wichterlová J. · 24
Wolfová J. · 93

Z

Zahradník J. · 13, 20, 27
Ždímal V. · 47, 49
Zdražil M. · 4
Zelený J. · 90
Zemek A. · 13, 29
Zíma M. · 12, 29

Seznam pracovníků ÚCHP k 31.12.2009

Příjmení	Jméno	Titul	Oddělení
Aim	Karel	Ing.CSc.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Andělová	Ludmila	Mgr.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Balabánová	Jana	Ing.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Bartlová	Daria		Laboratoř laserové chemie
Bártlová	Milena	Ing.	Oddělení analytické chemie
Baszczyński	Martin	Ing.	Oddělení vícefázových reaktorů
Beer	Pavel		Laboratoř procesů ochrany prostředí
Bendová	Magdalena	Ing.Ph.D.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Benešová Ševčíková	Irena	Bc.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Bernard	Martin		Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Bernatová	Svatoslava		Termodynamická laboratoř E. Hály
Blechta	Vratislav	RNDr.CSc.	Oddělení analytické chemie
Bolyó	Juraj	Ing.	Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Brus	David	Ing.Ph.D.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Brustmann	Jaroslav		Laboratoř procesů ochrany prostředí
Církvá	Vladimír	Ing.Dr.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Cuřínová	Petra	Ing.Ph.D.	Oddělení analytické chemie
Čermák	Jan	Mgr.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Čermák	Jan	Doc.Ing.CSc.	Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Červenka	František		THS-údržba
Červenková Šťastná	Lucie	Ing.Ph.D.	Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Drahoš	Jiří	Prof.Ing.DrSc.	Oddělení vícefázových reaktorů
Dřínek	Vladislav	RNDr.CSc.	Laboratoř laserové chemie
Dytrych	Pavel	Ing.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Fajgar	Radek	RNDr.CSc.	Laboratoř laserové chemie
Fialová	Marie	Ing.CSc.	Oddělení vícefázových reaktorů
Fišerová	Eva	Mgr.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Fridrich	Miroslav	Ing.	Výpočetní skupina
Gaállová	Jana	RNDr.Ph.D.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Galíková	Anna	Ing.CSc.	Laboratoř laserové chemie
Gogová	Zuzana	Ing.Ph.D.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Goliáš	Jiří		Mechanická dílna
Gruber	Václav	Ing.CSc.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Gulková	Daniela	Ing.CSc.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Hájek	Milan	Ing.CSc.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Hanika	Jiří	Prof.Ing.DrSc.	Ředitel ústavu
Hanková	Libuše	Ing.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Hartman	Miloslav	Doc.Ing.DrSc.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Havlica	Jaromír	Ing.Ph.D.	Oddělení vícefázových reaktorů
Hejtmánek	Vladimír	Ing.CSc.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství

Příjmení	Jméno	Titul	Oddělení
Hetflejš	Jiří	Ing.DrSc.	Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Heyberger	Aleš	Ing.CSc.	Oddělení separačních procesů
Holub	Ladislav	Ing.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Holub	Josef		THS-údržba
Horáček	Jan	prom.chem.	Oddělení analytické chemie
Horálek	Josef		THS-údržba
Chudoba	Antonín		THS-údržba
Izák	Pavel	Ing.Ph.D.	Oddělení separačních procesů
Jandová	Věra	Ing.	Laboratoř laserové chemie
Jarmarová	Veronika	Ing.	Oddělení separačních procesů
Jeremiáš	Michal	Ing.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Jeřábek	Karel	Ing.CSc.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Jíra	Jaroslav		Sekretariát ředitele
Jirátová	Květuše	Ing.CSc.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Jirkovský	Jaromír	RNDr.CSc.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Jirsák	Jan	RNDr.Ph.D.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Jirsová	Eva	PhDr.	Knihovna
Jiřičný	Vladimír	Ing.CSc.	Oddělení separačních procesů
Kadlecová	Alena		Oddělení separačních procesů
Kaluža	Luděk	Mgr.Ph.D.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Kalužová	Iveta		Sekretariát ředitele
Kameníková	Petra	Ing.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Karasová	Jana		Sekretariát ředitele
Karban	Jindřich	Mgr.Ph.D.	Oddělení analytické chemie
Karčík	David		Oddělení separačních procesů
Kašťánek	František	Prof.Ing.DrSc	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Kaura	Jan		THS-MTZ
Khramkov	Oleksiy		Laboratoř procesů ochrany prostředí
Klempa	Jan	Ing.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Klobás	Jan		Mechanická dílna
Klusoň	Petr	Doc.Ing.Dr.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Kmentová	Hana	Ing.Ph.D.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Kohout	Martin		Mechanická dílna
Kohoutová	Marie	Ing.	Oddělení separačních procesů
Komm	Miroslav		Mechanická dílna
Koptová	Marta		Oddělení separačních procesů
Kordač Petronilho Orvalho	Sandra Cristina	Ph.D.	Oddělení vícefázových reaktorů
Kratochvíl	Jaroslav		THS-údržba
Kratochvílová	Veronika		THS-účetny
Krejcar	Marek		Sekretariát ředitele.
Krejčíková	Simona	Ing.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Krejčíková	Eva		THS-účetny
Krupková	Alena	Ing.Ph.D.	Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Krýsa	Josef	Prof.Ing.Ph.D.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství

Příjmení	Jméno	Titul	Oddělení
Křišťál	Jiří	Ing.Ph.D.	Oddělení separačních procesů
Kubešová	Jarmila		Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Kudrna	Vladimír		Mechanická dílna
Kugler	Josef	Ing.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Kulaviak	Lukáš	Ing.	Oddělení vícefázových reaktorů
Kuncová	Gabriela	Ing.CSc.	Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Kupčík	Jaroslav	RNDr.	Laboratoř laserové chemie
Kurfürst	Milan	Ing.Ph.D.	Oddělení analytické chemie
Landová	Renáta		THS-účetny
Levdanski	Valeri	Ing.DrSc.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Linek	Jan	Ing.CSc.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Lísal	Martin	Doc.Ing.DSc.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Ludvíková	Jana	Ing.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Lvovská	Alena		Sekretariát ředitele
Macháčková	Eva	Ing.	Oddělení analytické chemie
Machanová	Karolina	Ing.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Maléterová	Ywetta	Ing.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Malijevský	Alexandr	Mgr.Ph.D.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Martincová	Jana		THS-účetny
Maščeník	Július	Bc.	Oddělení separačních procesů
Matějková	Martina	Bc.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Matějová	Lenka	Ing.Ph.D.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Mikoláš	Jan	Ing.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Moravec	Pavel	Ing.CSc.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Morávková	Lenka	Ing.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Morozová	Magdalena	Ing.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Nezbeda	Ivo	Prof.RNDr. DrSc.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Novák	Pavel	Ing.	Oddělení vícefázových reaktorů
Novák	Zdeněk	Ing.	THS-účetny
Nováková	Stanislava		Oddělení vícefázových reaktorů
Nulíček	Josef		Výpočetní skupina
Ondráček	Jakub	Ing.Ph.D.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Ondráčková	Lucie	Ing.Ph.D.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Pařez	Stanislav	Mgr.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Pavlíček	Jan	Ing.CSc.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Pekárek	Vladimír	Ing.CSc.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Pěnkavová	Věra	Ing.	Oddělení vícefázových reaktorů
Petrychkovych	Roman	Ing.	Oddělení separačních procesů
Podzimek	Jan		THS-údržba
Pohořelý	Michael	Ing.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Pokorná	Dana	Ing.	Laboratoř laserové chemie
Pola	Josef	RNDr.DrSc.	Laboratoř laserové chemie
Poloncarzová	Magda	Ing.	Oddělení separačních procesů
Pomykač	Vladimír		Laboratoř procesů ochrany prostředí

Příjmení	Jméno	Titul	Oddělení
Ponec	Robert	Prof.RNDr. DrSc.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Posel	Zbyšek	Mgr.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Potměšilová	Jarmila		THS-účetny
Předota	Milan	Mgr.Dr.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Punčochář	Miroslav	Ing.DSc.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Relich	Stanislav	Mgr.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Rochová	Kristina	Ing.Ph.D.	Oddělení separačních procesů
Rousková	Milena	Ing.Ph.D.	Oddělení separačních procesů
Růžička	Marek	Doc.Ing.CSc.	Oddělení vícefázových reaktorů
Rychtáriková	Renata	Ing.	Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Řezníčková	Jiřina	Ing.Ph.D.	Oddělení separačních procesů
Římnáčová	Daniela	Ing.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Sajfrtová	Marie	Ing.Ph.D.	Oddělení separačních procesů
Sedláková	Zuzana	Ing.Ph.D.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Seifert	Michal		Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Setničková	Kateřina	Ing.Ph.D.	Oddělení separačních procesů
Schneider	Petr	Doc.Ing.DrSc.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Schraml	Jan	Prof.RNDr. DrSc.	Oddělení analytické chemie
Schwarz	Jaroslav	Ing.CSc.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Skoblia	Siarhei	Ing.Ph.D.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Slezák	Jiří	Ing.	Mechanická dílna
Smolík	Jiří	Ing.CSc.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Sobek	Jiří	Ing.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Sobolík	Václav	Prof.Ing.DrSc.	Oddělení vícefázových reaktorů
Součková	Helena		Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Soukup	Karel	Ing.Ph.D.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Soukupová	Ludmila	Ing.	Oddělení analytické chemie
Soukupová	Krasimira	Ing.Ph.D.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Sovová	Helena	Ing.CSc.	Oddělení separačních procesů
Staněk	Vladimír	Ing.DrSc.	Oddělení separačních procesů
Stanovský	Petr	Ing.Ph.D.	Oddělení vícefázových reaktorů
Stavárek	Petr	Ing.Ph.D.	Oddělení separačních procesů
Stejskal	Petr		Mechanická dílna
Stopka	Pavel	Ing.CSc.	Laboratoř laserové chemie
Storch	Jan	Ing.Ph.D.	Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Strašák	Tomáš	Ing.	Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Strnad	Miloslav	Bc.	Výpočetní skupina
Svoboda	Karel	Doc.Ing.CSc.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Sýkora	Jan	Ing.Ph.D.	Oddělení analytické chemie
Šabata	Stanislav	Ing.	Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Šíma	Vladimír		Mechanická dílna

Příjmení	Jméno	Titul	Oddělení
Šimčík	Miroslav	Ing.Ph.D.	Oddělení vícefázových reaktorů
Šnajdaufová	Hana	Ing.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Šolcová	Olga	Ing.CSc.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Štefancová	Lucia	Ing.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Šyc	Michal	Ing.Ph.D.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Táborská	Zdeňka		Oddělení analytické chemie
Tihon	Jaroslav	Ing.CSc.	Oddělení vícefázových reaktorů
Topka	Pavel	Ing.Ph.D.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Tošnarová	Markéta	Ing.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Tovchigrechko	Valentin	Ing.	Oddělení vícefázových reaktorů
Trávníčková	Tereza	Ing.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Trnka	Otakar	prom.mat.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Trojan	Luboš		THS-údržba
Uchytíl	Petr	Ing.CSc.	Oddělení separačních procesů
Urbanová	Markéta	Ing.	Laboratoř laserové chemie
Václavek	Tomáš	Ing.	THS-MTZ
Vachušková	Ilona		THS-účetárny
Vajglová	Zuzana	Bc.	Oddělení separačních procesů
Včelák	Jaroslav	Ing.CSc.	Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Vejražka	Jiří	Ing.Ph.D.	Oddělení vícefázových reaktorů
Veselý	Václav	Ing.CSc.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Veselý	Martin	Bc.	Oddělení separačních procesů
Vilimovská	Emília		Knihovna
Vít	Zdeněk	Ing.CSc.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Vlček	Dalibor		Oddělení separačních procesů
Vlček	Lukáš	Mgr.Ph.D.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Vlková	Leona	Bc.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Vobecká	Lucie	Ing.	Oddělení vícefázových reaktorů
Vodička	Petr	Ing.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Vokatá	Barbora	Mgr.	Oddělení separačních procesů
Volaufová	Eva	Ing.	Oddělení separačních procesů
Vosecký	Martin	Ing.Ph.D.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Vrbová	Hana	Bc.	Oddělení nových procesů v chemii a biotechnologii
Vychodilová	Hana	Ing.CSc.	Oddělení separačních procesů
Wagner	Zdeněk	Ing.CSc.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Wein	Ondřej	Prof.Ing.DrSc.	Oddělení vícefázových reaktorů
Wichterle	Ivan	Ing.DrSc.	Termodynamická laboratoř E. Hály
Záloha	Petr	Ing.	Oddělení separačních procesů
Zdražil	Miroslav	Ing.DrSc.	Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Zedníková	Mária	Ing.Ph.D.	Oddělení vícefázových reaktorů
Ziková	Naděžda	Mgr.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Zychová	Markéta	Bc.	Laboratoř procesů ochrany prostředí
Ždímal	Vladimír	Ing.Dr.	Laboratoř chemie a fyziky aerosolů



Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i.
Rozvojová 135, 165 02 Praha 6
www.icpf.cas.cz