FAKULTA
CHEMICKO-INŽENÝRSKÁ
VŠCHT PRAHA

Studentská Vědecká Konference

2023

23. 11. 2023

SBORNÍK ANOTACÍ

Fakulta chemicko-inženýrská

Organizační tým

FAKULTNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOŘI

402 **Ústav analytické chemie**

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

403 **Ústav fyzikální chemie**

doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

409 **Ústav chemického inženýrství**

doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

444 **Ústav fyziky a měřicí techniky**

RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

446 **Ústav matematiky, informatiky a kybernetiky**

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

23/11
2023

STUDENTSKÁ VĚDECKÁ KONFERENCE

FCHI VŠCHT

Zlatí sponzoři

ZENTIVA

ORLEN Unipetrol

PRO.MED.CS Praha a.s.

Stříbrní sponzoři

SKODA

NICOLET CZ MOLECULAR SPECTROSCOPY

MSD

Bronzoví sponzoři

mondi

PTIK INSTRUMENTS

pinflow energy storage

SIDAT AUTOMATION-INFORMATICS

ÚJV

SPOLCHEMIE

ANAMET ANALYTICAL & MEASURING & TESTING

EATON Powering Business Worldwide

KEMWATER PROCHEMIE

LOVOCHEMIE

SIAD

SPT

synthos

HUMUSOFT

MathWorks

RMI

Altium

BR&E

crytur

JSP

Kapaji

mega

Ranido

LIM LABORATORY IMAGING

pragolab

SHIMADZU Excellence in Science

SPECION s.r.o. LABORATORNÍ A ZKUŠEBNÍ TECHNIKA

MarbleMat

EXPS

onsemi

RENISHAW apply innovation

HOBEN

Pilsner Urquell

vwr part of avantor

vesmír

Skupina ORLEN Unipetrol

je největší rafinérskou a petrochemickou společností v Česku

Kde nás najdete?

Záluží u Litvínova
Kralupy nad Vltavou
Pardubice
Neratovice
Praha
Brno
Otrokovice

+

ORLEN BENZINA

čerpací stanice
ORLEN Benzina

Co děláme?

Rafinérie
Petrochemie
Výzkum
Velkoobchod
Maloobchod
Logistika

O své zaměstnance se umíme postarat!

Nabízíme příspěvek na stravování, kulturu, sport, penzijní připojištění a životní pojištění.

Poskytujeme slevu na nákup pohonných hmot.

Dbáme na rovnováhu mezi pracovním a osobním životem.

Podpora vzdělávání, komunity nebo životního prostředí je pro nás stejně tak důležitá.

Přidejte se k nám

www.orlenunipetrol.cz
kariera@orlenunipetrol.cz

Více informací o nás najdete na:

ORLEN Unipetrol

Zařaďte se po škole k hrdinům dnešní doby

Právě teď hledáme: absolventy VŠ chemického nebo technického směru

Proč začít pracovat u nás?

- Jsme jediný zpracovatel ropy v ČR, největší výrobce plastu a vlastník největší sítě čerpacích stanic ORLEN Benzina. A také vlastníme hokejový klub HC Verva Litvínov.
- Jsme největším zaměstnavatelem v Ústeckém kraji a na trhu úspěšně působíme již více než 80 let. Náš tým tvoří v ČR bezmála 6 000 zaměstnanců.
- Nabízíme bezkonkurenční benefity: osobní měsíční bonus | 13. mzda | sleva na pohonné hmoty | poukazy do Premiere Cinemas | odměna za doporučení nového zaměstnance 20 000 Kč | příspěvek až 6 500 Kč na každé dítě na dětskou rekreaci | 128 Kč stravenka/den | Multisport karta jen za 275 Kč | 5 týdnů dovolené | příspěvek na penzijní a životní pojištění | Edenred Benefits | permanentní vstupenky do zoo | vstupenky na hokej (HC Verva) a do Aquapalace v Praze | bonus při narození dítěte 20 000 Kč a další.

Co vás u nás čeká v rámci absolventského programu?

- Sestavíme vám individuální plán, podle kterého se seznámíte s provozy napříč celým chemickým areálem, abyste si mohli vybrat uplatnění podle svých představ.
- Zúčastníte se seminářů na témata: rozvoj motivace, týmová spolupráce, prezentační a komunikační dovednosti, projektové řízení.
- Po zaučení budete vypracovávat dílčí projekty spojené se stážemi ve výrobních provozech.

Co my očekáváme od vás?

- Úspěšné ukončení studia na VŠ chemického, strojírenského nebo elektro směru.
- Dobrou znalost anglického jazyka a řidičský průkaz skupiny B.
- Chuť a schopnost pracovat samostatně i v týmu.

Tak po škole u nás!

Pusťte si trailer o našich hrdinech:

Prohlédněte si, jak to u nás vypadá:

kariera@orlenunipetrol.cz
orlenunipetrol.cz

ORLEN Unipetrol

KDO JSME?

PRO.MED.CS Praha a. s.

Jsme prosperující česká farmaceutická společnost s mezinárodním přesahem a vlastním vědeckým výzkumem a vývojem. Naše společnost v posledních letech významně roste, a to nejen v Čechách, ale i v zahraničních regionech, ve kterých naše společnost působí.

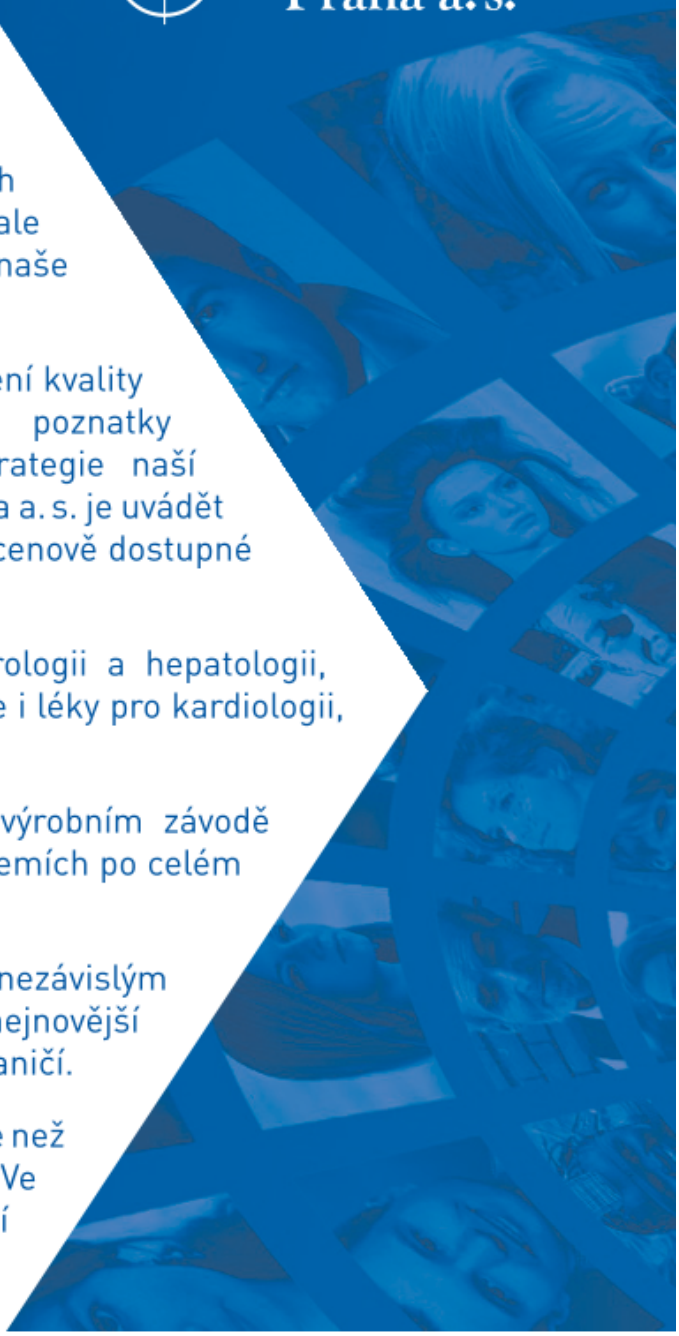
Naše léky přispívají k účinné léčbě a zlepšení kvality života pacientů. Zkoumáme nejnovější poznatky lékařské vědy a začleňujeme je do strategie naší společnosti. Cílem firmy PRO.MED.CS Praha a. s. je uvádět na trh bezkonkurenční, moderní, účinné a cenově dostupné léky nejvyšší možné kvality.

Primárně se zaměřujeme na gastroenterologii a hepatologii, máme však mnohem širší záběr – nabízíme i léky pro kardiologii, neurologii, léčbu poruch CNS a další.

Naše léčivé přípravky vyrábíme také ve výrobním závodě v Praze a prodáváme je ve více než třiceti zemích po celém světě.

Poskytujeme podporu výzkumným týmům a nezávislým laboratořím při hledání inovací a sdílíme nejnovější poznatky s vědci a lékaři v Čechách i v zahraničí.

Dáváme prostor k profesní seberealizaci více než devíti stům kvalifikovaných zaměstnanců. Ve firemní centrále v Praze pracují mezinárodní týmy složené z odborníků z různých zemí a kulturních prostředí.



ČESKÁ FARMACEUTICKÁ SPOLEČNOST

SÍDLO NA PRAZE 4

VÍCE NEŽ 900 ZAMĚSTNANCŮ

PŮSOBNOST VE VÍCE NEŽ 30 ZEMÍCH

VLASTNÍ VĚDECKÝ VÝZKUM A VÝVOJ

VLASTNÍ VÝROBA V PRAZE

Absolventi VŠCHT u nás nacházejí uplatnění nejčastěji na těchto odděleních:

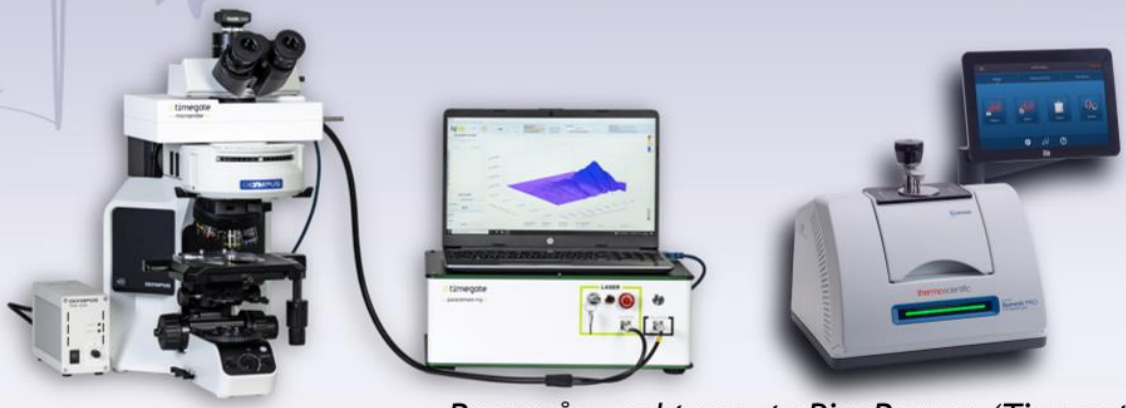
- Vývoj lékových forem
- Výroba léčiv
- Farmakovigilance
- Registrace léčiv

CO TI NABÍDNEME?

- Práci na projektech, které vedou ke zlepšení kvality života pacientů
- Prostředí firmy, které podporuje inovativní léčebné metody
- Atraktivní mzdu i bez předchozí praxe
- Mnoho prostoru pro odborné vzdělávání a kariérní rozvoj
- Lákavé benefity
- Přátelský tým, který jde za společným cílem – přispívat ke zdraví našich pacientů
- Designové kanceláře na Brumlovce

www.promedcs.com

Molekulová spektroskopie



Ramanův spektrometr PicoRaman (Timegate)
a FT-IR spektrometr Nicolet Summit (Thermo Scientific)

Společnost Nicolet CZ s.r.o. dodává Ramanovy a FT-IR spektrometry a mikroskopy Thermo Scientific, OEM přenosné i ruční disperzní Ramanovy, UV-VIS-NIR spektrometry, vědecké Ramanovy spektrometry S+I, infračervené SNOM mikroskopy NeaScope (Attocube, dříve Neaspec) a příslušenství k nim. Nabízí rovněž vývoj analytických metod na zakázku, servis přístrojů, individuální i skupinová školení a každý rok pořádá několik kurzů Ramanovy a infračervené spektroskopie, z nichž některé jsou ve spolupráci se spektroskopickou společností J. M. Marci.

NeaScope SNOM (Attocube)

Ramanův mikroskop Nicolet DXR3xi

NICOLET CZ
MOLECULAR SPECTROSCOPY

+420 272 760 432

www.nicoletcz.cz

3. NEJVĚTŠÍ TECHNOLOGICKÉ CENTRUM

4. NEJVĚTŠÍ FARMACEUTICKÁ SPOLEČNOST NA SVĚTE

40 PLNĚ PLACENÝCH DOBROVOLNICKÝCH HODIN

90+ NÁRODNOSTÍ

140+ POBOČEK PO CELÉM SVĚTE

2021
2022
2023
ZAMĚSTNAVATEL ROKU

∞ PŘÍLEŽITOSTÍ

MSD

#MSDPlaceToBe

Ústav analytické chemie (402)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

SEZNAM SEKCÍ

1. Analytická chemie I

2. Analytická chemie II

SPONZOŘI ÚSTAVU ANALYTICKÉ CHEMIE

NICOLET CZ
MOLECULAR SPECTROSCOPY

PTIK
INSTRUMENTS

PRO.MED.CS
Praha a.s.

SIAD

ZENTIVA

RMI
RESEARCH MEASUREMENT INSTRUMENTS

Altium

pragolab

SHIMADZU
Excellence in Science

onsemi

Pilsner Urquell

vwr
part of avantor

vesmír

Analytická chemie I

MÍSTO: POSLUCHÁRNA A105 (A-152)

KOMISE

doc. Ing. Antonín Kaňa, Ph.D. (předseda)

Ing. Vadim Prokopec, Ph.D.

Ing. Lucie Kolesniková, Ph.D.

RNDr. František Kesner, Ph.D. (NICOLET CZ s.r.o.)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 Marek Beneš (B3, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Studium degradace nové psychoaktivní látky pomocí elektrochemických a spektroskopických metod

08:50 Tereza Kostková (B3, Ing. František Králík, Ph.D.)

Studie struktury THC a HHC: elektronový cirkulární dichroismus a chemické kvantové výpočty

09:10 Bc. Martin Kovář (M2, Ing. Petr Večerník, Ph.D.)

Analýza sorpčních vlastností ferrokyanidů pomocí vibrační spektroskopie a vícerozměrných statistických metod

09:30 Bc. Yejune Lee (M2, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Studium solvatochromního chování derivátu stilbenů v běžných rozpouštědlech metodou UV-VIS a NMR spektroskopie

10:00 Bc. Natálie Pilná (M2, Ing. František Králík, Ph.D.)

Spektroskopická analýza selektivních modulátorů androgenního receptoru

10:20 Bc. Lizaveta Ratsilouskaya (M2, Ing. Jan Koucký, Ph.D.)

Vibrační spektroskopie antihypertenziv

10:40 Bc. Michaela Trajerová (M2, Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.)

Analýza infračerveného spektra anisyl alkoholu, molekuly vyskytující se v parfémech

11:00 Bc. Daniel Šlemar (M1, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Studium strukturních změn lignosulfátového plastifikátoru

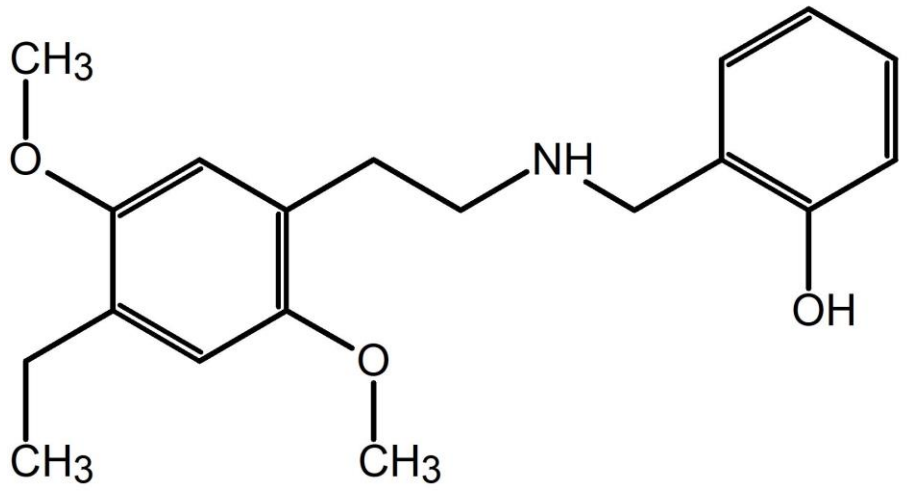
vyhlášení výsledků

Studium degradace nové psychoaktivní látky pomocí elektrochemických a spektroskopických metod

Marek Beneš (B3)

Školitel: doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.

Tato práce se zabývá studiem *in vitro* oxidativní degradace nové psychoaktivní látky 25E- NBOH (N- (2‘- hydroxybenzyl)- 4- ethyl- 2,5-dimethoxyfenethylamin; Obr.1.) pomocí elektrochemických a spektroelektrochemických metod. Cílem bylo navržení prvních oxidačních produktů a návrh mechanismu jejich vzniku.Látky ze skupiny NBOH jsou chemicky odvozené od fenethylaminu a stejně jako jeho další deriváty vykazují stimulační ale navíc i halucinogenní účinky srovnatelné s LSD. Látka 25E- NBOH vykazuje ve své skupině nejsilnější afinitu k serotoninovým receptorům a v posledním desetiletí byla spolu s dalšími látkami své skupiny zneužívána a distribuována jako alternativa LSD. Zatím není známo mnoho informací o jejím metabolismu ani farmakologických vlastnostech. Jelikož přenosy protonu a elektronu hrají významnou roli při metabolismu, elektrochemický výzkum oxidace a zjištění prvních produktů napomůže k odhalení jeho celkového průběhu.Výzkum je založen na využití cyklické voltametrie ke zjištění reakčního schématu a teoretických výpočtech prostorového rozložení HOMO k určení elektroaktivního místa v molekule. Metody IČ a UV-Vis spektroelektrochemie byly využity k identifikaci prvních vznikajících produktů. Dalším cílem byla analýza roztoků po oxidativních elektrolýzách pomocí HPLC-DAD a HPLC-MS.



Obrázek 1.: Chemická struktura látky 25E-NBOH.

Studie struktury THC a HHC: elektronový cirkulární dichroismus a chemické kvantové výpočty

Tereza Kostková (B3)

Školitel: Ing. František Králík, Ph.D.

Předkládaná práce se zabývá studiem kanabinoidů, tedy terpenofenolických látek vyskytujících se v konopí setém s analgetickými, antiemetickými a psychotropními účinky. Právě kvůli posledním uvedeným účinkům jsou často zneužívány, kdy se do lidského organismu dostávají např. ve formě kouření nebo i přímou konzumací. V lidském těle se váží na receptor CB1 v mozku a přímo ovlivňují psychiku a stavy vědomí, při předávkování může dojít až k úmrtí. I přes psychoaktivní účinky a jistou míru nebezpečí lze v České republice koupit některé z těchto látek legálně. Tato práce byla zaměřena na využití chiroptické spektroskopie a kvantově chemických výpočtů pro analýzu Δ^9-*trans*-tetrahydrokanabinolu (THC) a hexahydrokanabinolu (HHC). Pro standardy obou látek byla naměřena spektra elektronového cirkulárního dichroismu (ECD), ve kterých byly popsány všechny intenzivní pásy, podle kterých bude v budoucnu možné látky identifikovat v reálných vzorcích. Pomocí výpočtů založených na teorii funkcionálu elektronové hustoty (DFT) byly nalezeny stabilní konformery obou látek, pro které byla simulována spektra ECD, které byly následně porovnány s experimenty. Jedná se o pilotní práci, kde byla poprvé aplikována chiroptická spektroskopie a DFT výpočty pro detailní analýzu těchto zástupců kanabinoidů.

Analýza sorpčních vlastností ferrokyanidů pomocí vibrační spektroskopie a vícerozměrných statistických metod

Bc. Martin Kovář (M2)

Školitel: Ing. Petr Večerník, Ph.D.

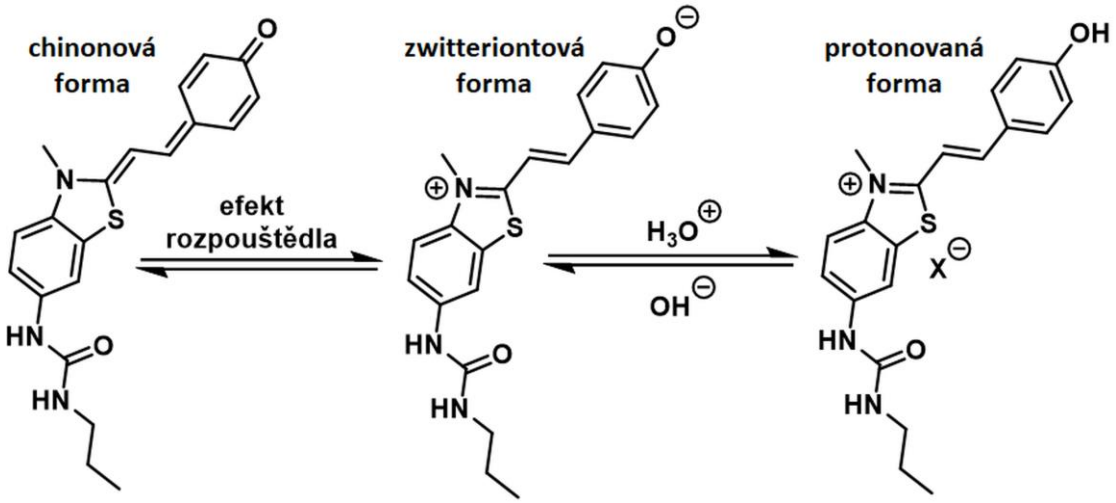
Ferrokyanidy a ferrikyanidy kovů jsou častými materiály využívanými pro sorpci radionuklidů v jaderném průmyslu. Především se vyznačují vysokou selektivitou pro ionty cesia. Dále mohou sorbovat i stroncium, thallium či rubidium. Mezi jejich význačné charakteristiky patří hlavně vysoká sorpční kapacita, specifický povrch a pórovitost, dobrá radiační stabilita, nízká rozpustnost a snadná syntéza. Obecně bylo zaznamenáno, že ferrokyanidy kationtu mědi vykazují vyšší sorpční kapacitu pro cesium v porovnání s jinými typy kationtů kovů. Tato práce se proto zaměřuje na přípravu sorbentů na bázi ferrokyanidu mědi a systematickou optimalizaci parametrů jeho přípravy, a to za pomoci spektroskopických metod ve srovnání s tradičními sorpčními experimenty. Vyhodnocení naměřených dat z infračervené a Ramanovy spektroskopie je prováděno za pomoci vícerozměrných statistických metod za účelem odhalení vlivu vstupních parametrů přípravy na sorpční vlastnosti a kontrolu homogenity připravených sorbentů. Cílem této práce je získat vybraný ferrokyanid mědi s optimálními vlastnostmi, který bude následně využit k vytvoření magnetického sorbentu spojením s částicemi magnetitu a zapouzdřením do matrice např. polyakrylonitrilu, aby se docílilo snadné separace sorbentu z roztoku.

Studium solvatochromního chování derivátu stilbenů v běžných rozpouštědlech metodou UV-VIS a NMR spektroskopie

Bc. Yejune Lee (M2)

Školitel: doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Solvatochromní látky jsou látky využívané v řadě analytických aplikací, jako např. pro analýzu motorových paliv nebo pro kontrolu čistoty organických rozpouštědel. Solvatochromismus je jev, který je spojený s výraznou změnou spektrálních vlastností těchto látek, jako např. změnou vlnové délky absorpčního maxima, intenzitou a tvarem pásů v absorpčních spektrech, vlivem změny chemického okolí. Ačkoliv je solvatochromní jev znám již desítky let, jeho původ doposud nebyl plně objasněn. Cílem této práce je provést experimenty umožňující sledování vlivu rozpouštědel na formu molekulové struktury solvatochromních látek. Mezi známé formy patří chinonová, zwitterionická a protonovaná forma. Pro studium zmíněných vlivů byl využit nový stilbenový derivát, jehož struktura je zobrazena na obrázku. Solvatochromní chování zkoumaného stilbenu bylo studováno v různých rozpouštědlech a jejich směsích. Pro studium solvatochromního chování byla využita UV–VIS a NMR spektroskopie. Výsledky spektroskopických měření vedly k základnímu objasnění vlivu rozpouštědel na molekulovou strukturu studované látky.



Spektroskopická analýza selektivních modulátorů androgenního receptoru

Bc. Natálie Pilná (M2)

Školitel: Ing. František Králík, Ph.D.

Selektivní modulátory androgenního receptoru (SARMy) patří mezi syntetické nesteroidní látky vykazující anabolické účinky. Hlavní důvod jejich vývoje byl potenciál nahradit anabolické steroidy pro léčebné účely. Žádný z nich neprošel klinickými testy, a proto u nich nejsou detailně popsány nežádoucí vedlejší účinky ani bezpečné dávkování, přesto jsou pro své účinky na svalovou hmotu zneužívány sportovci. Cílem této práce bylo metodami infračervené (IR) spektroskopie a elektronového cirkulárního dichroismu (ECD) analyzovat standardy těchto látek a následně reálné vzorky za účelem jejich profilování a identifikace. IR spektroskopie patří ve forenzní analýze k běžně využívaným metodám, ale při nízkém obsahu účinné látky ve vzorku se ukázalo, že identifikace na základě IR spekter bývá znemožněna kvůli překryvu pásů. Všechny analyzované SARMy byly chirální a pro jejich standardy byla naměřena spektra ECD, ve kterých byly popsány charakteristické spektrální projevy. Spektra standardů byla poté porovnána se spektry ECD reálných vzorků a byly spolehlivě identifikovány účinné látky. Spektroskopie ECD se tak ukázala být spolehlivým nástrojem pro profilování SARMů a navíc umožňuje monitorovat absolutní konfiguraci účinných látek, která často hraje významnou roli při účincích na organismus.

Vibrační spektroskopie antihypertenziv

Bc. Lizaveta Ratsilouskaya (M2)

Školitel: Ing. Jan Koucký, Ph.D.

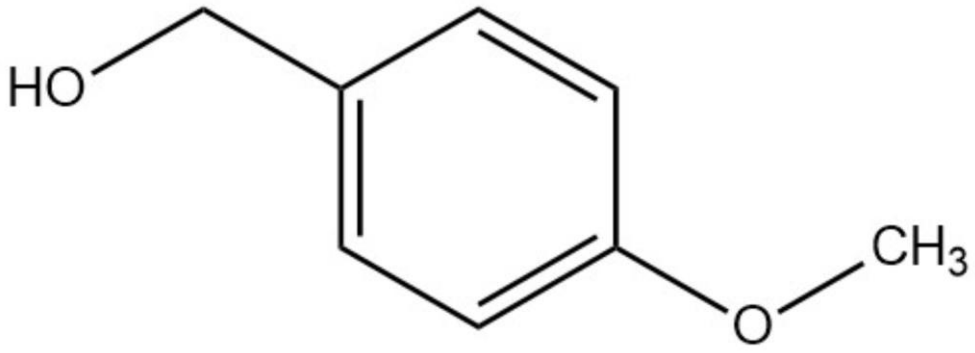
Hypertenze, neboli vysoký krevní tlak, je jedním z nejčastějších zdravotních problémů v současném světě. Zvýšený krevní tlak může způsobit vážné komplikace, jako jsou srdeční onemocnění, cévní příhody nebo selhání ledvin. V důsledku toho je výzkum zaměřený na antihypertenziva neustále aktuální, rozvíjený a významný. Cílem této práce je prozkoumat různé druhy antihypertenziv přítomných na trhu a jejich strukturu. Experimentální část teto práce je zaměřená na charakterizaci vybraných hypertenziv pomocí infračervené a terahertzové spektroskopie.

Analýza infračerveného spektra anisyl alkoholu, molekuly vyskytující se v parfémech

Bc. Michaela Trajerová (M2)

Školitel: Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.

Anisyl alkohol neboli 4-methoxybenzylalkohol je aromatická těkavá sloučenina, která se nachází v anýzovém oleji, medu a vanilkovém extraktu. Často se přidává do parfémů díky své příjemné vůni. Anisyl alkohol je v dnešní době už považován za alergen a způsobuje vyrážku. Vyskytuje ve formě čtyř konformerů, které vzniknou kombinací otáčení alkoholové a methylové skupiny. V této práci se zaměřuji na analýzu naměřeného infračerveného spektra zkoumané látky pomocí kvantově-chemických výpočtů spekter všech čtyř konformerů. Pro studium teplotní stability se porovnávaly změny ve struktuře anisyl alkoholu při teplotách od -10 °C až k 70 °C. Tato práce by mohla mít pozitivní přínos také ve forenzních vědách, kde při páchání trestného činu může dojít k přenesení složek vůní pachatele při kontaktu s osobami, předměty anebo místy. Poté může dojít ke zúžení podezřelých podle analýzy vonných látek.



Studium strukturních změn lignosulfátového plastifikátoru

Bc. Daniel Šlemar (M1)

Školitel: doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.

Uložení vyhořelého jaderného paliva a radioaktivního odpadu s sebou nese přísná bezpečnostní opatření, jejichž účelem je minimalizovat riziko úniku radionuklidů do biosféry. K tomu slouží systém ochranných prvků, mezi něž patří tzv. inženýrské bariéry. Jedním z těchto prvků je vnější betonová obálka, která se nachází v těsné blízkosti modulu s radioaktivním odpadem. Cílem této práce je zjistit, zda se plastifikační přísady používané v moderním betonovém průmyslu působením vnějších vlivů, které simulují podmínky v hlubinném úložišti, strukturně mění. Zkoumána je strukturní degradace pomocí plynové chromatografie s hmotnostní spektrometrií, kdy se ověřuje předpoklad, že působením toku radionuklidů dochází k rozkladu plastifikátoru za vzniku malých organických fragmentů. Dále jsou strukturní změny analyzovány pomocí infračervené spektroskopie. Získaná data jsou zpracována vícerozměrnými statistickými metodami.

Analytická chemie II

MÍSTO: POSLUCHÁRNA A21 (A-239)

KOMISE

Ing. Veronika Škeříková Ph.D. (předseda)

Ing. Jan Koucký, Ph.D.

Ing. Magda Vosmanská, CSc.

Ing. Jan Neuman, Ph.D. (OPTIK INSTRUMENTS s.r.o)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 Tomáš Formánek (B3, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Vývoj metodiky pro zakoncentrování radionuklidu ^{137}Cs z vody

08:50 Bc. Jakub Harvalík (M2, prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka)

Reduktivní elektrochemické štěpení sulfonimidů jako přímá cesta k sulfonamidům

09:10 Barbora Litomiská (B3, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Stanovení ^{137}Cs v houbách ve vybraných lokalitách v ČR

09:30 Bc. Vítězslav Mareš (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Charakterizace výplňových bentonitových materiálů pro koncept hlubinného uložiště radioaktivního odpadu

10:00 Bc. Vendula Mazánková (M1, doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.)

Elektrochemická oxidace primárních aminů z řad nových psychoaktivních látek

10:20 Bc. Kateřina Pražáková (M2, prof. RNDr. Dr. David Sýkora)

Optimalizace UHPLC-MS metody pro lipidomickou analýzu makrofágů

10:40 Bc. Tereza Toušková (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Stanovení radonu v povrchových vodách v ČR

vyhlášení výsledků

Vývoj metodiky pro zakoncentrování radionuklidu ^{137}Cs z vody

Tomáš Formánek (B3)

Školitel: doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.

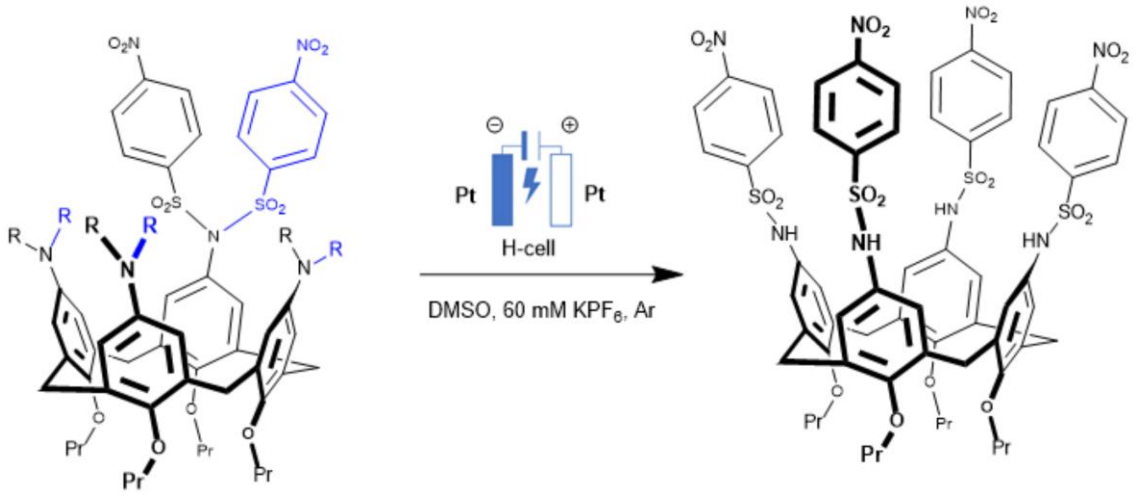
^{137}Cs je jedním z radioaktivních izotopů vyskytujících se v enviromentálních vzorcích. Může vznikat jaderným štěpením z uranu nebo plutonia v jaderných elektrárnách. Prostředí však nejvíce kontaminovaly testy jaderných zbraní a také jaderné havárie jako například havárie v Černobylu nebo Fukušimě. Z důvodu relativně dlouhého poločasu rozpadu ($T_{1/2}$ = 30,17 let) se v životním prostředí nachází i desítky let po zmíněných událostech. Ve velmi nízkých koncentracích se může vyskytovat i ve vodě. Tyto koncentrace nemusí být vždy detekovatelné přímím měřením, nicméně i nízká koncentrace ^{137}Cs může být škodlivá jak pro ekosystémy, tak pro lidské zdraví. Tato práce se bude zaměřovat na analýzu existujících postupů pro zakoncentrování ^{137}Cs i na vývoji nových metod. Vyvinutá metodika bude aplikována na vzorky vod odebraných z radioaktivních povrchových pramenů v České republice.

Reduktivní elektrochemické štěpení sulfonimidů jako přímá cesta k sulfonamidům

Bc. Jakub Harvalík (M2)

Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Sulfonamidický strukturní motiv SO_2NH disponuje kyselým vodíkem, který lze využít jako vazebné místo u řady supramolekulárních receptorů aniontů, resp. jeho deprotonací lze získat receptory kationtů. Pro zvýšení konstanty stability (K_A) těchto komplexů a zlepšení selektivity receptorů je však vhodné zabývat se přípravou více vazebných molekul. Toho lze docílit např. ukotvením několika sulfonamidů na vhodný nosič, jako je calixaren. Bohužel se ukazuje, že tradiční syntéza těchto receptorů může být problematická. Především se neobejde bez nutnosti náročné separace nežádoucích vedlejších produktů, spojené s neuspokojivými výtěžky, což činí přípravu dlouhou a finančně náročnou.Neobvyklé řešení výše zmíněných komplikací by mohla přinést námi nedávno popsaná metoda reduktivního elektrochemického štěpení sulfonimidů, Tato metoda byla nejprve podrobně prostudována pomocí modelového monosulfonimidu. Ukázalo se, že pomocí CPE (při -0.9 V vs. SCE) dochází k selektivnímu rozštěpení S-N vazby za vzniku kýženého sulfonamidu. Ten lze zároveň získat ve velmi příznivém výtěžku (85 %) bez nutnosti složité separace produktů. Celý proces reduktivního štěpení byl nejprve podrobně popsán a poté aplikován pro trojici octakis-nosylovaných calixarenů, jež lze pomocí běžných postupů jen obtížně získat.



Stanovení ^{137}Cs v houbách ve vybraných lokalitách v ČR

Barbora Litomiská (B3)

Školitel: doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.

Umělé radionuklidy se do životního prostředí dostávají z různých zdrojů, např. testy jaderných zbraní a havárie jaderných elektráren. Jedním z nejsledovanějších umělých radioizotopů je ^{137}Cs s poločasem rozpadu 30 let. Tento relativně dlouhý poločas rozpadu umožňuje sledování tohoto izotopu i desítky let po té, co se dostal do životního prostředí. Jednou z možností jak sledovat množství ^{137}Cs v přírodě je analyzovat jeho obsah v houbách, o kterých je známo, že jsou schopny radionuklidy akumulovat.Předkládaná práce se věnuje stanovení ^{137}Cs ve vybraných druzích hub v sedmi lokalitách v ČR. Pro kvalitativní analýzu přítomných radionuklidů byl použit polovodičový detektor, pro vlastní stanovení pak scintilační detektor. Analýzou získaných dat bylo zjištěno, že se obsahy ^{137}Cs v houbách liší v jednotlivých lokalitách I v jednotlivých druzích hub.

Charakterizace výplňových bentonitových materiálů pro koncept hlubinného uložiště radioaktivního odpadu

Bc. Vítězslav Mareš (M2)

Školitel: doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.

Koncept hlubinného uložiště dnes představuje nejperspektivnější přístup k otázce likvidace vyhořelého jaderného paliva. Aby hlubinné uložiště správně plnilo svůj účel a vykazovalo šetrnost vůči životnímu prostředí, vyvstává důležitý přístup tzv. inženýrské bariéry. Inženýrská bariéra má představovat efektivní oddělení vysoce aktivního odpadu od okolního životního prostředí. Jako významná součást této bariéry má sloužit právě bentonit. Bentonit je porézní jílovitý materiál bohatý na minerál montmorillonit, čímž získává unikátní vlastnosti vhodné pro požadovaný koncept uložiště. Nicméně v praxi je typické, že bentonitové materiály se vzájemně liší a vykazují různorodé chování. V rámci této práce bylo studováno pět druhů komerčně dostupného bentonitu (BCV, B75, BaM, MX80 a Ca Kunipie), kdy každý druh byl podroben zvoleným charakterizacím. Základní zhodnocení materiálů spočívalo ve stanovení sušiny a kationtové výměnné kapacity. V rámci dalších experimentů bylo provedeno vodné loužení a analýzy získaných výluhů. Tyto výsledky byly následně využity pro vzájemné porovnání a zhodnocení vhodnosti pro hlubinné uložiště.

Elektrochemická oxidace primárních aminů z řad nových psychoaktivních látek

Bc. Vendula Mazánková (M1)

Školitel: doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.

Cílem práce bylo *i)* studovat elektrochemickou oxidaci primárních aminů ze skupiny nových psychoaktivních látek (konkrétně 2-aminoindanu a tryptaminu) a biogenních aminů (tyraminu) na nemodifikované grafitové elektrodě (G) a grafitové elektrodě modifikované polymerním filmem na bázi methoxy derivátu thiophenu (PThM/G) a *ii)* zjistit, zda modifikace elektrodového povrchu povede ke rozlišení zmíněných analytů. K modifikaci elektrod a studiu interakci analytu s povrhy elektrod byly použity metody cyklické voltametrie a square-wave voltametrie. Ukázalo se, že v rozsahu potenciálů +0,74 V a +0,95 V dochází k oxidaci tryptaminu a tyraminu jak na nemodifikované, tak na modifikované elektrodě. Nicméně vzhledem k tomu, že rozdíly v proudové odezvy byly dosažený jen pro PThM-elektrodu nelze vyloučit interakci mezi polymerním filmem a těmito analyty. V případě 2-aminoindanu, byly pozorovány dva voltametrické signály (E=+0,85 V a E=+1,33 V) jen na PThM-elektrodě, což dokazuje větší význam modifikace pro jeho detekci.

Optimalizace UHPLC-MS metody pro lipidomickou analýzu makrofágů

Bc. Kateřina Pražáková (M2)

Školitel: prof. RNDr. Dr. David Sýkora

V současnosti je pozorována zvyšující se incidence kardiovaskulárních chorob v populaci. Významnými faktory přispívajícími k jejich rozvoji jsou hypertenze, kouření a obezita. Podstatnou roli však mohou hrát i další vlivy jako např. prozánětlivé procesy v tukové tkáni. Těchto dějů se účastní makrofágy, buňky nespecifického imunitního systému. Předkládaná práce se věnuje analýze lipidomu prozánětlivých a protizánětlivých makrofágů. K analýze lipidů bylo využito spojení ultra-vysokoúčinné kapalinové chromatografie s hmotnostní spektrometrií (UHPLC-MS). Vybrané parametry UHPLC-MS metody byly optimalizovány pro analýzu lipidů z 15 tříd. Jednalo se o výběr vhodné stacionární fáze, volbu průtoku mobilní fáze, nastavení průběhu gradientové eluce, teploty kolony a odpařovací teploty elektrospreje. Za výsledných podmínek byly změřeny směsi standardů lipidů a byly zjištěny retenční závislosti pro jednotlivé třídy lipidů. Rovněž proběhly pilotní pokusy s prvními vzorky makrofágů, které byly izolovány z tukové tkáně odebrané z ledvin dárců při transplantaci. Tyto experimenty ukázaly rozdíl v zastoupení lipidů u prozánětlivých a protizánětlivých makrofágů.

Stanovení radonu v povrchových vodách v ČR

Bc. Tereza Toušková (M2)

Školitel: doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.

Povrch Země je ze 71 % tvořen vodou a radionuklidy v ní obsažené mohou představovat riziko pro lidské zdraví. Do vody se mohou dostat přirozeným způsobem, například prostřednictvím geologických procesů, nebo jako důsledek lidských aktivit, jako je jaderný průmysl. Existují dva způsoby, jak se radionuklidy ve vodě mohou stát nebezpečnými pro člověka. Prvním způsobem je požití kontaminované vody, což může vést k dlouhodobému vystavení ionizujícímu záření, druhým je inhalace uvolněného radonu z vody během běžných každodenních činností, jako je vaření nebo sprchování. Radon je radioaktivní plyn a při dlouhodobé expozici je vyšší riziko vzniku plicního karcinomu. V České republice je řada pramenů se zvýšeným obsahem radioaktivních látek, které jsou volně přístupné veřejnosti a lze je tak potenciálně zneužít. Cílem této práce je vyvinout správný postup pro zpracování vzorku, počínaje odběrem, přes skladování, úpravu vzorku až po následné měření vhodně vybranou radioanalytickou technikou.

Ústav fyzikální chemie (403)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

SEZNAM SEKCÍ

1. Fyzikální chemie I

2. Fyzikální chemie II

3. Fyzikální chemie III

4. Fyzikální chemie IV

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKÁLNÍ CHEMIE

ORLEN Unipetrol

ZENTIVA

NICOLET CZ
MOLECULAR SPECTROSCOPY

PRO.MED.CS
Praha a.s.

ANAMET

JSP

OPTIK
INSTRUMENTS

SPECION, s.r.o.
LABORATORNÍ A ZKUŠEBNÍ TECHNIKA

Pilsner Urquell

RENISHAW
apply innovation™

vesmír

Fyzikální chemie I

MÍSTO: A125

KOMISE

doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D. (předseda)

Mgr. Juraj Fedor, Ph.D.

Ing. Martin Klajmon, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 Jakub Dubský (B2, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Modelování nelokálních Augerovských dějů pomocí QM:QM

09:20 Petr Chalupský (B3, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)

Exploring peptide folding in a carbon nanotube using well-tempered metadynamics

09:40 Marek Klíma (B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Investigating Proton-Coupled Energy Transfer: Case of BODIPY and Lumazine

10:00 Jan Koreš (B2, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Sodium/CO2 collisions: gas phase model of CO2 reduction by hydrated electrons?

10:20 Rudolf Kvasňovský (B2, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)

Stavba simulačního modelu mitochondriálního ribosomu

10:40 Daniel Myšák (B2, Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová, Ph.D.)

Computational modeling of Glutamate dehydrogenase in crowded environment with focus on active site

11:00 Vít Turčin (B2, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.)

Stability of small ammonia clusters with an excess electron using ab-initio molecular dynamics

vyhlášení výsledků

Modelování nelokálních Augerovských dějů pomocí QM:QM

Jakub Dubský (B2)

Školitel: prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.

Mezimolekulární coulombický rozpad (ICD) je relativně nový, a ne příliš prozkoumaný děj, kterým se atom nebo molekula zbavuje přebytečné energie. Tento typ elektronové relaxace je podobný Augerovu rozpadu, nicméně u ICD dochází k ionizaci dvou jednotek účastnících se reakce, zatím co u Augerova jevu dochází ke dvojité ionizaci pouze jedné jednotky. Pro modelování takovéhoto systému používám fragmentační metodu typu QM:QM. Tato technika nám umožní, díky rozložení velkého systému na menší fragmenty, vypočítat ionizační energie pro soustavy, jenž by bylo prakticky nemožné řešit pomocí konvenčních metod kvantové teorie. Součástí práce byl vývoj a testování programu pro výpočty ionizačních energií na různě velkých kapičkách vody. Technika je pak použita pro modelování ICD, kdy je třeba provést výpočty ionizačních energií pro dvakrát nabité dimery vody a pro dimer, kdy z jedné molekuly vody byl vyražen elektron z nízko ležících orbitalů. Tyto děje studuji pro plně solvatované systémy. Studuji také souvislost ICD jako elektronového relaxačního děje s dynamikou atomových jader ve vnitřně ionizovaném stavu vody. Výsledky z této práce povedou ve spojení s mikrotryskami a elektronovou emisní spektroskopií k rozvoji technik pro vnější i vnitřní analýzu kapalných fází.

Exploring peptide folding in a carbon nanotube using well-tempered metadynamics

Petr Chalupský (B3)

Školitel: doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Our group has a long-standing interest in the molecular details of protein synthesis. This key process occurs in ribosomes, large biomolecular complexes present in every living cell. The nascent protein translocates through the ribosomal tunnel and initiates folding prior to its release. Many molecular details of this folding remain unclear. We want to understand this process better by running all-atom molecular dynamics simulations of a peptide in the ribosomal tunnel.As a first approximation, our system consists of a polyalanine peptide in a carbon nanotube. Using well-tempered metadynamics, we characterized the conformational behavior of the peptide along the end-to-end collective variable. We also tuned the metadynamics parameters that we will use in simulations of the ribosomal tunnel. The structure of the ribosomal tunnel varies across organisms. Interestingly, this led to the development of a large class of antibiotics, which specifically target the bacterial tunnel. Currently, we have prepared 5 simulation models of various ribosomal tunnels. The result of the following simulations will give us insight into the earliest moments of a nascent peptide. This in turn can lead to new strategies against bacterial infections or diseases caused by misfolded protein.

Investigating Proton-Coupled Energy Transfer: Case of BODIPY and Lumazine

Marek Klíma (B3)

Školitel: prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.

Proton-Coupled Energy Transfer (PCEnT) is a process that transfers energy between two chromophores with simultaneous transfer of a proton. What makes this process interesting is the ability to excite a chromophore with light from the visible spectrum when normally it would have to be excited by UV light. This fact has a significant impact in the field of medicinal photochemistry, where only visible or near-infrared light can be used. Last year, our laboratory participated in an extension of the process to include triplet states. In my work, I studied a pair of well-known chromophores, lumazine and BODIPY, to determine whether it is possible to excite lumazine to the triplet state by PCEnT with BODIPY as a visible light absorber. To do this, I used various quantum-chemical approaches, including *ab initio* multireference methods and constrained density functional theory.

Sodium/CO2 collisions: gas phase model of CO2 reduction by hydrated electrons?

Jan Koreš (B2)

Školitel: prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.

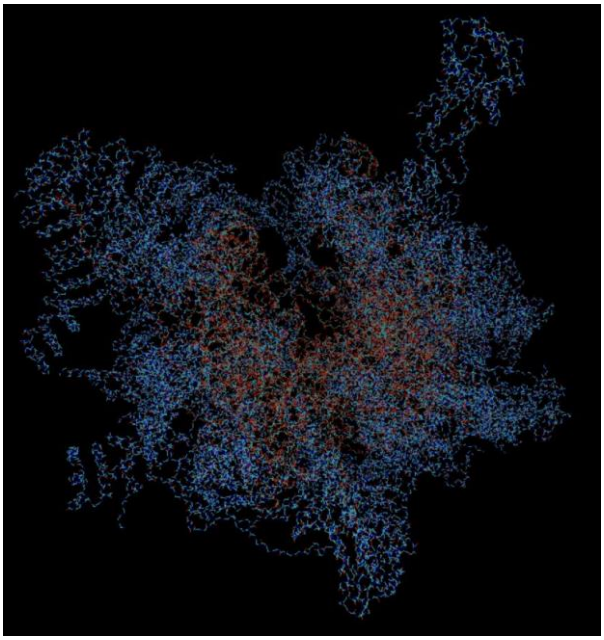
With the rising content of carbon dioxide in the atmosphere and its effect on the climate of the earth, the need to find new methods for lowering it becomes more and more urgent. One of those techniques could be carbon capture through the reduction of carbon dioxide with a hydrated electron. So far, only a few computational studies have been done exploring this reaction. This might also be because there is not a simple universal computational model for a hydrated electron. This study explores the mechanism of an electron transfer reaction of carbon dioxide and a sodium atom. The collisions of sodium atom with carbon dioxide molecules might be a simple computational model of carbon dioxide reduction with a hydrated electron. The results provide insight into the reaction paths and the dependency on the system geometry.

Stavba simulačního modelu mitochondriálního ribosomu

Rudolf Kvasňovský (B2)

Školitel: doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Tato práce je zaměřena na problematiku počítačového simulování mitochondriálního ribosomu (viz obrázek). Na začátku bude popsána úloha mitochondriálních ribosomů v organismech, bude popsáno, čím se vyznačují oproti běžným ribosomům, kde je najdeme, jaká je jejich strukturaa proč je jejich studium důležité a zajímavé. V dalších fázích prezentace bude přiblížen samotný proces stavby simulačního modelu, kterým momentálně ve své práci procházím a který je zároveň pokusem o první simulaci lidského mitochondriálního ribosomu na světě. Budou lehce zmíněny programy, které pro modelování využívám, objasněna bude i datová struktura vstupních souborů pro simulace. Speciální pozornost bude věnována problematickým místům simulace, kterými jsou hlavně nekanonická residua v proteinech a RNA a tomu, jak se s těmito překážkami vyrovnávám ve své práci. Závěrem bude nastíněno, v jaké fázi se práce momentálně nachází, jaké jsou její vyhlídky do budoucna a k čemu se bude hotový simulační model používat. Výstupem pro přítomné by mělo být uvedení do problematiky mitochondriálních ribosomů a také základní představa o samotném procesu modelování mitochondriálního ribosomu.



Computational modeling of Glutamate dehydrogenase in crowded environment with focus on active site

Daniel Myšák (B2)

Školitel: Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová, Ph.D.

Living organisms regulate their life functions by biocatalyst called enzymes. Enzymes activity is very sensitive to its surrounding which allow the cells to quickly react and change metabolism. Cell's interior contains large variety of macromolecules, thus it is crowded. On the other hand, majority of the *in vitro* experiments with enzymes are made in simple aqueous buffer. Influence of the crowded environment is missing and that is why we focus on it. We simulated Glutamate dehydrogenase (GDH), one of the most common and important enzymes in all organisms, and compared our results with experimental data. We used all-atom classical molecular dynamics for GDH systems with glutamate (GLU) and norvaline (NVA) as substrates under various conditions (pH, crowder). Then we collected 200 ns trajectories. We checked thermodynamics parameters, calculated diffusion coefficients of solvents and structural parameters of GDH. Then we characterized large variety of possible active site conformations under various conditions, such as different substrate (GLU, NVA) and pH. We described active site flexibility and diverse orientation of residues. These observations can help to explain how enzymes behave in crowded environment.

Stability of small ammonia clusters with an excess electron using ab-initio molecular dynamics

Vít Turčin (B2)

Školitel: prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.

Metal-ammonia solutions are well known for their intense blue or golden color that is attributed to the presence of solvated electrons. These solutions are widely used in organic synthesis, for example in Birch reduction, due to their high reducing potential.The presented work focuses on understanding the stabilization mechanism of solvated electrons in liquid ammonia. Experimental evidence indicates that the smallest stable negative ammonia cluster contains 13 ammonia molecules. In contrast, theoretical studies predict a much smaller number of ammonia molecules that are needed to stabilize an excess electron.To explore this, we present an *ab initio* molecular dynamics study on clusters containing from 2 to 48 ammonia molecules with an excess electron. The aim of the study is to investigate the vertical stability of the excess electron for thermal structures of the selected cluster sizes. This was achieved by calculating the vertical detachment energy (VDE) of the obtained thermal structures.

Fyzikální chemie II

MÍSTO: A12

KOMISE

prof. Ing. Michal Fulem, Ph.D. (předseda)

doc. Ing. Pavel Izák, Ph.D., DSc.

doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Ing. Martin Růžička (ORLEN Unipetrol)

Ing. Jan Praus (JSP International)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 Vladislav Aulich (B3, doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.)

Kinetic stability of amorphous dispersions of pharmaceutical ingredients with polymeric excipients as an imprint of their interactions

09:20 Matyáš Garnol (B3, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)

SERS studie chloramfenikolu adsorbovaného na stříbrném povrchu

09:40 Ondřej Hlaváček (B3, Ing. Alena Randová, Ph.D.)

Sorpce lineárních alkanů do nitrilové membrány při teplotě 25°C

10:00 Jan Kršek (B3, Ing. Alena Randová, Ph.D.)

Stanovení kritické micelární koncentrace vodných roztoků Tritonu X-100 pomocí povrchového napětí

10:20 Jana Kubová (B3, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)

Využitie vibračnej spektroskopie na klasifikáciu rumov

10:40 Katarína Vosovičová (B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Glycine Isomers in Astrochemical Context: Photodynamical Simulation

vyhlášení výsledků

Kinetic stability of amorphous dispersions of pharmaceutical ingredients with polymeric excipients as an imprint of their interactions

Vladislav Aulich (B3)

Školitel: doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

Many active pharmaceutical ingredients (APIs) suffer from low water solubility and consequent limited efficiency in the treatment of living organisms. A novel general trend is to reduce this deficiency by using an amorphous dispersion of API within polymeric excipients. In our case, we chose polylactic acid (PLA) as a polymeric excipient and two APIs (carbamazepine, naproxen). Molecular dynamics simulations represent a suitable tool to describe those systems in order to explore their kinetic properties and stability with respect to their spurious/undesirable recrystallization. At first, we start by simulating structural and cohesive properties of neat PLA and APIs separately to obtain a reference for further comparison. Then we compose mixtures with different concentration of API. The kinetic stability of those mixtures is retrieved from interactions between API and polymer. Those interactions could be derived directly by calculating radial distribution functions and cohesive energies or indirectly from the mean-squared displacement of API in the polymer.

SERS studie chloramfenikolu adsorbovaného na stříbrném povrchu

Matyáš Garnol (B3)

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Chloramfenikol je syntetické širokospektré bakteriostatické antibiotikum, které se používalo k léčbě systémových a lokálních infekcí např. salmonelóza, chlamydióza*, otitis externa*. Kvůli vedlejším účinkům bylo použití tohoto antibiotika od roku 1994 minimalizováno a bylo nahrazeno bezpečnějšími antibiotiky. Dnes se převážně používá pro veterinární účely. Chloramfenikol je velice stabilní molekulou, která vydrží až několik let při laboratorní teplotě nebo pět hodin vaření v destilované vodě. Díky těmto vlastnostem je možné, že se může vyskytovat v potravinách i po náležité úpravě, a proto je přísně monitorována jeho přítomnost.Může se vyskytovat i ve velmi nízkých koncentracích, proto se vyvíjí metoda jeho detekce pomocí adsorpce na plasmonický senzor. Tato práce je zaměřena na detekci chloramfenikolu adsorbovaného na stříbrném povrchu pomocí spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (SERS), kdy ze získaných SERS spekter je odhadován způsob adsorpce molekul na Ag povrch a je studována spektrální odezva v závislosti na excitační vlnové délce.

Sorpce lineárních alkanů do nitrilové membrány při teplotě 25°C

Ondřej Hlaváček (B3)

Školitel: Ing. Alena Randová, Ph.D.

Tato práce je zaměřena na měření sorpce, tedy adsorpce i absorpce zároveň, do nitrilové membrány pro řadu kapalných alkanů od hexanu až po dekan. Jako nitrilovou membránu pro tuto práci používám klasické nitrilové rukavice, které se nacházejí téměř v každé laboratoři, kde se pracuje s chemikáliemi. Zároveň jsou využívány například i ve zdravotnictví, hygienických oborech nebo kriminalistice pro jejich mechanickou i chemickou odolnost a trvanlivost. Experimentální měření probíhají při konstantní teplotě 25 °C, při níž je hledána závislost sorpce do membrány na velikosti alkanů (potažmo délek řetězce). Další součástí práce je vyhodnocení a srovnání jak se mění struktura povrchu membrány před a po sorpci pomocí 3D profilometru. Zároveň jde i o srovnání povrchů po sorpci různých kapalných alkanů. Hlavní motivací je tudíž zjistit chování těchto rukavic po styku s vybranými látkami. Také zda a jak mohou jejich uživatele kontaminovat při použití rukavic při práci s kapalnými alkany od hexanu po dekan.

Stanovení kritické micelární koncentrace vodných roztoků Tritonu X-100 pomocí povrchového napětí

Jan Kršek (B3)

Školitel: Ing. Alena Randová, Ph.D.

Kritická micelární koncentrace (dále pouze jako KMK) je hodnota koncentrace, při které dochází k samovolnému vytvoření shluků molekul, zvaných micely. Hodnota KMK je velmi důležitá u surfaktantů, neboť po jejím dosažení dochází ke změně směrnice koncentrační závislosti některých fyzikálních veličin daného roztoku. Mezi tyto veličiny náleží například povrchové napětí, kontaktní úhel, elektrická vodivost či viskozita. V této práci se budu zabývat stanovením KMK pomocí měření koncentrační závislosti povrchového napětí. Metoda, jež bude použita pro měření povrchového napětí, se nazývá pendant drop neboli visící kapka. Přístroj je schopný vytvořit na konci kapiláry visící mikrokapku a na základě Laplaceovy-Youngovy rovnice spočítat hodnotu povrchového napětí. Triton X-100 je látka, která je pod přísným dohledem Evropské Unie z důvodu ohrožení vodních organismů, ke kterému by mohlo dojít při úniku do životního prostředí. Vzhledem k faktu, že je užíván ve farmaceutickém průmyslu (inaktivace virů, zvýšení propustnosti buněčných membrán), je dobré znát jeho fyzikálně-chemické vlastnosti a KMK je důležitou charakterizací.

Využitie vibračnej spektroskopie na klasifikáciu rumov

Jana Kubová (B3)

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

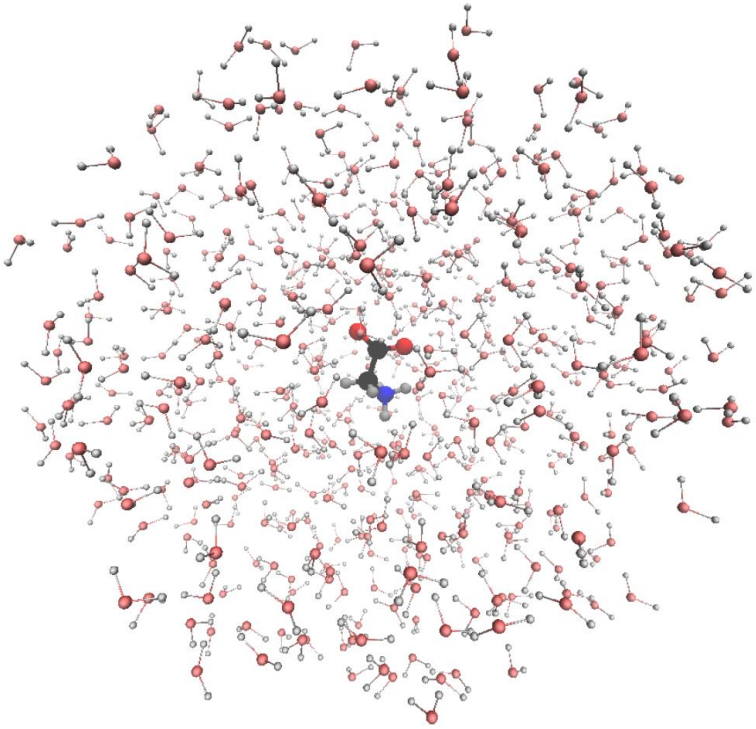
Rum je alkoholický nápoj vyrábaný tradične kvasením a následnou destiláciou z melasy alebo z cukrového sirupu. Je typickým nápojom hlavne pre ostrovy z oblasti Karibiku a pre krajiny Latinskej Ameriky, ale jeho výroba sa rozšírila do celého sveta. Podľa európskej legislatívy môže byť pojmom rum označený iba nápoj s obsahom alkoholu nad 37,5 obj.%. Postup výroby zákonom daný nie je, preto môže byť odlišný u rôznych druhov rumu. Okrem etanolu a vody obsahuje aj minoritné zložky, ktoré mu dodávajú špecifickú chuť a vôňu.Cieľom mojej práce je nájsť spektrálne rozdiely na vzorkách pätnástich rumov zo štyroch krajín za pomoci infračervenej spektroskopie s Fourierovou transformáciou na kryštáli zo ZnSe a následným porovnaním so spektrami z Ramanovej spektroskopie. Práca je zameraná na minoritné zložky vo vzorkách. Keďže sú ich spektrálne rozdiely málo rozpoznateľné, výsledné spektrá boli vyhodnotené pomocou multivariačnej štatistiky (analýzy hlavných komponentov), ktorá ukazuje rozdiely medzi jednotlivými druhmi rumu. Analýza hlavných komponentov taktiež ukazuje zmenu signálov prchavých zložiek pri odparovaní nielen etanolu a vody, ale aj zložiek zodpovedných za charakteristickú arómu. Z analýzy tiež vyplýva, že rýchlosť odparovania sa odlišuje u rôznych druhov rumov.

Glycine Isomers in Astrochemical Context: Photodynamical Simulation

Katarína Vosovičová (B3)

Školitel: prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.

Growing number of discoveries in interstellar space and in the ice or dust from comets brings new views to our understanding of life and its origin. Glycine is the simplest of amino acids, whose molecules and isomers have been confirmed to be present in astrochemical ice. However, due to the methodological challenges, only a few studies were focusing on simulation of glycine and its isomers in complex environments. This work involves computing the basic properties of glycine and its isomers, both in the gas phase and the solution, comparing these isomers and examining microsolvation. Furthermore it presents QM/MM simulation of glycine in excited states in a water droplet. Simulations in excited states are crucial for determining the stability and understanding the formation of relatively complex structures, such as glycine in space is.



Fyzikální chemie III

MÍSTO: A402

KOMISE

prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc. (předseda)

Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

RNDr. Dana Nachtigallová, Ph.D.

Ing. Iva Tvrzová, Ph.D., MBA (ORLEN Unipetrol)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 Bc. Martin Dinh (M2, prof. Ing. Michal Fulem, Ph.D.)

Lékové formy paklitaxelu s poly(laktidem-co-glykolidem): Od predikce fázového chování po jejich přípravu a charakterizaci

09:20 Bc. Simona Dubcová (M2, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Machine learning for isotropic and anisotropic weak interactions

09:40 Bc. Karolína Fárníková (M1, Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová, Ph.D.)

Computational modelling of CO_2 reduction by cobaltoporphyrin catalyst

10:00 Bc. Petr Linhart (M2, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)

Conformational behaviour of ribosomal proteins

10:20 Bc. Vladimír Pouzar (M2, Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D.)

Termodynamická charakterizace fenolických rozpouštědel získávaných pyrolýzou ligninu

10:40 Bc. Martin Procházka (M2, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Modelling Strong Lewis Acids with Relativistic Quantum Chemistry

11:00 Bc. Gabriela Želonková (M2, doc. RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.)

Salt interactions with resilin-like polypeptides

vyhlášení výsledků

Lékové formy paklitaxelu s poly(laktidem-co-glykolidem): Od predikce fázového chování po jejich přípravu a charakterizaci

Bc. Martin Dinh (M2)

Školitel: prof. Ing. Michal Fulem, Ph.D.

Paklitaxel, známý také pod obchodními názvy Taxol® nebo Abraxane®, je široce prodávaným protinádorovým léčivem, přestože je kvůli své nízké biodostupnosti podáván ve formě infuze nebo v komplexu s albuminem. Oba produkty s sebou nesou mnoho závažných vedlejších účinků a vysoké výrobní náklady. Proto existuje úsilí najít vhodnější lékovou formu pro aplikaci paklitaxelu. Nabízí se využití polymerní amorfní disperze, kde je nosičem léčiva polymerní matrice stabilizující amorfní formu léčiva s vyšší biodostupností, nebo příprava polymerních nanočástic s obdobným efektem. Výběr vhodného polymerního nosiče léčiva je v současné době stále řízen metodou pokus-omyl, přičemž je důležitá vzájemná kompatibilita. Studium kompatibility paklitaxelu a modelového biodegradovatelného kopolymeru poly(D,L-laktidu-*co*-glykolidu) je tématem této práce. Kompatibilitu je možné odvodit z fázového chování, které je v této práci předpovězeno výpočetní metodou COSMO-RS kombinující kvantově-chemický model a statistickou termodynamiku, a následně ověřeno experimentálně za pomocí diferenciální skenovací kalorimetrie. Součástí studie je rovněž zkoumání vztahu mezi takto stanovenou kompatibilitou systému a vlastnostmi připravených lékových forem.

Machine learning for isotropic and anisotropic weak interactions

Bc. Simona Dubcová (M2)

Školitel: prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.

The OH radical is pivotal in atmospheric chemistry, yet its high reactivity poses challenges in creating a potential energy surface (PES). Although it is a common free radical, its study persists. To address its reactions in complex environments, I explore machine learning and artificial intelligence applications in quantum chemistry to model the OH radical's PES. Initially, I created an artificial neural network (ANN) for the Argon dimer and integrated it with the Chlorine radical. This system was chosen due to its asymmetrical interactions with neighbouring partners, a property shared by both the chlorine and OH radicals. This approach allows the study of additive and non-additive interactions in pure Argon and mixed systems of Argon and Chlorine. The developed approach can then be used to study interactions between the OH radical and water molecules.

Computational modelling of CO_2 reduction by cobaltoporphyrin catalyst

Bc. Karolína Fárníková (M1)

Školitel: Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová, Ph.D.

The increasing carbon dioxide (CO_2) levels in the atmosphere correlated with global warming are a challenge for humanity. Therefore, there has been an effort to either reduce its production or capture it and use it further. The second option can be realized by catalyzed electrochemical reduction, which leads to various products. To facilitate the electrochemical reduction many catalysts are being currently under development.In our research, we have focused on the details of the catalytic mechanism of the reduction of CO_2 to carbon monoxide, its energetics and how the catalyst can be tuned by alkali metal ions. The catalyst used was a cobalt porphyrin cage. We employed DFT calculations in continuum solvent to model chemical transformation, and classical molecular dynamics where the catalyst is solvated in aqueous solutions of various salts to study the interactions between the catalyst and ions with atomistic resolution. Our results can contribute to optimization and tuning of an environmentally interesting catalyst.

Conformational behaviour of ribosomal proteins

Bc. Petr Linhart (M2)

Školitel: doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Ribosomes are essential structures for all living organisms, given their ability to synthesise proteins. This is inevitably connected to great evolutional pressure—a tendency to conserve the parts of the ribosome most vital for its functionality or only to allow modifications which improve its overall performance. With the overarching question being the examination of the evolution of the ribosome, we have chosen and studied fragments of four ribosomal proteins common to all three domains of organisms. In this study, we have used unbiased molecular dynamics simulations of the protein fragments in an aqueous solution of a given ionic strength to examine their conformational behaviour and preferences. We have then compared our results with the conformations observed in the ribosome and with experimental NMR shifts of those protein fragments measured in the same conditions. Furthermore, using the experimental data as a benchmark, we have employed an algorithm to reweigh our simulated ensembles to better represent the experimental measurements in terms of NMR shifts.

Termodynamická charakterizace fenolických rozpouštědel získávaných pyrolýzou ligninu

Bc. Vladimír Pouzar (M2)

Školitel: Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D.

Lignin je komplexní organická makromolekula, která tvoří značný podíl hmoty dřevin. Při výrobě papíru se lignin separuje, což z něj činí, vzhledem k objemu světové produkce papíru a jeho struktuře, vhodný udržitelný zdroj aromatických sloučenin. V současnosti je ale většina ligninu neefektivně spalována a jen malé množství má další technologické využití. Nejběžnějším neenergetickým zpracováním ligninu je jeho pyrolýza, kterou lze získat směs nízkomolekulárních aromatických sloučenin, převážně guajakolu a syringolu. Pro které ale neexistuje zaběhnutý postup pro průmyslovou separaci. Nedávné studie navrhují nové potenciální postupy průmyslové separace ligninu na nízkomolekulární látky, které mají využití jako alternativní průmyslová rozpouštědla, jejich složky či prekurzory při organické syntéze. Pro další výzkum i průmyslové aplikace je nutné kvalitně popsat termodynamické vlastnosti jednotlivých produktů pyrolýzy a jejich typických směsí, pro které ale existuje jen malé množství důvěryhodných dat. Z tohoto důvodu se věnuji studiu tlaků nasycených par, entalpií fázových přechodů, teplot tání a tepelných kapacit syringolu, guajakolu a anisolu. Následně provedu simultánní korelaci tlaků nasycených par a souvisejících vlastností a získám tak detailní a přesný popis těchto veličin.

Modelling Strong Lewis Acids with Relativistic Quantum Chemistry

Bc. Martin Procházka (M2)

Školitel: prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.

The compounds of copper in the oxidation state +3 are rare, but in recent years the interest in them has grown because of their importance in biological systems. Only recently, the $Cu(CF_3)_3$ complexes have been prepared experimentally in a cooperating laboratory. The $Cu(CF_3)_3$ complexes are expected to exhibit strong Lewis acidity, as was the case with the previously reported Au analogue. The experimental characterization of the $Cu(CF_3)_3$ complexes is difficult or downright impossible, so the aid of theory is in this case crucial. To successfully predict the properties of compounds containing metals, the use of relativistic quantum chemistry methods is necessary. In this work, I explore properties of MeCN and DMF $Cu(CF_3)_3$ complexes and their Au analogues, using both DFT and *ab initio* approaches employing a relativistic Hamiltonian. The effect of the solvent environment was also studied. The approaches to calculating the fluoride ion affinity (pF^-), which serves as a way of quantifying the Lewis acidity of compounds, were also explored. These results were then compared with available data from literature.

Salt interactions with resilin-like polypeptides

Bc. Gabriela Želonková (M2)

Školitel: doc. RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Resilin is an exceptionally elastic and flexible protein found in insect, which has served as an inspiration for scientists in the development of reproducible resilin-like polypeptides. Owing to their unique properties, these materials have found numerous applications in various domains, including nanotechnology, biosensors, and drug delivery. Particularly intriguing characteristic of resilin is its thermoresponsiveness, wherein changes in temperature facilitate the transition between a dissolved protein phase and a turbid phase with precipitated protein. Furthermore, the addition of salts to the solution can significantly alter the phase equilibria, contingent upon the chemical structure of the salt. In this study, we employed molecular dynamics simulations to investigate resilin-like polypeptides in aqueous salt solutions (NaCl, NaI, NaSCN) at varying salt concentrations. Radial distribution functions and preferential binding coefficients served as the initial tools for analysis of the salt's effect, allowing comparison with experimental values of the upper critical solution temperature. Being in accord with the experiment, we delved into the cause of ion-specific interactions by analysing the salt affinity to individual amino acids or to groups based on polarity.

Fyzikální chemie IV

MÍSTO: A11

KOMISE

doc. RNDr. Eva Muchová, Ph.D. (předsedkyně)

doc. RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 Bc. Johana Fialová (M2, Mgr. Juraj Fedor, Ph.D.)

Dissociative electron attachment to CF_3I probed by velocity map imaging

09:20 Bc. Veronika Kostková (M2, doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.)

Capturing the negative thermal expansion of metal–organic frameworks in silico

09:40 Bc. Anna Lamancová (M1, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Photochemistry of acylhydrazones: theory and experiment

10:00 Bc. Martin Mašek (M1, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)

Molecular dynamics simulations of ancestral ribosome models with protein fragments

10:20 Bc. Lukáš Peterka (M1, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Revealing the Mechanism of Pyrrole and Dipyrrinone Derivatives Oxidation

10:40 Bc. Veronika Šritterová (M1, doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.)

Molecular Modelling of the Internal Dynamics of Porous Metal-Organic Liquids

vyhlášení výsledků

Dissociative electron attachment to CF_3I probed by velocity map imaging

Bc. Johana Fialová (M2)

Školitel: Mgr. Juraj Fedor, Ph.D.

Dissociative electron attachment (DEA) is an effective method of reducing reactive halogen derivates by collisions with electrons, upon which the inert halogen ions are formed. Velocity map imaging (VMI) is a technique that reveals the dynamics of this process. The electron beam is crossed with a molecular beam of the studied molecule, leading to negative ions' creation. The VMI spectrometer measures their time of flight (TOF) and kinetic energies by utilizing a time-and-position sensitive delay line detector. My study is focused on the molecule CF_3I, trifluoroiodomethane, as it could be a potential substitute for environmentally detrimental CF_4, tetrafluoromethane, which is used in plasma processing (semiconductor industry). The advantage of CF_3I is its short lifetime in the atmosphere (a few days), in comparison, the atmospheric lifetime of CF_4 is 50 000 years (the short lifetime of CF_3I is caused by photolytic cleavage of the CF_3-I bond). This creates a need to understand the electron-induced chemistry of this compound and its dynamics. For this purpose, we utilize the VMI spectrometer. In my lecture, the results of the analysis of measured data by Pamir Nag PhD. will be presented.

Capturing the negative thermal expansion of metal–organic frameworks in silico

Bc. Veronika Kostková (M2)

Školitel: doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

During the past few decades, there has been an increasing interest in metal–organic frameworks (MOFs), because they represent promising materials for a variety of applications, especially gas storage, separation, or catalysis. They draw scientists' attention due to their large diversity of structures and functions and because of their unique properties – high permanent porosity and extensive surface area.Another unusual property occurring frequently among MOFs is their negative thermal expansion.In this work, I investigate whether commonly used computational methods can describe this phenomenon correctly. The first approach being explored is a quasi-harmonic calculation applied to DFT-computed vibrational frequencies and electronic energies. The second method consists of classical force field molecular dynamics simulations. In this case, the force field is optimized to appropriately describe the negative thermal expansion for subsequent use in multicomponent simulations.

Photochemistry of acylhydrazones: theory and experiment

Bc. Anna Lamancová (M1)

Školitel: prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.

Acylhydrazones prove to be particularly fascinating as photoswitches, showcasing dynamic E/Z isomerization behavior under varying conditions. In this work, we focus mainly on two molecules, AH1 and AH2. AH1 exhibits a reversible E/Z isomerization, transitioning between these forms efficiently, while AH2, intriguingly, undergoes E to Z isomerization but lacks the ability to revert back to its original state. Experimental data were gathered through UV-Vis spectroscopy and EPR (Dr. Kovaricek, UCT Prague), shedding light on the distinct behaviors of these molecules under varying conditions. UV-Vis allowed us to track the electronic transitions during isomerization. EPR, on the other hand, offered a closer look at the spin states, providing valuable information about the electronic configurations. In theoretical approach, we employed TDDFT to simulate the spectroscopic data and optimize the structures to the T1 and S1 states. The spin-orbit coupling further enriched our understanding of the electronic transitions during isomerization processes. Our objective is to unravel the difference between these two molecules, elucidating the intricacies of their isomerization processes through a theoretical approach, thereby contributing valuable insights to the field of molecular photoswitches.

Molecular dynamics simulations of ancestral ribosome models with protein fragments

Bc. Martin Mašek (M1)

Školitel: doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Ribosome is a molecular machine orchestrating the protein biosynthesis. At the core of the ribosomal structure, comprised of ribosomal RNA (rRNA) chains and ribosomal proteins, resides the active site called peptidyl transferase center (PTC). There is a quasi-symmetrical region enveloping the PTC, which interestingly is conserved among different species. This intriguing symmetry hints at an ancient evolutionary origin, suggesting that the first protoribosomes consisted only of the inner core of contemporary ribosome and then iteratively accreted. We conducted several all-atom molecular simulations of two protoribosome models using contemporary ribosomes as a template. Our focus was on PTC constructs incorporating various ribosomal protein fragments, aiming to elucidate their role in the structure. These *in silico* experiments revealed that the presence of protein fragments enhances the rigidity of the rRNA chains, suggesting a potential role in the evolution of ribosome. Looking ahead, we are going to perform coarse grained simulations of the models to extend the simulation time scale which potentially can provide further details about our constructs.

Revealing the Mechanism of Pyrrole and Dipyrrinone Derivatives Oxidation

Bc. Lukáš Peterka (M1)

Školitel: prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.

In this work, I focus on pyrrole and dipyrrinone derivatives as model compounds for studying bilirubin oxidation, particularly significant due to the formation of oxidation products in neonatal jaundice phototherapy and the recognized role of bilirubin as an antioxidant. The experiment in a cooperating laboratory (P. Klán, MU Brno) proposes a novel photooxidation pathway for dipyrrinones, involving electron transfer from the excited dipyrrinone to triplet oxygen, followed by superoxide radical anion addition to the dipyrrinone. This study investigates the suggested mechanism using computational chemistry techniques, primarily employing DFT and the so-called constrained DFT methods. Additionally, semiempirical approaches are used. The results obtained so far are consistent with the experiment and offer insight into the mechanics of the photooxidation.

Molecular Modelling of the Internal Dynamics of Porous Metal-Organic Liquids

Bc. Veronika Šritterová (M1)

Školitel: doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

Porous liquids (PLs) represent an innovative class of materials as they combine the permanent porosity of solid sorbents and the fluid nature of liquids. Adding structured voids into liquids is highly attractive in terms of promising applications including gas capture, catalysis, and separations. This work presents a set of molecular dynamics simulations addressing the structural and dynamic properties of PLs comprised of the selected ionic liquids (ILs) and metal-organic frameworks (MOFs), in particular ZIF-8. In this study, dynamic characteristics of the fluid in close proximity to the free surface of the crystal structure are investigated at the atomic resolution. Simulated structural and dynamic properties of the solvating layer of IL are compared with those acquired from simulations of pure substances. It is ascertained that the confinement of the ILs within the MOF pore influences the structural organization. The ultimate objective is in the analysis of the phase behavior, which is affected by both the varying molecular size of the IL and the pore dimensions of MOF. Based on the obtained findings, all considered ILs are supposed to retain their fluid properties in sufficiently sized pores, making them suitable for the formation of porous liquids based on ZIF-8.

Ústav chemického inženýrství (409)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

SEZNAM SEKCÍ

1. Chemical Engineering I
2. Chemické inženýrství II
3. Chemické inženýrství III
4. Chemické inženýrství IV
5. Chemické inženýrství V
6. Chemické inženýrství VI
7. Chemické inženýrství VII
8. Chemické inženýrství VIII

SPONZOŘI ÚSTAVU CHEMICKÉHO INŽENÝRSTVÍ

ZENTIVA

ŠKODA

ORLEN Unipetrol

mondi

PRO.MED.CS Praha a.s.

pinflow energy storage

SPOLCHEMIE

KEMWATER PROCHEMIE

LOVOCHEMIE

MSD

SPT Special Products & Technologies

synthos

ANAMET ANALYTICAL & MEASURING & TESTING

BR&E

crytur

Kapaji

mega

Ranido

Altium

MarbleMat

Pilsner Urquell

vesmír

Chemical Engineering I

MÍSTO: B141B

KOMISE

prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D. (předseda)

Dr. Sandra Orvalho (UCHP CAS)

Ing. Filip Hládek

Ing. Jiří Kolář (MSD)

Ing. Dott.Mag. Kristián Kapusta (Bryan Research & Engineering)

Ing. Pavel Calta, Ph.D. (Kapaji)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 Bc. Terezie Císařová (M2, Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.)

Membranes and ladders

08:50 Bc. Viet Tomáš Nguyen (M2, Ing. Edyta Paula Adrián, Ph.D.)

Surface patterning methodology for cell culture

09:10 Petr Vítek (B1, Ing. Stanislav Valtera)

Highly selective oxidative dehydrogenation of cyclohexene on zirconia supported copper-palladium pentamer clusters

09:30 Juraj Volešíni (B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Performance prediction of organic flow battery by mathematical modeling

09:50 Bc. Kevin Klee (M1, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Artificial neural network as a surrogate model in PLA bioplastic production

10:30 Bc. Richard Lego (M1, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

The Characterisation of Capacitive Deionization in a Microfluidic System

10:50 Bc. Peter Feiler (M1, doc. Ing. Marián Janek, Ph.D.)

3D printed bone implants based on sintered hydroxyapatite

11:10 Jan Sochor (B3, Ing. Vojtěch Klimša)

Stabilization of suspension produced by anti-solvent precipitation in spray dried matrix

11:30 Bc. Maximilián Prachár (M2, Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)

Numerical analysis of industrial bioreactors for accelerated tech transfer

11:50 Bc. Mária Šoltésová (M2, Prof. Dr. Robin N. Klupp Taylor)

Plasmonic Nanosensors: Tailoring Patch Morphology

vyhlášení výsledků

Membranes and ladders

Bc. Terezie Císařová (M2)

Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

The importance and awareness of lipid nanoparticles (LNP's) have significantly increased with the COVID-19 outbreak. During this pandemic, LNP's demonstrated their effectiveness as a practical drug delivery system. However, for the m-RNA to be effectively delivered to a human body, a compatible lipidic composition had to be found. Ensuring the compatibility between the drug and the phospholipid 'barrier' is generally essential and given the vast array of drugs available, the discovery of new phospholipid compositions remains a continual necessity. Our research explores unconventional phospholipid bilayers containing the ladderane motive. This unique structural feature, formed by conjugated cyclobutenes or cyclohexanes, is naturally found in the organelles of ammonium-oxidizing bacteria, though its exact purpose within these organisms remains a mystery. Thus, we decided to conduct molecular dynamics simulations on bilayers containing ladderane phospholipids or alcohols. This theoretical exploration aims to provide new insights into their properties, broadening our knowledge in both bacterial and pharmaceutical perspective.

Surface patterning methodology for cell culture

Bc. Viet Tomáš Nguyen (M2)

Školitel: Ing. Edyta Paula Adrián, Ph.D.

Cell culture—the process of growing cells in physiological conditions outside their natural surroundings, has been a valuable technique for studying the biology of cells from multicellular organisms by providing an *in vitro* model of the tissue in a defined environment that can be readily modified and analysed. Currently, research in tissue engineering, stem cells, and cell biology in general relies mostly on culture of cells grown on flat plastic surfaces. Surface patterning has become increasingly useful in biomedical research and applications. It offers a way to study cell behaviour within an environment that more closely mirrors the complex cellular microenvironment, rather than relying on cell culture on a flat surface. This has opened new avenues for exploring cell behaviour in a more accessible and accurate manner.The aim of this work is to fabricate periodical patterned surfaces, by several methods of preparation, and study the effects of obtained surface patterning on cell proliferation, adhesion, morphology, and viability.

Highly selective oxidative dehydrogenation of cyclohexene on zirconia supported copper-palladium pentamer clusters

Petr Vítek (B1)

Školitel: Ing. Stanislav Valtera

The subnanometer size of the $Cu_{5-n}Pd_n$ ($0 \leq n \leq 5$) clusters grants them different behaviour compared to the bulk material. The properties of said clusters are not only composition-dependent, but also size-dependent, meaning that their properties can be greatly altered by even one atom change in their structure. Our main goal was to see how the swapping of one atom in a Cu-Pd pentamer cluster affects its activity and selectivity. We tested each Cu-Pd pentamer during oxidative dehydrogenation of cyclohexene. From our six pentamers (Cu_5, Cu_4Pd_1, Cu_3Pd_2, Cu_2Pd_3, Cu_1Pd_4, Pd_5) were active 5 clusters containing palladium, cluster Cu_5 was inactive throughout testing. We observed a major difference in the activity of mixed clusters during the first and second ramp (lower activity during the second ramp). There was no significant change in the activity of the cluster Pd_5. Even with the change in activity, there was no notable change in selectivity. The selectivity of the bimetallic clusters was 100% toward benzene and the selectivity of Pd_5 was over 98%, with produced cyclohexadiene and CO_2 less than 1% each. The findings from this study show the difference in the properties of each cluster (exact composition plays a key role). It also shows the potential of mixed clusters in catalysis.

Performance prediction of organic flow battery by mathematical modeling

Juraj Volešíni (B3)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

The surge in renewable energy and weather-of-day dependency emphasize a need for safe and reliable stationary energy storage. Redox flow batteries (RFBs) presently offer the perspective storage solution. Most RFBs rely on vanadium salts, yet the fluctuating vanadium cost motivates research for alternatives. Organic electrolyte-based RFBs (ORFBs) can be significantly cheaper and modified to meet desired requirements.In this work, we developed a mathematical model to study and enhance the performance of organic redox flow battery. We have separated the battery into four compartments: positive and negative half-cells, and two tanks. The model describes the change in concentration of each chemical component and the change in volume of electrolytes. The membrane transport of active species is described by the Nernst-Planck equation and the transport of water is driven by osmotic pressure difference. To describe electrochemical properties, we use the Tafel equation to calculate overpotential at the electrodes, Ohm's law to determine voltage drop over the membrane, and the Nernst equation for equilibrium potential. The model results are validated against experimental measurements. Using the model results, we can increase the battery performance and efficiency for real-world use.

Artificial neural network as a surrogate model in PLA bioplastic production

Bc. Kevin Klee (M1)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

The most widely produced renewable and biodegradable polymer is polylactic acid (PLA). A multiscale mathematical model has been built to determine rheological properties of PLA melt during production with the potential to become a soft sensor in on-line optimization and control of a polymerization reactor. Unfortunately, prediction of detailed polymer molecular architecture using the Monte Carlo method (which is incorporated in the developed model) is computationally demanding, thereby limiting use of the model in real time during production. Therefore, the goal of this work is to develop an artificial neural network (ANN) as a surrogate model to be used in real-time PLA production. The structure of the employed ANN is presented along with a description of the process of deep learning as well as sampling points generation in the model parametric space using the Latin hypercube sampling method.

The Characterisation of Capacitive Deionization in a Microfluidic System

Bc. Richard Lego (M1)

Školitel: doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

With increasing population growth and ever-more-threatening climate changes, freshwater accessibility is becoming one of the biggest concerns of modern society. Since the predominant portion of Earth's water is saline, harnessing freshwater from saltwater reservoirs is a direct and viable solution. Among the various water desalination technologies (e.g. reverse osmosis, electrodialysis), capacitive deionization (CDI) stands out as a great alternative for the desalination of low-salinity water. CDI is a groundbreaking electrokinetic water purification technology which holds immense potential to address these global freshwater scarcity challenges, due to its energy efficiency and versatility. The CDI process resides in applying an external voltage across two parallel electrodes, between which a concentrated solution is directed. As the solution flows alongside these electrodes, dissolved ions are carried by the direct electrical current to the charged electrodes, where they are temporarily stored. Thus, a deionized solution exits the system. The main goals of this project are to (i) employ nanostructured materials as electrodes in CDI systems, (ii) characterize the CDI process in such systems, and (iii) determine the influence of process conditions.

3D printed bone implants based on sintered hydroxyapatite

Bc. Peter Feiler (M1)

Školitel: doc. Ing. Marián Janek, Ph.D.

Recovering from a bone fracture is a very complex and strenuous process. In the cases of especially complex fractures with bone loss, the human body isn´t capable of fully recovering on its own. In these situations, where surgical intervention is required, bone tissue engineering can be used to create bone implants, providing structural support for the growth of a new bone. Hydroxyapatite (HA) has been widely used for these purposes due to its natural bioactive properties. However, to ensure favorable conditions for the growth of the bone tissue on the prepared scaffolds in addition to being biocompatible the scaffold's porosity needs to be within a specific size range. Standard methods of scaffold preparation are not able to guarantee the desired porosity and thus, there has been a continuous search for novel means of HA scaffold production. 3D printing is emerging as one of the most promising methods, allowing for the material shaping of very complex scaffolds. This technique meets the individual patients' requirements while being able to produce the desired porosity distribution within the implant. In this work, we have explored the possibility of using commercial 3D printers to produce sintered HA scaffolds and evaluated the scaffold's mechanical and biological properties.

Stabilization of suspension produced by anti-solvent precipitation in spray dried matrix

Jan Sochor (B3)

Školitel: Ing. Vojtěch Klimša

Transforming raw pharmaceutical materials into a desired product is a demanding and expensive process including many unit operations such as milling, granulation, coating and tablet pressing. Spray drying is a method of transforming liquid feed into a fine powder, which serves as a base for said procedures.Lowering the size of drug particles greatly improves their overall solubility, since the surface to volume ratio also increases. To produce nano-sized drug particles using spray drying, we can use anti-solvent precipitation creating suspension, which serves as a stock feed. The issue of suspension instability is solved by immediately feeding the suspension into the spray drier, interrupting further crystal growth. By adding hydrophilic excipient into the anti-solvent (aqueous) phase, the produced powder forms an amorphous excipient matrix containing crystalline drug with improved water solubility and powder flow properties. The aim of my work is finding a method incorporating spray drying and anti-solvent precipitation of producing powder that would be ready for direct tablet pressing directly after the spray drying, condensing many production steps into one continuous process, while improving bioavailability of the drug itself.

Numerical analysis of industrial bioreactors for accelerated tech transfer

Bc. Maximilián Prachár (M2)

Školitel: Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

Biological medical products are gaining share in the pharmaceutical industry with 50% of newly approved drugs in 2022 being biologics. The development of new cell lines is performed at lab scale with later expansion of production to the pilot scale and then to the final manufacturing scale. To avoid cost- and time-demanding experiments to estimate the required operating parameters for different scales, the application for accelerated tech transfer and scale-up for industrial Single-use bioreactors (200-2000L) used at Takeda Pharmaceutical Company production and R&D sites is being developed. The operation of the bioreactors is modeled using Computational Fluid Dynamics to obtain data for critical process parameters inside the bioreactors with focus on oxygen transfer rate. The established CFD model is used for parametric study, employing the Design of Experiment approach to reduce the computation time. A mathematical model for the relationship between critical process parameters and input parameters, i.e., working volume, agitation rate and aeration, will be created. Finally, the mathematical model will be implemented in the graphical user interface to offer the production and R&D sites easy-to-use application to accelerate the development of new biological medical products.

Plasmonic Nanosensors: Tailoring Patch Morphology

Bc. Mária Šoltésová (M2)

Školitel: Prof. Dr. Robin N. Klupp Taylor

Exploring bimetallic patchy nanoparticles, this work aims to transform dendritic gold-only patches into more stable and dense structures by the incorporation of silver. The change in patch morphology induces plasmonic resonance, a phenomenon where the nanoparticles resonate with incident light. This enhances light absorption in the visible or near-infrared range which is crucial for optical sensing.The main focus of the work was on the reaction kinetics as a fundamental element in understanding the mechanism of patch formation. It was discovered that a slower kinetics rate favors the formation of dense patches. Consequently, the challenge became to establish a reproducible method to intentionally slow down the kinetics, enabling precise control over the patch morphology, which was analyzed using UV-VIS-NIR spectroscopy and SEM.Thanks to their multifunctional nature, patchy particles offer a world of (almost) endless possibilities - their patches can be functionalized to serve as optical sensors for chemical sensing, environment monitoring, and in the medical field, even for disease detection and diagnostics or cancer treatment through localized hyperthermia therapy. Furthermore, their applications extend to vibrant pigments or catalysts, optimizing surface area to volume ratio.

Aoni, Rifat Ahmmed & Hasan, Md Rabiul & Ahmed, Rajib & Miroshnichenko, Andrey. (2018). Microstructured Optical Fiber-Based Plasmonic Sensors

Chemické inženýrství II

MÍSTO: BS4

KOMISE

prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha (předseda)

Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Ing. Vojtěch Šálek

Ing. Marek Václavík, Ph.D. (Škoda Auto)

Ing. Jaroslav Padevět, Ph.D. (Ranido)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 Eliška Prostějovská (B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Kinetika přeměny aktivních center v katalyzátoru Cu/SSZ-13 pro selektivní redukci NO_x

08:50 Monika Poláčková (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Vplyv koncentrácie aditív na stabilitu polymérnej suspenzie vo vodnom prostredí

09:10 Adam Opravil (B2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Výzkum a vývoj pevných formulací z glukanových částic

09:30 Hynek Housar (B3, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Preparation and optimization of lipid and lipid-free formulations for enhancing cannabinoid bioavailability

09:50 Barbora Šašková (B2, Ing. Filip Zavřel)

Příprava kontrastních látek na bázi gadolinia a glukanových částic

10:30 Lucie Bartošová (B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Temperature management during hydrogenolysis of methylbenzenes in a catalytic fixed bed reactor

10:50 Lukáš Bednář (B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Stanovení efektivní permeability z 3D rekonstrukcí porézní stěny filtru

11:10 Marek Drápela (B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Impact of additives on triboelectric sorting of plastic waste

11:30 Alexandra Hlaváčová (B3, doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

Synthesis and characterization of chemically crosslinked cellulose hydrogels for flexible electronic skins

vyhlášení výsledků

Kinetika přeměny aktivních center v katalyzátoru Cu/SSZ-13 pro selektivní redukci NO_x

Eliška Prostějovská (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Emise výfukových plynů značně přispívají k znečistění ovzduší. U vozidel s dieselovými motory jsou největší problematikou emise oxidů dusíku (NO_x), které se odstraňují pomocí selektivní katalytické redukce (SCR), kde jako redukční činidlo slouží NH_3. Při ní se využívají porézní zeolitové katalyzátory s iontově vyměněnou mědí, nejčastěji Cu/SSZ- 13. V provozu je SCR katalyzátor vystaven vysokým teplotám, což vede k jeho stárnutí. Vlivem zvýšených teplot přechází atomy mědi z formy ZCuOH do stabilnější Z_2Cu, kde Z označuje vazné místo na atomu hliníku v zeolitu. Aktivní centra mohou také být blokována sloučeninami síry, které působí jako katalytický jed. Stárnutí ovlivňuje funkce katalyzátoru a může mít za důsledek snížení jeho efektivity. V rámci této práce byl vytvořen matematický model popisující kinetiku transformace aktivních center během teplotního stárnutí katalyzátoru. Zároveň byl studován vliv jednotlivých center na aktivitu katalyzátoru při oxidačních reakcích v SCR konvertoru. Studována byla oxidace NO, NH_3, CO a SO_2. Kinetické parametry byly vyhodnoceny na základě experimentálních dat z laboratorního reaktoru získaných pro čerstvé a zestárlé vzorky. Vyvinutý model umožňuje předpovídat vývoj aktivity katalyzátoru a dosahovaných konverzí škodlivin při dlouhodobém provozu.

Vplyv koncentrácie aditív na stabilitu polymérnej suspenzie vo vodnom prostredí

Monika Poláčková (B3)

Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Polymérne peny sú široko využívané spoločnosťou vďaka dobrým izolačným schopnostiam, nízkej hmotnosti či šetrnosti k životnému prostrediu. Ich výroba je vsádzkový proces napeňovania v autokláve, kedy je vodná suspenzia polymérnych častíc vystavená nadúvadlu pri zvýšenom tlaku a teplote pohybujúcej sa okolo teploty topenia polyméru. Pri tejto teplote dochádza k agregácii natavených polymérnych častíc do veľkých zhlukov, a preto je potreba pridávať do systému aditíva, ktoré tomuto deju zabraňujú. Z času na čas výrobný proces zlyháva a dochádza k ich nežiadúcemu zlepovaniu. Táto práca si kladie za úlohu zistiť a vyriešiť, prečo k tomuto deju dochádza. Jeden z možných dôvodov je stabilita suspenzie aditív, ktorá bola skúmaná porovnávaním veľkostnej distribúcie agregujúcich častíc v suspenziách s rôznymi koncentráciami aditív. Pri sýtení nadúvadlom dochádza k jeho rozpustnosti vo vodnej suspenzii, čoho následkom je zmena pH prostredia. To môže značiť ďalší ovplyvňujúci faktor, ktorý bol v tejto práci taktiež skúmaný.

Výzkum a vývoj pevných formulací z glukanových částic

Adam Opravil (B2)

Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

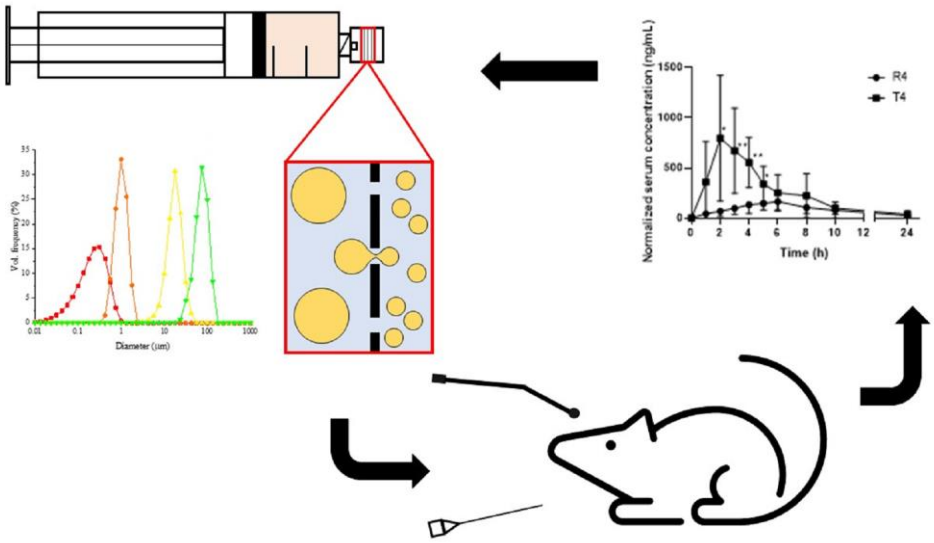
V současné době spadá sedmdesát až devadesát procent účinných látek do kategorie špatně rozpustných ve vodném prostředí. Tento faktor negativně ovlivňuje absorpci léčiv po perorálním podání a zároveň biologickou dostupnost. Jednou z možností, jak řešit tento problém je užití glukanových částic. Ty se získávají odstraněním vnitřních organel z kvasinky pekařské (Saccharomyces cerevisiae). Předností tohoto procesu je jeho jednoduchost, rychlost a nízkonákladovost. Glukanové částice slouží jako nosič aktivní látky, čímž zvyšují její rozpustnost, kterou též podporuje fakt, že výsledná směs má amorfní povahu. Má práce se zabývá přípravou těchto částic a zejména pak jejich formulováním do tablet. Tablety zaručují dobrou stabilitu účinné látky a přesné dávkování. Dále umožňují snadnou optimalizaci kinetiky uvolňování volbou procesních parametrů a složením formulací. Za pomoci nejrůznějších analytických metod sleduji vliv glukanových částic na mechanické, dezintegrační a disoluční vlastnosti tablet.

Preparation and optimization of lipid and lipid-free formulations for enhancing cannabinoid bioavailability

Hynek Housar (B3)

Školitel: prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

This work targets the potential use of cannabinoids in the battle with inflammatory diseases such as rheumatoid arthritis (RA). These plant-based compounds from Cannabis sativa can interact with the endocannabinoid system and many other cellular receptors in the human body and thus reduce inflammation. Our goal is to test the possibility of using various cannabinoids for the treatment of RA. A common problem for all cannabinoids is their very low solubility in water, resulting in very low bioavailability. In this respect, oil-based formulations can improve bioavailability; however, on the market, only oil solutions exist, with no study of how droplet size would impact cannabinoids bioavailability. Therefore, our goal is to prepare stable emulsions with various droplet sizes. This was done through processes using Ultra-Turrax, membranes, sonication, or high-pressure homogenization. Consequently, such emulsions were tested in vivo on rats. Based on the results, it was found that the largest interfacial surface might not be as beneficial for bioavailability as we thought, and there was an optimal droplet size with the highest bioavailability.



Příprava kontrastních látek na bázi gadolinia a glukanových částic

Barbora Šašková (B2)

Školitel: Ing. Filip Zavřel

Glukanové částice (GPs) se dají využít pro cílené doručování látek prostřednictvím fagocytózy. Octomilka obecná (*drosophila melanogaster*) je pro tento systém použitelná jako *in vivo* model s krátkým generačním časem. Vytvoření ucelenějšího obrazu o fungování tohoto systému doručování látek je však vlivem nedostatečné rozlišovací schopnosti běžně používaných zobrazovacích metod obtížné. Naším cílem je proto vytvoření kontrastního média na bázi gadolinia a glukanových částic (GPs), umožnující lokalizaci částic uvnitř organismů pomocí metod výpočetní topografie (CT) a magnetické rezonace (MRI). Byla navržena dvoukroková *in situ* metoda přípravy kompozitů na bázi GPs a gadolinia dvou formách – nanočástice Gd_2O_3 a alginátový gel (Gd^{3+}). Pro přípravu kompozitů s Gd_2O_3 byla využita syntéza z $Gd(CH_3COO)_3$ a TMAH, pro kompozity s alginátovým gelem reakce alginátu s $GdCl_3$ (při testování metody nahrazován $CaCl_2$). Obě cesty přípravy byly optimalizovány. Připravené kompozity vykazovaly dobré morfologické vlastnosti (jednotlivé částice bez agregátů). Další charakterizace připravených kompozitů bude zaměřena na celkový obsah gadolinia, stabilitu a cytotoxicitu.

Temperature management during hydrogenolysis of methylbenzenes in a catalytic fixed bed reactor

Lucie Bartošová (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

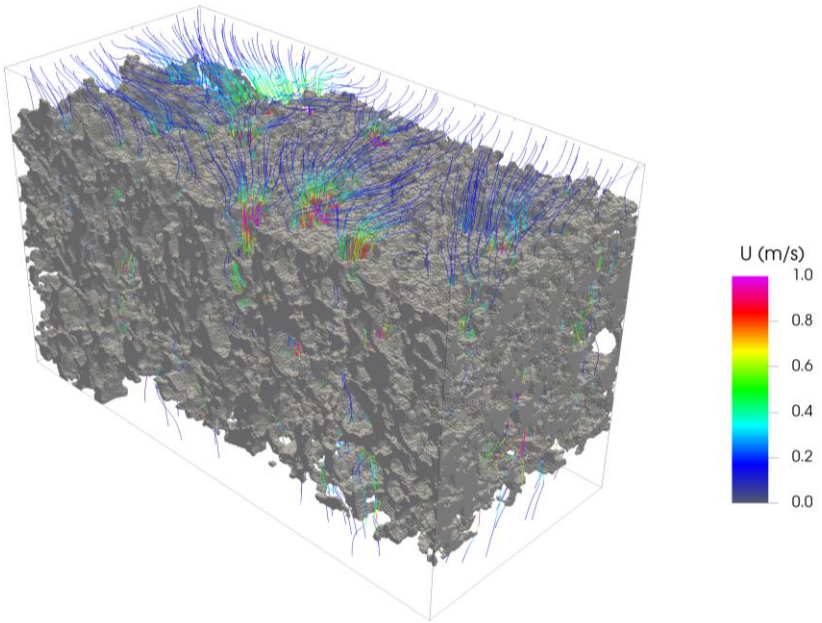
The majority of aromatic hydrocarbons are harmful to living organisms and the environment. Handling these hazardous substances is a crucial part of petrochemistry. A frequently used processing method is hydrogenolysis, a chemical reaction that allows the breakdown of an aromatic cycle by the addition of a hydrogen atom to the resulting molecule. This allows better utilization of aromatic hydrocarbons by transforming them into simpler alkanes, which have wider industrial applications. However, to obtain desired products with longer carbon chains, it is essential to keep the reaction temperature within the needed limits. Otherwise, the process is degraded by hydrocracking. This work aims to understand mass, momentum, and heat transfer in an experimental packed-bed reactor utilizing the developed (2+1)D computational fluid dynamics (CFD) model validated on the data supplied by the industrial partner. The long-term goal is to design an industrial reactor configuration to keep the temperature within the stable limits optimal for reaction selection.

Stanovení efektivní permeability z 3D rekonstrukcí porézní stěny filtru

Lukáš Bednář (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Ve spalovacích motorech vznikají jemné saze, které jsou škodlivé lidskému zdraví. K jejich odstranění se používá filtr pevných částic. Permeabilita stěny je jedním z klíčových parametrů filtru, neboť ovlivňuje tlakovou ztrátu pozorovanou u celého filtru. Cílem této práce je z obrazových dat získaných rentgenovou mikrotomografií pro různé vzorky porézních filtrů pevných částic předpovědět permeabilitu stěny filtru. V prvním kroku jsou obrazová data využita na 3D rekonstrukci morfologie stěny. V rámci zpracování obrazových dat je zkoumán vliv různých prahových hodnot použitých pro rozlišení jednotlivých fází. Získaná rekonstruovaná stěna je pak převedena na výpočetní síť a využita pro CFD simulaci toku plynu médiem (viz obrázek). Z vypočítaného tlakového pole je pak vyhodnocena průměrná permeabilita stěny. Tato hodnota předpovězená modelem je následně porovnána s naměřenými daty z experimentů. Výsledky ukazují dobrou shodu mezi simulovanou a změřenou permeabilitou pro vzorky s různou mikrostrukturou stěny.



Impact of additives on triboelectric sorting of plastic waste

Marek Drápela (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Many additives are used in the polymer industry to improve products. These substances can negatively affect the recycling process. Thus, sorting plastic waste not only by bulk material but also by additive content can be valuable. The presented work focuses on the impact of colourants on the triboelectric sorting of plastic waste. This method is based on generating a surface charge on the ground waste by friction between the waste particles and a particular plate. Humidity, size and composition of involved objects are important. Various commercially available plastics were tribocharged by vibration in cells made of six different plastic materials. We measured the saturation charge and the charging behaviour over time. Then we modified selected plastics with different additives and their concentrations and tested them as before. The effect of additives was mainly observed in the experiments performed in the PP and PVC cells. The presence of chlorine in the PVC cell and in one of used pigments is thought to be responsible for the different charging behaviour. Measurements with the pigment blue showed a dependence on the concentration of the colourant. In conclusion, triboelectric separation could be used for sorting plastics with specific additives from the separated material.

Synthesis and characterization of chemically crosslinked cellulose hydrogels for flexible electronic skins

Alexandra Hlaváčová (B3)

Školitel: doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Electronic skins (e-skins) are artificial flexible skins mimicking the mechanical performance and sensing properties of natural skin by transducing numerous external stimuli into electrical signals. Stretchable and compressible hydrogels based on biopolymers have drawn great attention in recent years for development of e-skins for various applications such as human wearable sensors and feedback sensors in soft robotics. Among them, cellulose, an abundant biopolymer, is an attractive candidate for the development of environmentally friendly and biocompatible electronic devices. However, the combination of sensory and mechanical properties is still a challenge for imitating human skin. In this study, cellulose based-hydrogels are synthesized using chemical cross-linking approach based on free radical polymerization of allyl cellulose in NaOH/urea aqueous solution. Effect of various experimental variables such as the degree of substitution of cellulose with allyl groups obtained in first step of the chemical reaction, concentration of the initiator, and reaction temperature on the swelling degree, morphology, and physico-chemical properties are studied using various characterization techniques.

Chemické inženýrství III

MÍSTO: BS9

KOMISE

doc. Ing. Zdeněk Grof, Ph.D. (předseda)

Ing. Stanislav Chvíla

Ing. Karel Mařík

Ing. Václav Šmíd (Mondi Štětí)

Ing. Vitaliia Nelepp (Pro.Med.CS Praha)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 Jan Šmahlík (B3, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Dual functional nanomaterials for the synergistic degradation of dyes and solar photocatalytic regeneration

08:50 Magdaléna Menčíková (B3, doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

Development of high-drug-loading amorphous solid dispersions using in situ thermal cross-linking process

09:10 Vanesa Virsiková (B2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Understanding diffusion of gaseous penetrants in polyolefin melts

09:30 Jakub Fišner (B2, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Validace funkčnosti prototypu zařízení na kontinuální antisolventní precipitaci

09:50 Jana Jarolímková (B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Modelování elektrostatických sil při filtraci nanočástic ve výfukovém plynu

10:30 Lukáš Ziebiker (B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Filtrační účinnost a tlaková ztráta filtrů s různou mikrostrukturou katalytické vrstvy

10:50 Adam Josef Vaculík (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Kvalifikační studie jednoúčelového dávkovacího stroje na pevné lékové formy

11:10 Adam Pipíška (B3, doc. Ing. František Rejl, Ph.D.)

Termografické pozorovanie fázového rozhrania kvapalina-plyn

11:30 Romana Hupková (B3, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Enkapsulace bakteriálních buněk do polymerní matrice

vyhlášení výsledků

Dual functional nanomaterials for the synergistic degradation of dyes and solar photocatalytic regeneration

Jan Šmahlík (B3)

Školitel: prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

Polluted water is one of the biggest problems facing the world, and a big part of the problem is attributed to industries using dyes. In recent years, there has been many initiatives to reduce the amount of polluted water produced. In this work, I am focusing on the preparation of a mesoporous nanomaterial which is capable of adsorbing dyes on its surface followed by degradation of the dyes under solar irradiation. This should be very cheap and ecological way to battle this situation. To achieve easy separation and reuse, the particles were encapsulated into polymeric beads. The resulting materials showed good adsorption and photocatalytic properties. Under simulated solar irradiation, the dye was degraded and reduced, with the beads regaining most of their original colour. With these properties, there might be a big use of this material in wastewater treatment, which will provide much cleaner water to people, animals and crops.

Development of high-drug-loading amorphous solid dispersions using in situ thermal cross-linking process

Magdaléna Menčíková (B3)

Školitel: doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

One of the most promising strategies to enhance the bioavailability of poorly water-soluble active pharmaceutical ingredients (APIs) is to formulate it as an amorphous solid dispersion (ASD) using a polymeric carrier. ASD system consists of an amorphous API stabilized by a polymer through the establishment of intermolecular interactions. Recent studies on ASDs showed that high polymer concentration is often required to prevent the risk of API recrystallization during the storage, thus making this approach unsuitable for high-API-loading ASDs. Herein, thermal crosslinking approach for development of high-API-loading was explored. Specifically, high loading of Indomethacin (model API) in thermally cross-linked poly(acrylic acid) (PAA) and poly(vinylalcohol) (PVA) was investigated. First, the solubility of indomethacin in the polymeric matrix (i.e., PVA and PAA) and their mutual miscibility were determined by calorimetric measurements followed by the construction of the phase diagrams. Then, ASDs containing 90 wt.% indomethacin were prepared by *in situ* thermal crosslinking of PAA and PVA. The effect of various processing parameters like time and temperature of crosslinking on the solid-state properties and the physical stability of the prepared formulations was investigated.

Understanding diffusion of gaseous penetrants in polyolefin melts

Vanesa Virsiková (B2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

To optimise material performance and achieve more efficient production and recycling methods, understanding transport phenomena of substances through materials is essential, since it predicts their behaviour in various conditions and scenarios. This work focuses on understanding the diffusion of gaseous penetrants in semi-crystalline polyolefin melts such as HDPE (High-density Polyethylene) and LLDPE (Linear Low-Density Polyethylene). These polymers are important in various industries due to their unique properties. This study aims to develop the pressure decay method and apply it for measurements of diffusivity in polyolefin samples. The experimental procedure involves degassing a sample at the defined temperature, and repeated pressurisation with a penetrant gas. First, the pressure changes due to sorption and desorption are recorded. Then, the data is used to calculate the diffusion coefficient employing Fick's second law calculated by the finite volume method in the Matlab program. By developing unique apparatuses to study polyolefins, one can better understand complex semi-crystalline systems and transport phenomena in semi-crystalline polymers.

Validace funkčnosti prototypu zařízení na kontinuální antisolventní precipitaci

Jakub Fišner (B2)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Jedním z problémů nově vyvíjených léčiv je jejich špatná rozpustnost ve vodných médiích – dle BCS klasifikace spadá až 40% léčiv do kategorií II. a IV., tedy látky se špatnou rozpustností, což vede k nízké biodostupnosti. Tento problém můžeme řešit mimo jiné vhodnou formulací, například ve formě nanokrystalů. Vyrobíme-li krystalické nanočástice látky, zvýšíme zásadně povrch částic vzhledem k objemu a tím docílíme lokální supersaturaci při rozpouštění ve fyziologickém roztoku. Proto se stávají mnohem lépe použitelnými v léčbě mnoha onemocnění. Moje práce se zabývá přípravou nanokrystalů kontinuální antisolventní precipitací v průtočném zařízení, resp. validací funkčnosti tohoto prototypu. Validace zařízení spočívá v porovnání proměnných parametrů, tedy celkového průtoku, koncentrace organické a vodné složky, volba konkrétních stabilizátorů, volba konkrétní modelové látky, nebo léčiva, a možnost využití filtru. Vliv jednotlivých parametrů byl validován tak, že hodnoty všech parametrů s výjimkou validovaného byly fixní, a byly sledovány vlivy změny validovaného parametru na výslednou distribuci velikosti částic a jejich stabilitu. Cílem práce je jednotlivé vlivy popsat, a zároveň zajistit stabilní a konzistentní precipitaci produktu.

Modelování elektrostatických sil při filtraci nanočástic ve výfukovém plynu

Jana Jarolímková (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Se zhoršující se klimatickou situací přichází přísnější emisní limity, které regulují množství škodlivých pevných částic ve výfukových plynech. Splnění těchto norem u automobilů se spalovacími motory je možné jen díky filtrům pevných částic, které jsou nutnou součástí systémů pro ošetření spalin. Ve filtru plyn prochází přes tenkou porézní stěnu z keramického materiálu. Tato práce se zabývá elektrostatickými silami, které mohou působit na mikroskopické pevné částice, a to i v případě poměrně malého povrchového náboje. Model popisující elektrostatické interakce jsem implementovala do již existujícího CFD modelu toku plynu skrz 3D rekonstruovanou porézní stěnu filtru, spojeného s řešičem pohybových rovnic pro jednotlivé pevné částice. Základem pro výpočet elektrostatických sil je Coulombův zákon, pomocí kterého je definována intenzita elektrostatického pole generovaného stěnami filtru. Toto pole následně působí na opačně nabité nanočástice v proudícím plynu, které jsou přitahovány ke stěně filtru. Provedená studie předpovídá pozitivní vliv elektrostatických interakcí na filtrační účinnost. To je v souladu s naměřenými experimentálními daty, které ukazují vyšší záchyt částic, než by odpovídalo pohybu částic ovlivněnému pouze setrvačností, třecími silami a Brownovým pohybem.

Filtrační účinnost a tlaková ztráta filtrů s různou mikrostrukturou katalytické vrstvy

Lukáš Ziebiker (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V současnosti je kladen stále větší důraz na ochranu životního prostředí. S tím přicházejí stále přísnější legislativní nařízení na emise spalovacích motorů. K čištění výfukových plynů se používají katalytické filtry, přeměňující škodlivé složky (CO, NO_x a C_XH_Y) na zdravotně nezávadné produkty (CO_2, N_2, H_2O) a zároveň zachytávají pevné částice sazí. Vzorky katalytických filtrů použité v této práci jsou tvořeny z kordieritového substrátu s voštinovou strukturou, do které je nanesena vrstva katalyzátoru Pt/γ- Al_2O_3. Klíčové parametry katalytických filtrů – filtrační účinnost, tlaková ztráta a katalytická aktivita – závisí na mikrostruktuře filtru a mění se se zanesením sazemi. Cílem této práce je změřit vývoj filtrační účinnosti a tlakové ztráty pro vzorky s různou mikrostrukturou nanesené katalytické vrstvy. Filtry s katalyzátorem naneseným do pórů ve stěně vykazují nízkou tlakovou ztrátu, ale také nízkou počáteční filtrační účinnost. Filtry s katalyzátorem naneseným na vnějším povrchu stěny mají vysokou počáteční filtrační účinnost, ale také vyšší tlakovou ztrátu. Pro obě konfigurace se v průběhu zanášení filtrační účinnost i tlaková ztráta postupně zvyšují. Naměřená data umožňují výběr struktury filtru s vhodnými provozními vlastnostmi i kalibraci matematických modelů.

Kvalifikační studie jednoúčelového dávkovacího stroje na pevné lékové formy

Adam Josef Vaculík (B3)

Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

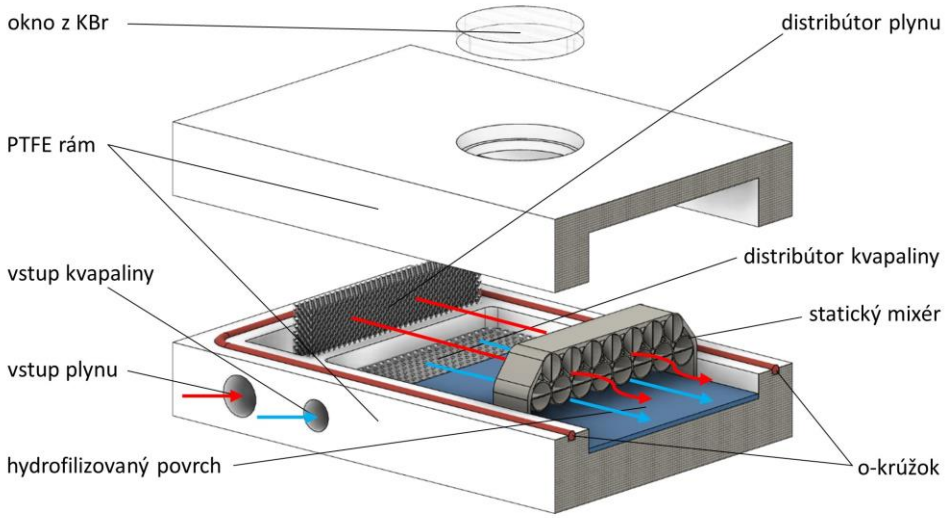
Jednou ze zásadních součástí úspěšné léčby je ochota a schopnost pacienta dodržovat předepsanou léčebnou kúru. S větším množstvím léků vzrůstá i pravděpodobnost vynechání jedné či více dávek, což je spojeno s velkými náklady pro systém zdravotní péče (odhadem 125 miliard EUR ročně v EU). Je tedy zapotřebí zjednodušit a zefektivnit tyto léčebné režimy. Toho lze dosáhnout nahrazením několika běžných lékových forem kapslí plněnou minitabletami. Minitablety se z hlediska uvolňování účinných látek chovají podobně, jako běžné tablety, ale obsahují výrazně menší množství excipientů a jsou tedy znatelně menší. Díky velikosti minitablet je možné tvořit jejich personalizované kombinace a plnit jimi želatinové kapsle, výsledný léčivý přípravek, poté obsahuje přesně stanovenou kombinaci účinných látek, kterou pacient potřebuje. Tato práce se zabývá provedením kvalifikační studie pro prototyp stroje, který na základě informací o pacientovi automaticky kombinuje minitablety do želatinových kapslí. Dále si tato práce klade za cíl stanovit rozmezí provozních parametrů, ve kterém je zajištěna požadovaná přesnost a rychlost stroje.

Termografické pozorovanie fázového rozhrania kvapalina-plyn

Adam Pipíška (B3)

Školitel: doc. Ing. František Rejl, Ph.D.

Termografia sa ukazuje ako potenciálny základný prvok vo vývoji metodiky pre stanovenie efektívnej medzifázovej plochy pri destilácií. Podarilo sa dokázať, že teplota zmeraná termokamerou zameranou na hladinu miešanej kvapaliny v systéme s plynom o inej teplote, zodpovedá teplote fázového rozhrania tak, ako ju chápu a používajú chemickí inžinieri. Ďalším krokom vývoja tejto metódy je pozorovanie teploty fázového rozhrania v systéme tvorenom laminárne tečúcou kvapalinou a turbulentne prúdiacim plynom, kde dochádza k súčasnému prenosu tepla a hmoty. Prvá časť práce sa sústreďuje na technické riešenie experimentálnej aparatúry. Pre prevedenie experimentu je kľúčové zabezpečiť laminárny tok kvapaliny, čo vyžaduje návrh distribútorov kvapaliny a systém riadenia výšky hladiny. Turbulentné prúdenie plynu je riešené umiestnením statických mixérov pozdĺž aparatúry. Použitie okien z materiálu priepustného pre infračervené spektrum nám umožní pozorovanie pomocou termokamery. V druhej časti práce sa venujeme meraniu koeficientu prestupu hmoty v plynnej fáze metódou absorpcie amoniaku do zriedenej kyseliny sírovej. Na základe meraní potom optimalizujeme konštrukciu a nastavenie aparatúry tak, aby sme dosiahli čo najnižší odpor proti prenosu tepla a hmoty v plynnej fáze.



Enkapsulace bakteriálních buněk do polymerní matrice

Romana Hupková (B3)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Mikrobióm označuje kolektívne spoločenstvo mikroorganizmov obývajúcich konkrétny hostiteľský organizmus. Každé miesto na tele predstavuje jedinečné prostredie, ktoré môže zahŕňať bilióny mikrobiálnych buniek a stovky odlišných kmeňov, ktoré sa v celom tele odlišujú od jedného miesta k druhému. Napriek všadeprítomnosti a zásadnej dôležitosti mikrobiómov v živote, ako aj ich silnému spojeniu so zdravím a chorobami, zostáva naše chápanie ich vzájomných interakcií a ich hostiteľov v počiatočných štádiách vývoja. Cieľom tejto práce je pripraviť mikrokapsuly so zapuzdrenou bakteriálnou kultúrou a skúmať interakcie medzi bakterialnymi buňkami. Spôsob enkapsulácie umožňuje vytvorenie alginátových hydrogélových kapsúl na enkapsuláciu baktérií, aby sa zabezpečila integrita a stabilita hydrogélu.

Chemické inženýrství IV

MÍSTO: B 06

KOMISE

prof. Ing. Dalimil Šnita, CSc. (předseda)

Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

Ing. Miroslav Večeřa

Ing. Lucie Pilíková (Škoda Auto)

Bc. Jan Halouzka (Lovochemie)

Ing. Patricie Novotná (Synthos)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 Vojtěch Hampl (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Příprava a charakterizace farmaceutické formulace na základě koloidně stabilní nanosuspenze

08:50 Bc. Anna Šmídová (M1, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Predikce povrchového napětí s využitím rozšířené van der Waalsovy stavové rovnice

09:10 Bc. Karolína Slonková (M1, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)

Depotní formulace pro lokální řízené vylučování antibiotik pomocí magnetického pole

09:30 Bc. Rostislav Huňa (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Model pasivního míchání mikrofluidického systému kontinuální antisolventní precipitace

10:10 Zuzana Coufalová (B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Změny v klíčových vlastnostech katalytického filtru v závislosti na množství zachycených sazí

10:30 Bc. Adriana Augustínová (M1, Ing. Mária Zedníková, Ph.D.)

Modelovanie korózie v technologickom okruhu s kvapalnou zliatinou PbLi

10:50 Šimon Hudínek (B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Simulace záchytu částic v automobilovém filtru pomocí modelu kolektorů

11:10 Bc. Kryštof Dorňák (M1, Ing. Lucie Mašková)

Příprava kompozitních struktur s teplotně-řízeným vylučováním aktivní látky

11:30 Bc. Jiří Huml (M1, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Metoda přípravy systémů pro výrobu gelových částic pomocí stop flow litografie

vyhlášení výsledků

Příprava a charakterizace farmaceutické formulace na základě koloidně stabilní nanosuspenze

Vojtěch Hampl (B3)

Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Hlavním neduhem perorálně podávaných léčiv je jejich nízká biologické dostupnost, způsobená jejich nízkou rozpustností a permeabilitou. Ty jsou pro většinu nových léčiv velmi nízké, což má za následek komplikace s jejich vývojem a testováním, nebo jejich úplné zavrhnutí. Tento problém se často řeší na molekulární úrovni či zvýšením množství léčiva a excipientů. To vede ke zvýšení nákladů, nebo u konkrétních léčiv není tento postup možný. Možným řešením, kterým se ve své práci zabývám, je příprava účinných farmaceutických látek za pomoci koloidně stabilní nanosuspenze pomocí mokrého mletí jako meziproduktu, což způsobuje urychlení rozpouštění, a tím teoreticky i biologickou dostupnost. Samotná nanosuspenze při standardním disolučním testu uvolňuje veškerou účinnou látku řádově rychleji než prášková forma. Pro lepší manipulaci a dávkování suspenzi dále zpracovávám pomocí lyofilizace, granulace či sprejového sušení až do finální lékové formy, tablety. Budoucím cílem projektu je zlepšení biologické dostupnosti a modulovatelnost křivky uvolnění, tudíž využití nanosuspenzí pro dosažení vyšší hladiny léčiva v krvi či pro pozvolnější uvolňování.

Predikce povrchového napětí s využitím rozšířené van der Waalsovy stavové rovnice

Bc. Anna Šmídová (M1)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

V naší práci se zabýváme predikcí povrchového (mezifázového) napětí pro systém kapalina-pára. Tato veličina se využívá při popisu jevů probíhajících na fázovém rozhraní a je využívána při modelování morfogeneze materiálů, například polymerních membrán. Jedná se ale o obtížně měřitelný parametr, a proto se snažíme o jeho predikci skrze termodynamicky konzistentní výpočty – bez nutnosti odhadování parametrů z experimentálních dat. Využíváme teorie gradientu hustoty, díky níž můžeme použít stavové rovnice k popisu fázového rozhraní. Aplikovali jsme proto stavovou rovnici van der Waals-711 - modifikaci van der Waalsovy rovnice, známé jako první stavová rovnice reálného plynu, jejíž prediktivní síla je ale limitovaná. Verze vdW-711 přináší do rovnice nový parametr, přinášející vliv acentrického faktoru, dnes zahrnutého ve většině běžných stavových rovnic. Pro zajištění numerické stability výpočtu se využívá Cahnova-Hilliardova modelu, používaného běžně při popisu dynamiky spinodální dekompozice u systémů procházející fázovou separací. Výsledkem je ustálený rovnovážný profil hustoty, z nějž se získá hodnota povrchového (mezifázového) napětí. V současnosti rozšiřujeme výpočty pro nepolární alkany a cykloalkany a pracujeme s vybranými prvky a anorganickými sloučeninami.

Depotní formulace pro lokální řízené vylučování antibiotik pomocí magnetického pole

Bc. Karolína Slonková (M1)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Z depotních formulací pro lokální vylučování léčiv (gelů, pásek, vláken) jsou léčiva zpravidla vylučována nekontrolovaně, což vede k nestálé koncentraci antibiotika v místě aplikace a může zapříčinit vznik bakteriální rezistence. Formulací, která by mohla tento problém řešit, jsou kompozitní částice, které díky své struktuře umožňují kombinaci několika složek a vhodné zapouzdření léčivé látky. Kompozitní mikročástice, které jsou předmětem této práce, byly připraveny metodou enkapsulace tak, aby byly schopné řízeného dávkování antibiotika na vnější podnět. Mikročástice byly vytvořeny z jádra obsahujícího vosk (Tt = 42 °C) s mikrokrystalickým antibiotikem norfloxacin a kovalentně síťovatelné hydrogelové slupky z methakrylovaného alginátu vápenatého, ve které byly umístěny magnetické nanočástice oxidu železa. Při vystavení vnějšímu střídavému poli jsou nanočástice oxidu železa schopny indukčního ohřevu, což vede k roztavení vosku a umožní vyloučení norfloxacinu. S ohledem na schopnost indukčního ohřevu nanočástic je možné vylučovat antibiotikum pouze v žádoucích případech a zabránit tak jeho samovolnému unikání do okolí. Byla zkoumána kapacita jedné částice, možnost indukčního ohřevu v definované vzdálenosti od cívky a odolnost mikročástic proti podmínkám fyziologického prostředí.

Model pasivního míchání mikrofluidického systému kontinuální antisolventní precipitace

Bc. Rostislav Huňa (M1)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Uvádí se, že přibližně 40 % průmyslově vyráběných léčiv je špatně rozpustných, což významně snižuje jejich biologickou dostupnost. Jednou z nejnovějších formulačních strategií je příprava nanočástic těchto léků, tzv. nanokrystalů. Pokles velikosti částic zvyšuje poměr plochy povrchu k objemu, což zvyšuje rychlost rozpouštění molekul špatně rozpustných ve vodě a tím i jejich biologickou dostupnost. Jako jedna z možností přípravy nanočástic se nabízí antisolventní precipitace, metoda, při níž je roztok léčiva vpraven do antisolventního činidla, které zajišťuje výrazné lokální přesycení roztoku a vznik velkého množství nukleí. Nicméně, oproti běžně používanému vsádkovému uspořádání procesu, v průtočného uspořádání je třeba brát v úvahu hydrodynamické podmínky, které silně ovlivňují vlastnosti výsledných nanokrystalů. Pro porozumění tomuto jevu a optimalizaci procesu je tedy nutné studovat charakter a kinetiku míchání v našem zařízení. Tato práce se proto zabývá studiem vlivu objemového průtoku a geometrie systému na průběh a dobu homogenizace v průtočném krystalizéru pomocí CFD simulací v ustáleném stavu. Výsledky této práce budou přímo uplatněny pro popis průběhu celého procesu pomocí již existujícího matematického modelu kontinuální krystalizace s neideálním mícháním.

Změny v klíčových vlastnostech katalytického filtru v závislosti na množství zachycených sazí

Zuzana Coufalová (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Automobily se spalovacími motory produkují škodlivé plynné i pevné emise, které mají negativní vliv na životní prostředí a lidské zdraví. Pro jejich odstraňování jsou často používány katalytické filtry pevných částic, které fungují jako katalytický konvertor i filtr pevných částic. Jsou tvořeny porézním nosičem s tenkou katalytickou vrstvou, která může být nanesena na stěně nebo ve stěně filtru. Filtr zachytává pevné částice a katalytická vrstva umožňuje oxidačně-redukční reakce zajišťující odstranění plynných škodlivin. Během provozu je filtr zanášen sazemi, jež mohou vytvářet transportní omezení pro kontakt plynu s katalytickou vrstvou, a zhoršit tak katalytickou aktivitu filtru. V této práci byl zkoumán vliv množství zachycených sazí na katalytickou konverzi při oxidaci CO. Nejprve byly vzorky zanášeny postupně v pěti fázích, po každém filtračním experimentu byla měřena katalytická aktivita filtru pro dvě prostorové rychlosti. Následně byl vzorek zregenerován a opět zanášen, tentokrát vkuse, poté byla znovu změřena jeho katalytická aktivita. Výsledky ukazují minimální vliv sazí na rozběhnutí katalytických reakcí a dosahovanou konverzi při nízkých průtocích plynu, ale rostoucí vliv při vyšších průtocích, což potvrzuje hypotézu o transportním omezení.

Modelovanie korózie v technologickom okruhu s kvapalnou zliatinou PbLi

Bc. Adriana Augustínová (M1)

Školitel: Ing. Mária Zedníková, Ph.D.

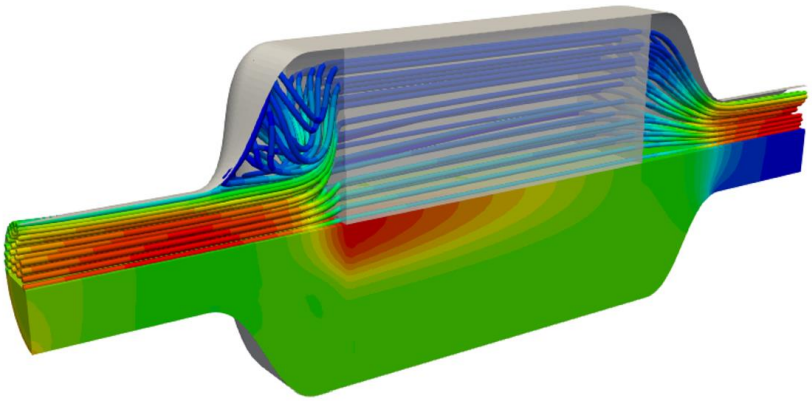
Korózia je závažným problémom v mnohých priemyselných a experimentálnych systémoch, pričom podstatná časť prevádzkových nákladov je smerovaná k predchádzaniu jej vzniku. V koncepte fúznych elektrární sa uvažuje o prevádzke so zliatinou olovo-lítium, ktoré slúži pre produkciu trítia a tienenie. Korózia spôsobená touto zliatinou spočíva predovšetkým v rozpúšťaní materiálu potrubia. Mnohé materiály (napr. bežné nerezové ocele, alebo vysokoteplotné zliatiny rady INCONEL) sú vylúčené z dôvodu vysokej rozpustnosti svojich zložiek v prúdiacej tekutine. Pri poklese teploty v časti okruhu hrozí kryštalizácia rozpustených ,,koróznych produktov“ a postupné upchávanie potrubia. Predošlé experimenty ukazujú, že úbytok materiálu zo stien potrubia sa pohybuje okolo 100 – 200 µm ročne. V izotermickom systéme, akým je plánovaný okruh, by sa rýchlosť korózie mala postupne znižovať, keď sa koncentrácia koróznych produktov približuje k nasýteniu a s ňou klesá aj rýchlosť rozpúšťania. Cieľom tejto práce je kvantifikovať rýchlosť korózie v zariadení prostredníctvom matematického modelu obehového okruhu na základe znalostí rovnovážnych koncentrácií a rýchlosti prestupu hmoty pri prúdení v trubke.

Simulace záchytu částic v automobilovém filtru pomocí modelu kolektorů

Šimon Hudínek (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Při spalovacích procesech dochází k tvorbě nanočástic sazí, které jsou pro naše zdraví škodlivé. Abychom tyto částice odstranili a zároveň neblokovali odvod zplodin, nachází se ve výfukovém systému filtr pevných částic. Ten může být také doplněn o katalyzátor, který zajišťuje konverzi plynů. Návrh takového zařízení je složitý problém, jehož cílem je vysoká konverze a filtrační účinnost při udržení minimální tlakové ztráty a ceny. Ke studiu této problematiky se používají matematické modely předpovídající účinnost zařízení v závislosti na jeho konfiguraci a provozních podmínkách. Efektivní výpočty umožňuje 1D+1D model, který předpokládá 1D tok kanálkem a na něj kolmý 1D transport přes stěnu filtru. Mimo bilance hmotnosti, entalpie a hybnosti plynu je také třeba počítat filtrační účinnost pro pevné částice. Tato práce se věnuje implementaci modelu jednotkových kolektorů, který zjednodušeně popisuje porézní strukturu filtru. Na základě porovnání výsledků modelu s experimentálními daty jsou vybrány vhodné korelace a hodnoty modelových parametrů, které umožňují výpočet filtrační účinnosti v závislosti na porozitě filtru, průtoku a velikosti částic.



Příprava kompozitních struktur s teplotně-řízeným vylučováním aktivní látky

Bc. Kryštof Dorňák (M1)

Školitel: Ing. Lucie Mašková

V průběhu historie bylo lidstvo vystaveno mnoha těžkým zkouškám a mezi ty nejnáročnější se bezesporu řadí závažné choroby. Velká část z nich je způsobována bakteriemi, se kterými jsme se po objevu penicilinu, a tedy konceptu antibiotik, naučili bojovat. Ani mor či tuberkulóza již dnes při včasné léčbě obvykle nejsou životu nebezpečné, nebo snad ano? Běžná antibiotika se bohužel pro svou chemickou stálost akumulují v životním prostředí, a bakterie jsou tak schopny tvořit si vůči nim rezistenci. To je jedním z nejurgentnějších problémů moderní medicíny. Řešení lze hledat v rychle se rozvíjející oblasti proléčiv, což jsou farmaceuticky neaktivní prekurzory léčiv, k jejichž aktivaci dochází až působením příslušného enzymu v místě určení. Tím je umožněna léčba využívající látky, které pro jejich nestálost není možné formulovat do tablet či kapslí. Takovou látkou je například allicin, který svým silným baktericidním účinkem umožňuje česnekovým buňkám čelit bakteriálnímu napadení. Cílem tohoto projektu je proto s využitím 3D biotisku připravit strukturované filmy obsahující prekurzor allicinu – allin a enzym allinázu, ve kterých vnějším podnětem (vlhkost, teplota) dojde ke spuštění enzymatické reakce, a tedy řízenému uvolnění účinné látky na místě určení.

Metoda přípravy systémů pro výrobu gelových částic pomocí stop flow litografie

Bc. Jiří Huml (M1)

Školitel: doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Hydrogelové částice vystavené fokusovaným paprskům světla umožňují vlivem mikroskopického smršťování gelu pohyb částice v prostoru. Slibné využití hydrogelových částic lze hledat v biomedicinských aplikacích, při transportu buněk, nebo léčiv do cílových míst.Výroba částic probíhá pomocí stop-flow litografie v mikrofluidních systémech, ve kterých se vytváří dvoufázový tok fotocitlivého roztoku gelu, kde jedna z fází je obohacena o zlaté nanočástice. Rozhraní mezi fázemi je po zastavení toku ozářeno krátkým pulzem UV záření skrze fotomasku, nesoucí tvar částic, čímž se gel vytvrdí. Tok roztoku se následně opět spustí, aby vzniklou částici odplavil z fokusovaného místa tak, aby se proces mohl opakovat. Tato práce je zaměřena na návrh a výrobu mikrofluidního čipu, na kterém bude možné ověřit chování gelových částic při změně vnějšího prostředí. Výrobním postupem je návrh fotomasky, opatřenou patřičným schématem, skrze kterou pomocí fotolitografie bude geometrie přenesena do razidla za použití negativního fotorezistu SU8. Výsledný mikrofluidní čip je pak vyhotoven pomocí měkké litografie z tohoto razidla za použití elastomeru PDMS.

Chemické inženýrství V

MÍSTO: B028

KOMISE

doc. Ing. František Rejl, Ph.D. (předseda)

Ing. Vladislav Nevoral, Ph.D.

Ing. Dan Trunov

Ing. Jan Tomek (Mega a.s.)

Ing. Vlastimil Bříza (Spolchemie)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 Bc. Michal Neuwirth (M1, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

Modelování šíření požáru v pevných látkách

08:50 Bc. Karolína Amblerová (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Příprava a studium lipidických formulací vitaminu D na bázi "oil marbles"

09:10 Matyáš Khýr (B3, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

Vývoj modelu umělé inteligence pro odhad filtrace výfukových plynů

09:30 Bc. Stanislav Kočí (M1, doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.)

Příprava a charakterizace membrán s funkcionalizovanými nanočásticemi pro pervaporaci izomerů xylenu

09:50 Bc. Karin Lovrantová (M1, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Charakterizace iontově výměnných pryskyřic

10:30 Bc. Marek Martinian Kolátor (M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Vícekrokové nanášení katalyzátoru do voštinového filtru

10:50 Bc. Hanna Sytsko (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Studium vlivu koncentrace na permeaci směsí léčiv skrz liposomální membrány

11:10 Matěj Honzík (B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Návrh a sestavení aparatury pro testování elekrochemických palivových článků typu SOFC

11:30 Bc. Lukáš Killar (M1, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

Stanovení rychlostních profilů ve zkušební požární místnosti

vyhlášení výsledků

Modelování šíření požáru v pevných látkách

Bc. Michal Neuwirth (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Modelování šíření požáru v pevných látkách je fascinujícím, avšak komplexním procesem, který zahrnuje popis nemalého množství fyzikálních a chemických jevů podílejících se na požáru (transport hmoty a tepla, proudění, tepelný rozklad, chemická reakce – spalování). Samotný popis tepelného rozkladu vztahujícího se ke konkrétnímu materiálu vyžaduje zadání značného počtu materiálových, tepelných a kinetických parametrů, které často nejsou dostupné. Specializované matematické modely zahrnující popis všech uváděných jevů jsou proto v praxi často zjednodušovány tím, že se složitý proces tepelného rozkladu pevného materiálu nahradí experimentálně naměřenými hodnotami uvolněného tepla v průběhu času. Avšak to přináší nové výzvy, protože naměřená data se mohou výrazně lišit při opakovaném provádění experimentu a jsou silně závislá na zvolených experimentálních podmínkách.Předložená práce se zabývá modelováním průběhu hoření běžné kancelářské soustavy (stůl a skříňka) s využitím známých hodnot uvolněného tepla. Výsledky jsou porovnány s experimentálními hodnotami z požární zkoušky. Do budoucna se plánuje vypracovat složitější model využívající popis tepelného rozkladu na základě materiálových parametrů a porovnat výsledky z obou modelových přístupů.

Příprava a studium lipidických formulací vitaminu D na bázi "oil marbles"

Bc. Karolína Amblerová (M1)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

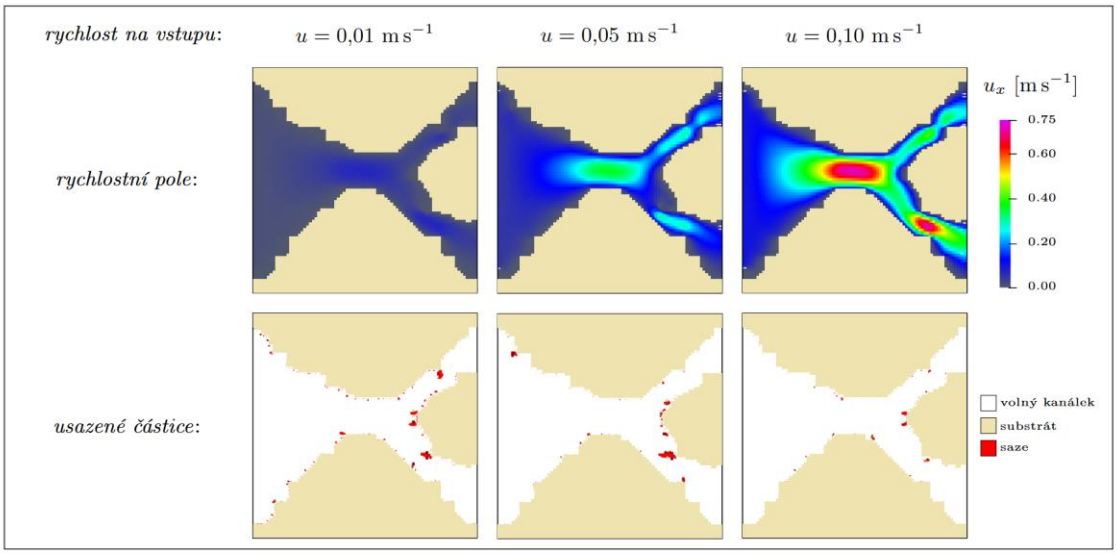
Vitamín D_3 ze skupiny lipofilních vitamínů je charakteristický tím, že si ho lidský organismus umí jako jediný vitamín sám syntetizovat. Vznik vitamínu D_3 v organismu je podmíněn přítomností dostatečně silného slunečního záření, resp. UVB záření. UVB záření o požadované intenzitě je však dostupné pouze v letních měsících. Během zbytku roku trpí mnoho lidí jeho nedostatkem. Řešením může být pravidelná konzumace potravinových doplňků, které mají pro vitamín D_3 nejčastější formu želatinových kapslí plněných olejem s rozpuštěným vitamínem. Nová vyvíjející se forma potravinových doplňků jsou tzv. „oil marbles“ (olejové kuličky). Jedná se o lipofilní nosiče, ve kterých je rozpuštěna aktivní látka lipofilního charakteru. Největšími přednostmi olejových kuliček je zejména schopnost zvýšit rozpustnost a biodostupnost aktivní látky, operativní dávkování a relativně levná a snadná příprava. Tato práce se zabývá přípravou olejových kuliček obsahující vitamín D_3 jako aktivní látku a kontrolou obsahu vitamínu D_3 v jednotlivých kuličkách pomocí vysokoúčinné kapalinové chromatografie (HPLC). Dále jsou studovány parametry ovlivňující množství uvolněného vitamínu D_3 z olejových kuliček pomocí disolučních testů.

Vývoj modelu umělé inteligence pro odhad filtrace výfukových plynů

Matyáš Khýr (B3)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Pro vývoj katalytických filtrů, které umožňují efektivní zpracování výfukových plynů v automobilovém průmyslu, je klíčové dokázat modelovat vliv zanášení filtru sazemi na jeho makroskopické parametry, jako jsou tlaková ztráta, filtrační účinnost a konverze škodlivých plynů. Existující numerický model pro depozici částic sazí v porézních stěnách katalytického filtru je velmi výpočetně náročný a je proto žádoucí vyvinout alternativní přístup, který by umožnil výpočetně levnou predikci distribuce sazí na základě geometrie mikrostruktury a rychlostního pole proudícího plynu. Jako jeden z možných přístupů se jeví použití metod hlubokého učení: Cílem této práce je navrhnout vhodnou architekturu umělé neuronové sítě včetně zpracování a reprezentace vstupních dat a dále s pomocí existujícího výpočetního modelu připravit modelový dataset k jejímu učení.



Usazování částic v modelové geometrii

Příprava a charakterizace membrán s funkcionalizovanými nanočásticemi pro pervaporaci izomerů xylenu

Bc. Stanislav Kočí (M1)

Školitel: doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

Předmětem práce je příprava a charakterizace tenkých filmů (separačních membrán) z polymerních sítí připravených fotoiniciovanou radikálovou polymerací oligomeru polyethylenglykol diakrylátu (PEGDA) s proměnným množstvím funkcializovaných nanočástic, konkrétně polyhedrálního oligomerního silsesquioxanu s akrylátovými funkcemi (Acrylo POSS®). Přídavek Acrylo POSS® způsobuje změnu mechanických vlastností separačních membrán, je také očekáván vliv na pervaporační charakteristiky. Relevantní charakterizaci připravených membrán poskytuje zejména infračervená spektroskopie (FTIR), dynamická mechanická analýza (DMA), a měření pervaporačních charakteristik. Cílem je optimalizace stability membrán a jejich použití pro membránové separace průmyslově relevantních směsí konstitučních izomerů xylenu.

Charakterizace iontově výměnných pryskyřic

Bc. Karin Lovrantová (M1)

Školitel: doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

S narastajúcim dôrazom na udržateľnosť sa zvyšuje dopyt po inovatívnych a efektívnych technológiách v oblasti eliminácie stopových množstiev ťažkých kovov vo vodných zdrojoch. V tomto kontexte predstavuje elektrodeionizácia (EDI) perspektívny nástroj využívajúci na realizáciu iónovýmenné živice, ktoré selektívne absorbujú a vymieňajú špecifické ióny v rámci vodného roztoku. Náš výskum sa práve preto zaoberá základnou charakterizáciou týchto častíc ako aj ich štúdiom v elektrickom poli, kde dochádza k javu známemu ako koncentračná polarizácia. Na základe série experimentov sme neskôr schopní určiť transportné čísla v časticiach, ktoré nám priamo poskytujú informácie o ich schopnosti selektívne viazať a izolovať cieľové ióny. Tento výskum má potenciál ponúknuť podrobnejšie pochopenie selektívnych mechanizmov, ktoré bezprostredne ovplyvňujú zdokonalenie súčasných a novovznikajúcich technológií EDI.

Vícekrokové nanášení katalyzátoru do voštinového filtru

Bc. Marek Martinian Kolátor (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Pro čištění výfukových plynů ze spalovacích procesů se dnes často využívají katalytické filtry pevných částic, které jsou kompaktní kombinací filtru a katalyzátoru. Katalytické filtry jsou vytvářeny nanášením mikročástic katalyzátoru v podobě vodné suspenze na porézní keramický filtr. U katalytických filtrů pevných částic je kritické najít rovnováhu mezi třemi parametry: nízkými tlakovými ztrátami, vysokou filtrační účinností a vysokou katalytickou konverzí plynných škodlivin. Tyto charakteristiky jsou ovlivněny především vlastnostmi nanesené katalytické vrstvy. Nanesení katalyzátoru do souvislé vrstvy na vnějším povrchu stěny zvyšuje filtrační účinnost, ale i tlakovou ztrátu oproti filtru s katalyzátorem v tenké vrstvě uvnitř pórů stěny. Tato práce se věnuje kombinovanému, vícekrokovému nanášení katalyzátoru pro dosažení co nejlepších vlastností katalytických filtrů. Jsou nalezeny vhodné postupy a klíčové parametry vodné suspenze pro jednotlivé kroky nanášení. Struktury připravených vrstev jsou porovnány pomocí snímků z elektronového mikroskopu a je diskutován jejich potenciál pro praktický provoz.

Studium vlivu koncentrace na permeaci směsí léčiv skrz liposomální membrány

Bc. Hanna Sytsko (M1)

Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

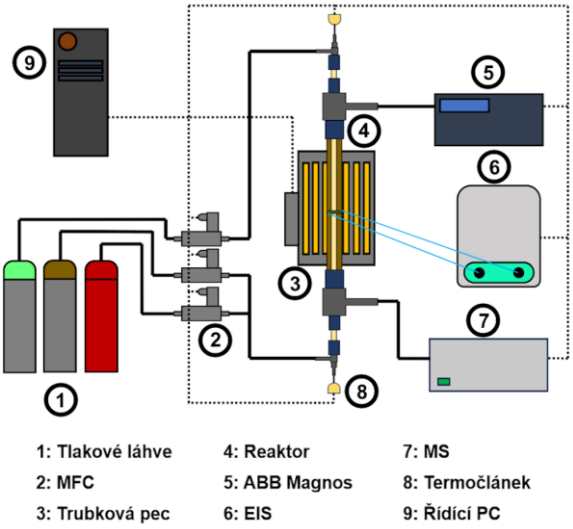
Při návrhu a vývoji léčiv je nezbytné vědět, jak léčiva působí na cílový orgán, a zjistit optimální dávkování. Jak zjistit lékařům nebo farmaceutickým firmám, jak rychle se léčiva uvolňují z kapsule nebo částice, a jak budou procházet do buněk? Cílem této práce je studium vlivu koncentrace léčiv na rychlost permeace skrz liposomální membránu. Permeabilita je jedním z klíčových parametrů léčiv, která ovlivňuje jejich vstřebávání i následnou distribuci v organismu. Léčiva musí být schopna překonat bariéry v gastrointestinálním traktu (stěny žaludku a střev) a následně dosáhnout cílových míst v buňkách. Nízká permeabilita léčiva omezuje jeho absorpci, a tím i účinnost celého léčivého přípravku. V této práci byly použity liposomy jako experimentální model biologických bariér. Do liposomů byly uzavřeny binární nebo ternární kombinace léčiv a fluorescenčních barviv. Z experimentálních dat byly určeny permeabilitní koeficienty, popisující rychlost průchodu sledovaných molekul membránou, a distribuční koeficienty, popisující rozdělovací rovnováhu lipidy – vodný roztok. Metoda poskytuje kvantitativní data o vlivu koncentrace jedné látky na permeaci jiné látky skrz liposomální membránu.

Návrh a sestavení aparatury pro testování elekrochemických palivových článků typu SOFC

Matěj Honzík (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V současnosti je kladen důraz na využívání obnovitelných zdrojů. Jednou z nevýhod tohoto způsobu získávání elektrické energie jsou sezónní nebo krátkodobé přebytky či nedostatky. K vyrovnání nestabilit je možné využívat zařízení pro krátkodobou kompenzaci, např. přečerpávací elektrárny nebo baterie. Jako vhodný způsob dlouhodobého uchování se ukazuje převedení přebytků elektřiny na chemický zdroj energie, např. H_2 nebo NH_3, které jsou stabilní a mohou být snadno skladovány a transportovány. Palivové články s elektrolytem z pevných oxidů (SOFC) jsou díky pracovní teplotě do 700 °C využitelné jako efektivní konvertory chemické energie uložené ve formě H_2 a NH_3 zpět na energii elektrickou. Článek sestává z porézní anody Ni-$Sm_{0,2}Ce_{0,8}O_2$ a porézní katody $La_{0,6}Sr_{0,4}Co_{0,2}Fe_{0,8}O_3$, mezi nimiž je neporézní membrána $Sm_{0,2}Ce_{0,8}O_2$ sloužící jako elektrolyt, který umožňuje transport kyslíkových iontů O^-. Tato práce se věnuje návrhu a sestavení nové aparatury pro testování SOFC. Ta zahrnuje reaktor z keramických trubek, ve kterém je umístěn palivový článek o průměru 1 cm, přívody paliva (H_2 nebo NH_3) k anodě a vzduchu ke katodě, regulátory hmotnostního průtoku (MFC), elektrochemický impedanční spektrometr (EIS) a analyzátory složení výstupních plynů (Magnos a hmotnostní spektrometr – MS).



Stanovení rychlostních profilů ve zkušební požární místnosti

Bc. Lukáš Killar (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Základem poznání o vlastnostech materiálů jsou experimenty. Mezi ně patří i požární zkoušky, při kterých se zkoumají vlastnosti materiálů spojené s požáry, například teplota vzplanutí, rychlost uvolňování tepla či rychlost šíření ohně. Požární zkoušky jsou výrazně ovlivněny prouděním plynů, kvůli přístupu kyslíku nutného k hoření a odvodu spalin. Proto má smysl rozlišovat zkoušky ve venkovních či vnitřních prostorech. Jedním z prostorů, kde se zkoušky provádějí je zkušební požární místnost na Univerzitním centru energeticky efektivních budov ČVUT (UCEEB). Požární zkoušky je třeba provádět při normou specifikovaných podmínkách, aby nedocházelo k odchylkám a tím k ohrožení lidí, či přístrojů využívaných k měření. Při zkouškách prováděných ve zkušební požární místnosti na UCEEB bylo vypozorováno, že se proud plynů stáčí nežádoucím způsobem a mohl by ovlivňovat průběh zkoušek, či zapříčinit poškození přístrojů při hoření. Cílem mé práce je experimentálně naměřit rychlost proudění plynů v místnosti a blízkém okolí a pomocí CFD řešičů FDS a Ansys Fluent vytvořit rychlostní profily ve zkušební požární místnosti a ověřit nežádoucí vliv proudění plynů. Dále jsou řešeny možnosti úprav geometrie místnosti směřující k redukci nežádoucího charakteru proudění.

Chemické inženýrství VI

MÍSTO: B139

KOMISE

prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D. (předseda)

Ing. Lukáš Valenz

Ing. Jakub Klimošek

Ing. Vít Zvoníček, Ph.D. (Zentiva, k.s.)

Ing. Zdeněk Mühlhauser (Orlen Unipetrol)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 Bc. Albert Behner (M2, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Experimentální data pro studii koloidní stability polymerních částic

08:50 Bc. Samuel Uhliarik (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Optimalizácia výrobného procesu minitabliet s vysokým obsahom účinnej látky

09:10 Bc. Martin Škuta (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Kombinatorický vývoj pevnej lipidickej liekovej formy CBD

09:30 Bc. Martin Spurný (M2, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Kapacitný booster pre redoxné prietokové batérie

09:50 Bc. Adam Kostovčik (M1, doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová)

Vplyv povrchovo aktívnych látok na vlastnosti bublín v aerovanej kolóne

10:30 Bc. Oliver Moravec (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Mikročásticové systémy citlivé na ultrazvuk a rázvou vlnu

10:50 Bc. Kateřina Slaninová (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Design průtočného modelu pro studium a porovnání interakcí nanočástic s nádorovými a imunitními buňkami

11:10 Bc. Alina Mamedova (M1, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Nanotopografické povrchy připravené plazmovým leptáním

11:30 Bc. Mária Prachárová (M1, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Vplyv viskozity na zádrž plynu v miešaných nádobách

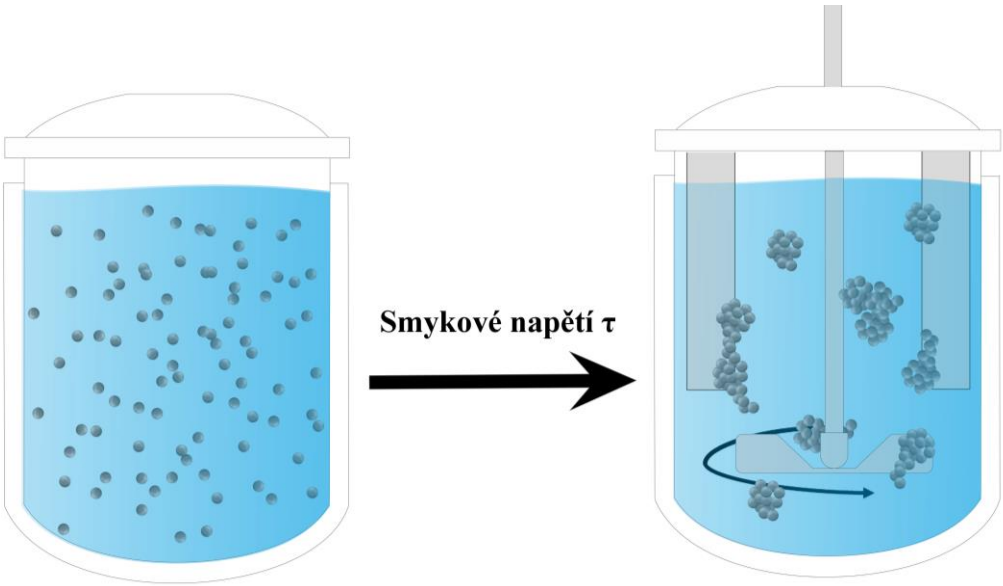
vyhlášení výsledků

Experimentální data pro studii koloidní stability polymerních částic

Bc. Albert Behner (M2)

Školitel: prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

Polymerní koloidy jsou komplexní materiály s potenciálně velmi širokým spektrem aplikací, ať už se jedná o výrobu polymerů, nátěrů, kosmetiky či medicínské využití. V současnosti se produkuje více jak 20 milionů tun ročně těchto materiálů. Tyto systémy převážně vznikají emulzní polymerizací, kde výsledkem je dispergovaná pevná fáze polymeru ve fázi kapalné. Vlastnosti latexu závisí na složení polymeru, velikosti částic, Debyeově délce a také povrchové charakterizaci částic. Cílem této studie je pokus o vyvinutí metody pro experimentální charakterizaci takovýchto systému z hlediska koloidní stability. K destabilizaci koloidu může dojít několika vlivy: zvýšení koncentrace, přítomnost elektrolytu, teplota nebo mechanické namáhání. Pokud je polymerní koloid vystaven dostatečnému smykovému napětí, dochází k aglomeraci částic končící přechodem celého systému v gel. To může být v některých případech přímo žádoucí (výroba polymerů), na druhou stranu je důležité tento proces kontrolovat a kvantifikovat. V této práci byl polymerní latex zkoumán pomocí reometru, kde byl měřen právě vliv smykového napětí na koloidní stabilitu. Zpracování experimentálních dat dává kvalitativní pohled na fyzikální mechanismus procesu, který lze následně aplikovat v počítačových simulacích a CFD modelování.



Optimalizácia výrobného procesu minitabliet s vysokým obsahom účinnej látky

Bc. Samuel Uhliarik (M1)

Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Ročne tvoria úmrtia na kardiovaskulárne choroby až 32 % z celkovej mortality. Toto percento by však mohlo byť nižšie, keby boli pacienti včas diagnostikovaní a správne liečení. Pri úspešnej liečbe kardiovaskulárnych chorôb je už dnes bežnou praxou ordinovať pacientom kombinovanú liečbu pomocou 2-4 účinných látok. Pri použití viacerých účinných látok v drvivej väčšine prípadov dochádza aj k zvýšeniu množstva tabliet, ktoré pacient musí denne požiť, čo zvyšuje riziko vynechania dávky a tak k zníženiu liečivého účinku. Pomocou formulácie viac-jednotkového liekového systému na báze minitabliet sme schopný toto množstvo liekových foriem zredukovať na 1 želatínovú kapsličku veľkosti 0, do ktorej sme naviac schopný vložiť presný obsah účinnej látky na mieru pacienta. V tejto práci boli 2 účinné látky (API) používané v kombinovanej terapii formulované do minitabliet, pričom pre obe API bol použitý rovnaký postup prípravy s cieľom optimalizovať a generalizovať tento postup pre výrobu vo farmaceutickom priemysle.

Kombinatorický vývoj pevnej lipidickej liekovej formy CBD

Bc. Martin Škuta (M1)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

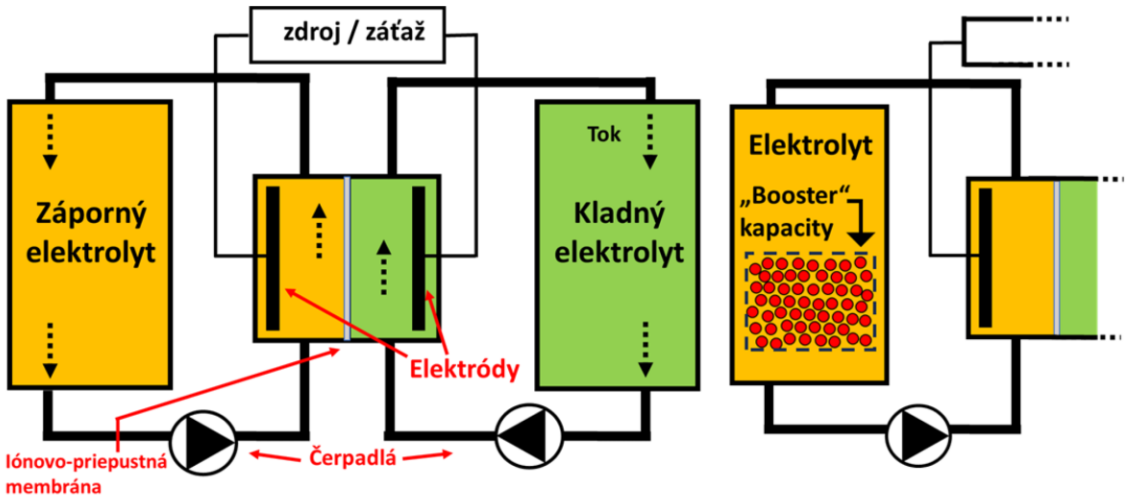
Nízka rozpustnosť CBD vo vode predstavuje významnú prekážku v jeho vstrebávaniu v živom organizme. Jedným z možných riešení súčasných produktov je rozpustenie CBD v oleji a následnom orálnom podávaní. Pre zabezpečenie lepšieho transportu skrz sliznicu tenkého čreva a zvýšenie biodostupnosti CBD je možné využiť metódu *self-microemulsifying drug delivery system* (SMEDDS). Typicky sa jedná o liečivá v tekutej forme, avšak my sa zameriame na tuhú formu. Pre vytvorenie samomikroemulgujúceho systému stačí k lipofilnej látke pridať olej a vhodný surfaktant.Pre výber vhodných látok budeme postupovať kombinatorickým vývojom, teda vytváraním veľkého počtu zmesí rôznych látok o rôznom zastúpení. Následným porovnaním vlastností vyberieme najlepších kandidátov pre ďalšie skúmanie. Túto repetitívnu prácu si uľahčíme použitím robotického pipetoru upravenom pre pipetovanie tavenín. Prístroj dokáže v krátkom čase a s vysokou presnosťou vytvoriť zmesi o nami zvolenom zložení. Pre lepšiu manipuláciu produktu je možné obaliť túto lipidickú zmes liečiva do prášku, ktorý zamedzí zlepeniu jednotlivých kusov liekovej formy a taktiež môže výrazne ovplyvniť uvoľňovanie liečiva. V tejto práci sa venujeme vytvoreniu pevnej liekovej formy, pozostávajúcej z CBD, lipidu, surfaktantu a iných pomocných látok.

Kapacitný booster pre redoxné prietokové batérie

Bc. Martin Spurný (M2)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Využitie obnoviteľných zdrojov v energetike predstavuje výzvu v podobe nekonštantnej produkcie elektrickej energie. Jedným z potenciálnych riešení je akumulácia energie do redoxných prietokových batérii (RFB- redox flow battery), ktoré by uchovávali energiu a zabezpečovali jej nepretržitú dostupnosť v rozvodnej sieti. Kapacita RFB je daná množstvom aktívnych látok v kladnom a zápornom elektrolyte a je teda limitovaná ich rozpustnosťou a objemom elektrolytu. Perspektívnym spôsobom, ako obísť koncentračný limit, je použitie tzv. kapacitného boostru, tj. redoxnej aktívnej látky imobilizovanej v pevnej fáze, ktorá je v kontakte s elektrolytom. Elektrolyt tak plní funkciu redoxného mediátora medzi imobilizovanou látkou a elektródou a zároveň sám uchováva kapacitu. Cieľom tejto práce bolo skúmať možnosti imobilizácie aktívnej látky (antrachinónová disulfónovaná soľ so sodným protiiónom) do podoby mechanicky stabilných granúl. Bol skúmaný vplyv hmotnostného podielu spojiva a pomocných činidiel na využitie aktívnej látky v granulách. Experimentálnou platformou bol laboratórny prietokový článok s vodnými elektrolytmi, pričom merania pozostávali z cyklického nabíjania a vybíjania, kedy bola porovnávaná kapacita článku s pridaným boostrom oproti kapacite článku bez pridaného boostru.



Vplyv povrchovo aktívnych látok na vlastnosti bublín v aerovanej kolóne

Bc. Adam Kostovčik (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

V aerovaných zariadeniach je zádrž plynu výrazne ovplyvňovaná parametrami bublín, ako sú ich veľkosť a rýchlosť. Pridaním povrchovo aktívnych látok je možné upravovať tieto parametre, rovnako ako koalescenciu či rozpad bublín. Táto práca je zameraná na stanovenie vplyvu neionického surfaktantu na vlastnosti zhluku bublín v aerovanej kolóne. Použitým surfaktantom bol terpineol, široko používaný v kozmetickom a farmaceutickom priemysle, či ako flotačné činidlo. Vlastnosti bublín boli sledované na laboratórnej kolóne a snímané vysokorýchlostnou kamerou. Vyhodnotené vlastnosti boli porovnané s teoretickými vzťahmi a taktiež roztokmi glycerolu. Z výsledkov je vidieť výrazne odlišné vlastnosti bublín už pri nízkych koncentráciách terpineolu.

Mikročásticové systémy citlivé na ultrazvuk a rázvou vlnu

Bc. Oliver Moravec (M1)

Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Cílené podávání léčiv do specifických tkání je kriticky důležité pro snížení systémové toxicity a optimalizaci terapeutické účinnosti, zejména v případě cytotoxických léčiv. V současné době existuje mnoho metod pro cílení systémově podávaných léčiv a ultrazvukem řízené cílení je rychle se rozvíjející strategií pro externě stimulované podávání léčiv. Tato práce se zabývá studiem úniku obsahu mikročástice po vystavení ultrazvuku, či rázovým vlnám. Cílem je stanovit citlivost rozpadu částic v závislosti na velikosti částice, polymeru částice (PLA, PCL, PLGA) a podílu lipidu v hybridních mikročásticích. Částice byly naplněny lipofilním barvivem Nile red. Únik barviva z částice byl detekován časově rozlišeným měřením fluorescence. Pomocí časově rozlišeného měření fluorescence na rozdíl od tradičního testování intenzity fluorescence dokážeme nejen detekovat uvolnění barviva z mikročástice, ale dokážeme i kvantifikovat množství uvolněné barvy a určit způsob uvolňování obsahu částic. Tyto poznatky by bylo možné využít v klinické praxi například při léčbě tuberkulózy, či radioembolizaci.

Design průtočného modelu pro studium a porovnání interakcí nanočástic s nádorovými a imunitními buňkami

Bc. Kateřina Slaninová (M2)

Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Nanočástice lze použít jako nosiče pro léčiva, u nichž je nutno snížit vedlejší účinky – např. pro cytostatika. Po podání jsou však nanočástice z organismu vychytávány imunitním systémem – makrofágy – procesem zvaným fagocytóza a dále se nanočástice ukládají v organismu i mimo cílovou tkáň. To vše vede ke snížení účinnosti léčiva a potřebě zvýšit dávku. V experimentech budou použity modifikované křemičité nanočástice se zvýšenou selektivitou pro navazování na hypoxické nádorové buňky – protilátkou IgG M75 – a se zvýšenou odolností proti vychytávání makrofágy – polymerem poly(N-hydroxypropyl methakrylamidem). Tyto modifikace ovlivňují farmakokinetiku nanočástic v organismu a tím ovlivňují velikost účinné dávky. Předmětem práce je vytvořit průtočný model, ve kterém bude možno sledovat interakci modifikovaných nanočástic s nádorovými buňkami a makrofágy. Z interakce nanočástic s buňkami bude možno zjistit kinetiku specifického navazování nanočástic na nádorové buňky a kinetiku fagocytózy. Ze zjištěné kinetiky bude poté možno lépe určovat velikosti dávek.

Nanotopografické povrchy připravené plazmovým leptáním

Bc. Alina Mamedova (M1)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Nanotopografické povrchy se běžně vyskytují v přírodě na tělech živočichů i rostlin a propůjčují jim nejrůznější vlastnosti, jako jsou antireflexní nebo samočistící efekty v závislosti na druhu nanostruktur. Tato práce je konkrétně inspirována hustě uspořádanými nanopilířky na povrchu křídel vážek, u kterých byly prokázány antibakteriální účinky. Mechanismus této antibakteriální aktivity je založen přednostně na geometrii a uspořádání struktur, nikoliv na jejich chemickém složení, a tudíž bakteriím neumožňuje vypěstování rezistence. Cílem této práce byla příprava podobných nanostruktur metodou plazmového leptání, jejich charakterizace pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM) a dalších analýz a následné testování s bakteriální suspenzí. K optimalizaci cílových nanostruktur byla využita parametrická studie a zobrazování pomocí skenovací elektronové mikroskopie (SEM). Bakteriální testy vybraných povrchů prokázaly deformaci buněk gram-negativní bakterie (*Escherichia coli)* i gram-pozitivní bakterie (*Staphylococcus epidermidis*), což svědčí o antibakteriální aktivitě, která bude dále zkoumána testy vitality buněk.

Vplyv viskozity na zádrž plynu v miešaných nádobách

Bc. Mária Prachárová (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

V mnohých chemických i biochemických procesoch sú mechanicky miešané nádoby často využívané k zdieľaniu hmoty. Ich návrh a optimalizácia sú založené na poznatkoch o transportných charakteristikách, ako je zádrž plynu, príkon miešadla a objemový koeficient prestupu hmoty. Tieto charakteristiky podliehajú rôznym systémovým podmienkam, ku ktorým patrí geometria nádoby či fyzikálne a chemické vlastnosti látky, ako je teplota, hustota alebo viskozita. Zádrž plynnej fázy, ktorá vyjadruje objemový zlomok plynu v nádobe, je dôležitá najmä pri procesoch vyžadujúcich styk plynnej a kvapalnej fázy. Táto vlastnosť významne ovplyvňuje transport hmoty v aerovanej miešanej nádobe a jej vyššia hodnota podporuje efektívnejší prenos hmoty z jednej fázy do druhej. Pretože v priemysle je pri mnohých procesoch často využívaná vsádzka, ktorá má viskozitu vyššiu ako voda, je skúmanie zádrže plynu na tomto parametri dôležité. Cieľom práce je zistiť vplyv závislosti zádrže plynu na viskozite vsádzky pri rôznych experimentálnych podmienkach; zmenou objemového prietoku plynu či rýchlosti otáčok miešadla. Tento trend je taktiež pozorovaný pomocou obrazovej analýzy správania sa bublín v miešanej nádobe.

Chemické inženýrství VII

MÍSTO: B008

KOMISE

prof. Dr. Ing. Juraj Kosek (předseda)

Ing. Martin Isoz, Ph.D.

M.Sc. Adam Tywoniak

Ing. Tomáš Kracík, Ph.D. (SPT)

Ing. Václav Babuka (Synthos)

Ing. David Gráf

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 Bc. Ján Synak (M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Vliv sazí na konverzi uhlovodíků a CO v katalytickém filtru

08:50 Bc. Adam Siuda (M2, Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.)

Kalibrace analyzátoru SO_2 a měření k_Ga na systému SO_2-NaOH

09:10 Bc. Kryštof Majer (M2, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

Simulace požáru automobilu v uzavřeném prostoru

09:30 Bc. Petr Šimek (M2, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Optimalizace Zn-I průtočné baterie

09:50 Bc. Michal Kolář (M1, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Studium elektrodialýzy v modelovém laboratorním zařízení

10:30 Bc. Peter Kavka (M2, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Porovnanie výmenných tokov kvapaliny pre rôzne geometrické konfigurácie miešadiel v prostredí fermentorov

10:50 Bc. Vojtěch Blahušek (M2, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Modelování růstu dendritů na povrchu elektrod

11:10 Bc. Samuel Kriška (M2, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Stabilizácia pevných foriem kanabinoidov za pomoci polymérov

11:30 Bc. Kateřina Neubergerová (M2, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Studium systému API–surfaktant pomocí molekulové dynamiky

11:50 Bc. Laura Bábanová (M2, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

Funkcionalizované polymérne membrány pre degradáciu pesticídov

vyhlášení výsledků

Vliv sazí na konverzi uhlovodíků a CO v katalytickém filtru

Bc. Ján Synak (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Emisie spôsobené nedokonalým spaľovaním paliva, akými sú oxid uhoľnatý (CO), nespálené uhľovodíky, oxidy dusíka (NO_x) a pevné častice, sú vypúšťané do atmosféry prostredníctvom výfukových systémov automobilov. Tieto splodiny majú významný vplyv na životné prostredie, pretože prispievajú k znečisteniu ovzdušia. Na zmiernenie vplyvu na životné prostredie sa používajú katalytické filtre pevných častíc. Tieto filtre plnia kľúčovú funkciu transformácie škodlivých emisií na netoxické látky – CO_2, H_2O a N_2. Zároveň slúžia na zachytávanie pevných častíc. Účinnosť týchto filtrov sa hodnotí na základe troch kľúčových parametrov: katalytickej aktivity, tlakovej straty a filtračnej účinnosti. Počas prevádzky sa filter pevných častíc zanáša sadzami, čo síce zvyšuje účinnosť filtrácie, ale negatívne vplýva na katalytickú aktivitu. Hromadenie sadzí blokuje aktívne centrá, čo bráni premene škodlivých emisií. Nájdenie rozumného optima medzi týmito parametrami, najmä v prípade zaneseného filtra, je kľúčové. Táto štúdia sa zameriava na porovnanie katalytickej aktivity oktánu a oxidu uhoľnatého pri rôznom stupni zanesenia filtra.

Kalibrace analyzátoru SO_2 a měření k_Ga na systému SO_2-NaOH

Bc. Adam Siuda (M2)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

První využití absorpčních kolon se datuje již na počátek 19. století, kdy byly kolony využívány k odstranění škodlivých plynů při těžbě uhlí. Dnes jsou patrové a výplňové kolony klíčovými komponenty také pro výrobu průmyslově důležitých kyselin, jako je například kyselina sírová a dusičná.Pro úspěšný návrh těchto zařízení pomocí Rate-based přístupu je nezbytné hluboce porozumět hydraulickým a transportním charakteristikám, včetně objemového koeficientu přestupu hmoty v plynné fázi, neboli k_Ga. Závislost k_Ga na difuzivitě byla formulována před desítkami let a je neustále základem mnoha vztahů dodnes používaných k jeho výpočtu. K vytvoření komplexnějšího pohledu na tuto závislost je nezbytné provádět měření k_Ga pomocí různých systémů.Cílem této práce byla kalibrace nového analyzátoru na SO_2 a následné ověření metodiky měření k_Ga na výplni Mellapak Plus 452.Y, která byla již v minulosti v laboratoři proměřena.Tato práce byla motivována potřebou doplnit databázi měření k_Ga na výplni Mellapak Plus 252.Y o systém oxid siřičitý/hydroxid sodný, což bude další krok. Následné porovnání s hodnotami získanými na této výplni pomocí systému čpavek/kyselina sírová poskytne hlubší vhled do závislosti k_Ga na difuzivitě a otevře nové perspektivy v oblasti přenosu transportních charakteristik.

Simulace požáru automobilu v uzavřeném prostoru

Bc. Kryštof Majer (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Pro prevenci vzniku požáru a správné nastavení protipožárních opatření je důležité umět dobře popsat různé scénáře možného šíření požáru, resp. vliv požáru na zasažený prostor. Za tímto účelem sestavujeme simulace využívající modely fyzikálních dějů jako je proudění, transport tepla a hmoty, a také chemických dějů, jako je hoření materiálů při požáru. Výsledkem těchto simulací může být podrobný profil teploty či spalin, ale také jiných veličin, ve zkoumaném prostoru. Tento přístup je mnohdy jedinou možností, jak získat potřebná data a podklady k efektivnímu použití prvků požární ochrany ve zkoumaném prostoru, neboť nahrazení modelu velkorozměrovou požární zkouškou není vždy proveditelné a velmi složitě opakovatelné.V rámci této práce byla vytvořena CFD simulace požáru osobního bateriového automobilu nacházejícího se ve vnitřních prostorech budovy. Takový požár je problematický zejména v případech, kdy není možné automobil snadno z vnitřních prostor odstranit, nebo uhasit jako je tomu v případě bateriových vozidel. Tato simulace má sloužit jako jeden z podkladů pro vylepšení protipožárních opatření a jejím výstupem je detailní teplotní profil zkoumaného prostoru během požáru a také ověření postupu vytváření takovýchto simulací za využití softwarového balíčku ANSYS Fluent.

Optimalizace Zn-I průtočné baterie

Bc. Petr Šimek (M2)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Celosvětový trend dekarbonizace energetiky vede k nárůstu výroby elektrické energie pomocí obnovitelných zdrojů s čímž roste i poptávka po efektivním, levném a ekologickém způsobu, jak tuto energii skladovat při jejím dočasném přebytku. Alternativou k standardním Li-ion bateriím mohou být tzv. průtočné baterie. Jedná se o perspektivní technologii na bázi dostupných materiálů, jejíž předností je bezpečný provoz a nezávislé škálování výkonu a kapacity. Tento výzkum se zabývá vývojem a optimalizací hybridní průtočné baterie s elektrolyty na bázi ZnI_2/KI. Pozornost byla nejprve věnována především složení elektrolytu, konkrétně vlivu koncentrace vodivostního aditiva (KCl) na výkon a stabilitu provozu článku. Testován byl i vliv jednotlivých vnitřních komponent baterie jako je iontově selektivní membrána, která slouží k oddělení elektrod a elektrolytů a k zajištění selektivního transportu iontů. V prováděných experimentech byly sledovány především hodnoty ohmického a celkového odporu článku, jednotlivé složky účinnosti a pokles kapacity během galvanostatického nabíjení/vybíjení baterie. Zjištěná optima složení elektrolytu, volby vnitřních komponent baterie a provozních podmínek (průtok elektrolytu, teplota) budou využity při návrhu úložiště v poloprovozní velikosti.

Studium elektrodialýzy v modelovém laboratorním zařízení

Bc. Michal Kolář (M1)

Školitel: doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Elektrodialýza je technika, která používá elektrické pole k přenosu iontů skrze selektivní membrány. Využívá se například při úpravě vody, v mlékárenském průmyslu či ve farmacii. Během procesu se v zařízení mění celá řada veličin jako je koncentrace iontů, elektrický potenciál, teplota atd. Průběh těchto veličin můžeme simulovat pomocí 1D a 2D modelů, které zahrnují zjednodušující předpoklady. To však ne vždy odpovídá skutečně naměřeným výsledkům, jelikož se příslušné veličiny mění ve všech třech dimenzích. Výzkum se tedy zaměřuje na experimentální rekonstrukci 3D profilu jedné z těchto veličin, a to elektrického potenciálu. Dále jsme pracovali na výrobě elektrodialyzéru, díky kterému bychom byli schopni za správného nastavení parametrů procesu odebírat nejvíce odsolený roztok. V případě výzkumu elektrického potenciálu šlo o vyvinutí celého postupu, jak na námi sestaveném elektrodialyzéru měření realizovat. Díky tomu bylo možné příslušné 3D profily vyobrazit, což může přispět k většímu pochopení celého procesu. Zatímco při odebírání roztoku se jednalo zejména o správné nastavené parametrů procesu, abychom dostali roztok o nejnižší koncentraci soli.

Porovnanie výmenných tokov kvapaliny pre rôzne geometrické konfigurácie miešadiel v prostredí fermentorov

Bc. Peter Kavka (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Komplexnosť hydrodynamických systémov v miešaných reaktoroch je nutné študovať z dôvodu lepšieho pochopenia lokálnych dejov. Tie ale môžu mať veľký dopad na celkové správanie systému. Medzi takéto parametre patrí aj objemový koeficient prestupu hmoty, $k_L a$. Ten je považovaný za jeden z rozhodujúcich faktorov pri konštrukcií dvojfázových plynovo- kvapalinových reaktorov, a teda tvorí základ priemyselného dizajnu. Z matematického pohľadu, reaktor s konfiguráciou viacerých miešadiel na spoločnom hriadeli môže byť predstavený ako kaskáda ideálne miešaných reaktorov. Jeden takýto reaktor s miešadlom reprezentuje jednu objemovú sekciu. Vstup a výstup kvapaliny medzi jednotlivými sekciami popisuje výmenný tok, čo je kľúčová informácia pre schopnosť predikcie $k_L a$. Tieto hodnoty sa experimentálne získavajú zo štúdie dynamiky homogenizácie kvapaliny. V aktuálnej literatúre, informácie o výmenných tokoch sú k dispozícii len v obmedzenom rozsahu prevádzkových parametrov (rýchlosť miešania, prietok plynu) a geometrických vlastnostiach (veľkosť a typ miešadla). Z tohto dôvodu uvádzame rozšírenie chýbajúcich podmienok pre koalescentnú vsádzku. Znalosť získaných dát otvára cesty matematickým modelom, ktoré uľahčujú dizajn miešaných reaktorov v priemyselnom prostredí.

Modelování růstu dendritů na povrchu elektrod

Bc. Vojtěch Blahušek (M2)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

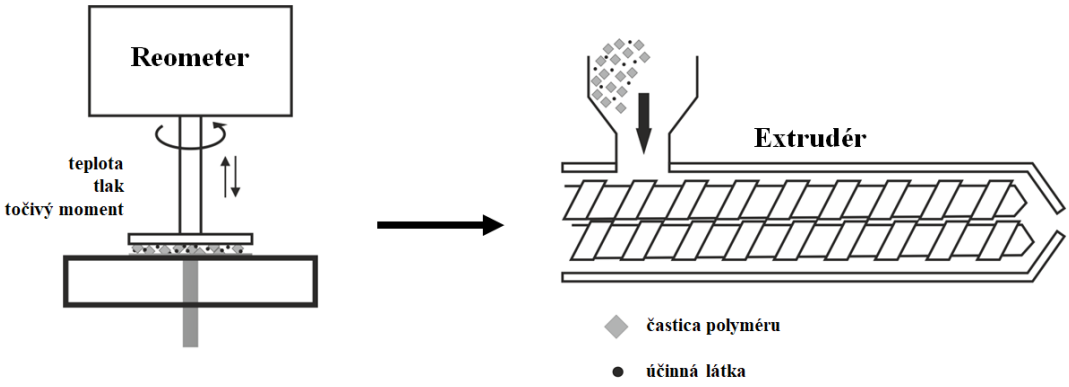
Dnešní doba klade stále větší nároky na technologie pro vysokokapacitní mobilní úložiště elektrické energie, jež jsou nezbytná pro lepší využití obnovitelných zdrojů energie, budování chytrých elektrických sítí a rozšíření elektromobility. V rámci mobilních úložišť jsou vyvíjeny bateriové systémy například na bázi lithium-kyslík, lithium-síra nebo zinek-vzduch. Bohužel, provoz těchto typů baterií není bez obtíží. Jednou z největších výzkumných výzev je v této oblasti růst dendritů – útvarů o rozličné morfologii vznikajících elektrodepozicí kovu na povrchu elektrod. Dendritické útvary snižují životnost i kapacitu baterie a mohou vyústit v přehřívání a zkrat článku. Tato práce se zabývá studiem růstu dendritů a hledáním vztahu mezi podmínkami jejich vzniku a výslednou morfologií skrze matematické modelování. Model je založen na metodě nelineárního fázového (anglicky „phase-field model“), která nachází využití při modelování dynamiky dějů na fázovém rozhraní jako například při solidifikaci, krystalizaci nebo spinodální dekompozici. Vývoj struktur je popisován pomocí proměnné fázového pole, která je spojitá přes celou výpočetní doménu. Výsledný model bude v budoucnu použit pro lepší pochopení vývoje dendritických struktur v elektrochemických článcích a zabránění jejich vzniku.

Stabilizácia pevných foriem kanabinoidov za pomoci polymérov

Bc. Samuel Kriška (M2)

Školitel: prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

Už naši predkovia poznali a využívali rastlinu konope siate (*cannabis sativa*), hlavne kvôli jej pevným vláknam. S postupom času začala byť táto rastlina používaná v ľudovom liečiteľstve, a to vďaka svojim psychoaktívnym a utlmujúcim účinkom spôsobeným kanabinoidmi. V súčasnosti je jedným z najčastejšie skloňovaných kanabinoidov kanabidiol (CBD). Hoci bol prvýkrát izolovaný už v roku 1940, jeho terapeutické účinky sú známe len od prelomu milénia. Klinické štúdie z posledných rokov jednoznačne dokazujú silné protizápalové účinky CBD, priaznivý vplyv pri liečbe úzkosti, pohybových porúch, zmierňovaní bolesti či liečbe psoriázy a atopickej dermatitídy. Na vývoj pevných liekových foriem je teda kladený veľký dôraz. Tu výskum naráža na problém biodostupnosti. Zlepšovanie biodostupnosti CBD je kvôli jeho lipofilite veľkou výzvou. Jednou z možností je príprava pevných disperzií CBD a polyméru s následnou extrúziou, čím sa zaoberá moja práca. Prídavok polyméru môže do istej miery ovplyvniť rozpustnosť CBD, aj jeho permeáciu cez membránu. Otázkou zostáva správanie sa tohoto materiálu v extrudéri. Veľmi dobrý odhad teploty extrúzie a viskoelastických vlastností disperzie môžeme získať s pomocou reometra, ktorý vo veľkej miere dokáže suplovať fyzikálne procesy odohrávajúce sa v extrudéri.

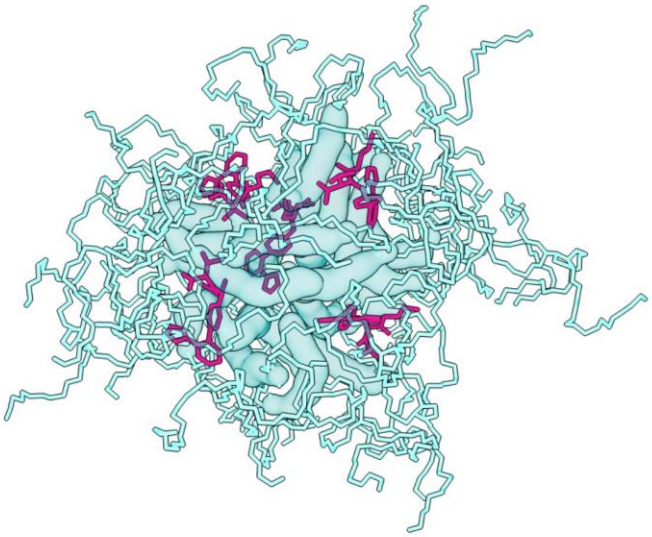


Studium systému API–surfaktant pomocí molekulové dynamiky

Bc. Kateřina Neubergerová (M2)

Školitel: prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

Přibližně 40 % léčiv, které jsou v současné době na trhu je omezeně rozpustných ve vodě. Vzhledem k tomu, že většina z nich je podávána orální cestou, je rozpustnost v žaludečních a střevních šťávách klíčová pro jejich biologickou aktivitu. Možným řešením tohoto problému je přidání aditiv zvyšujících rozpustnost, například surfaktantů. Ty se používají ve formulacích pro zlepšení smáčivosti, dispergovatelnosti a na solubilizaci lipofilních léčiv.Použití surfaktantů u léčiv z BCS třídy II komplikuje pokles schopnosti léčiva permeovat přes membránu střevních buněk. Léčivo se váže v micelách tvořených surfaktantem, což snižuje počet volných molekul léčiva schopných přejít přes membránu.V rámci tohoto projektu byl studován vliv surfaktantu polysorbátu 20 na rozpustnost léčiva valsartan. Pomocí molekulové dynamiky byla popsána struktura micel tvořených surfaktantem – jejich vnitřní uspořádání, počet molekul a velikost. Dále byl pozorován mechanismus zabudování molekuly valsartanu do micely a také změny v její struktuře. Byla navržena metoda pro odhad počtu molekul účinné látky v jedné micele. Výsledky simulací byly porovnány s experimentálními daty a vykazují schodu.



Struktura micely tvořené valsartanem (růžová) a polysorbátem 20 (modrá) z molekulové dynamiky

Funkcionalizované polymérne membrány pre degradáciu pesticídov

Bc. Laura Bábanová (M2)

Školitel: doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Organofosfátové pesticídy sú vo vysokej miere využívané v hospodárstve. Kvôli ich nepriaznivému vplyvu na zdravie ľudí sa pri výrobe BIO rastlinného oleja musia zbytky týchto pesticídov odstrániť. Medzi environmentálne najbezpečnejšie a najefektívnejšie metódy detoxikácie patrí degradácia organofosfátových pesticídov pomocí enzýmu PTE. Tento enzým je vo voľnej forme nestabilný a málo aktívny, preto je potrebná jeho imobilizácia na nerozpustný substrát.V tejto práci sa skúmal efekt PTE enzýmu imobilizovaného na funkcionalizované PVDF membrány s povrchovo viazanými MOF nanočasticami UiO66-NH_2 na degradáciu pesticídu Methyl paraoxonu z rastlinného oleja. Pripravili sa 3 druhy membrán: PVDF-DAMP-GA, PVDF-DAMP-GA-MOF a PVDF- DAMP-GA-MOF-GLY-GA. Enzým PTE bol imobilizovaný na všetky tri membrány. Skúmala sa špecifická aktivita enzýmu PTE v deň imobilizácie a pravidelne po dobu mesiaca.Na charakterizáciu materiálových vlastností skúmaných membrán bola použitá elektrónová mikroskopia a infračervená spektroskopia.

Chemické inženýrství VIII

MÍSTO: BIII

KOMISE

Ing. Alexandr Zubov, Ph.D. (předseda)

Ing. Patrik Bouřa

Ing. Lucie Mašková

Mgr. Vladimír Nerandžič, Ph.D. (Pro.Med.CS Praha)

Ing. Michal Dudák, Ph.D.

PharmDr. Jana Šalandová, Ph.D. (Kapaji)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 Bc. Martin Roudný (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Příprava liposomálních formulací špatně rozpustných a špatně permeujících léčiv

08:50 Bc. Jan Moravčík (M2, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Vícevrstvé potahování částic

09:10 Bc. Oliver Nagy (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Vývoj kompozitního porézního nosiče s nastavitelnou kinetikou vylučování

09:30 Bc. Vojtěch Bílek (M2, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

Metodika stavby simulace míchaných agregačních nádrží

09:50 Bc. Tomáš Němec (M1, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Elektrochemické reaktory s 3D elektrodami

10:30 Bc. Adam Sedlačík (M1, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Static mixers and electrolyte additives for dendrite free zinc deposition at elevated current densities

10:50 Bc. Matouš Tůma (M1, prof. Ing. Michal Přibyl, Ph.D.)

Vývoj zařízení pro elektroforézu ve volném toku

11:10 Bc. Ludmila Řiháková (M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Polymer additives removal for sustainable recycling of plastics

11:30 Bc. Veronika Chudá (M1, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

Charakterizace vlastností agregátů v závislosti na hydrodynamických podmínkách při úpravě vody

11:50 Bc. Adéla Kavalová (M1, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Modelování depolymerizace kyseliny polymléčné

Příprava liposomálních formulací špatně rozpustných a špatně permeujících léčiv

Bc. Martin Roudný (M2)

Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Biologická dostupnost farmaceutických léčiv je ovlivněna jejich rychlostí permeace, tj. schopností látky procházet skrz biologické membrány a jejich rozpustností. Vlastnosti pomalu permeujících účinných látek lze vylepšit jejich kombinací s liposomy, kulovitými vezikulami, které jsou tvořeny fosfolipidovou dvouvrstvou, do které lze léčiva, jak hydrofilního, tak hydrofobního charakteru zapouzdřit. Fosfolipidová dvouvrstva nejenže zlepšuje permeabilitu uzavřených léčiv, ale i zabraňuje jejich předčasnému vylučování, tak snižuje jejich toxicitu, zlepšuje stabilitu a její modifikací lze dosáhnout i cíleného doručování léčiva. Rychlost rozpouštění účinných látek lze zvýšit jejich formulací do nanokrystalů, kdy je zvýšením poměru povrch-objem a snížením ekvivalentního poloměru částice dosaženo zvýšení rychlosti rozpustnosti. I nanokrystaly lze zkombinovat s liposomy, které pomocí své fosfolipidové dvouvrstvy poskytují zapouzdřeným nanokrystalům tzv. „gate-keeping“ efekt. Cílem této práce je zvýšení biodostupnosti účinných látek, a to pro látky jak špatně rozpustné, tak pro látky s pomalou permeací. Byly proto z každé kategorie vybrány modelové látky, pro které byly zkoumány vhodné metody formulace do liposomů s následným vyhodnocením enkapsulační účinnosti.

Vícevrstvé potahování částic

Bc. Jan Moravčík (M2)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Motivací této práce je přispět k dosažení vyšší efektivity při administraci léčiv kombinací více účinných látek v jedné dávce. K dosažení tohoto cíle budou využity potahované částice vyrobené ve fluidním loži s jejichž pomocí vytvoříme modelové strukturované léčivo s řízeným uvolňováním. Práce se zabývá potahováním pelet mikrokrystalické celulózy běžně užívanou kombinací léčiv ezetimib a atorvastatin. Cílem práce je ověřit možnosti potahování pelet danými léčivy a následně potáhnout pelety více vrstvami. Modelový příklad je stavěn na běžném průchodu trávicím traktem, kdy v žaludku je velmi kyselé pH a dál ve střevech je pH více zásadité. Z toho důvodu je jako poslední vnější vrstva nanesen ezetimib, protože se uvolňuje v kyselém prostředí. Prostřední vrstvu bude tvořit eudragit, farmaceuticky neaktivní látka, která se začíná rozpouštět až v oblasti dvanáctníku a ochrání tak vnitřní vrstvy před předčasným rozpuštěním. Vnitřní vrstvu tvoří atorvastatin, který se uvolňuje v zásaditém prostředí. Tato kombinace umožní dřívější rozpuštění vnější látky, která se tak může dřív metabolizovat a zároveň dopraví druhou léčivou látku dál tělem do místa její metabolizace. Efektivita dané kombinace bude prověřena disolučnímy testy a analýzou pomocí HPLC.

Vývoj kompozitního porézního nosiče s nastavitelnou kinetikou vylučování

Bc. Oliver Nagy (M2)

Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Tato práce se zaměřuje na vývoj kompozitního porézního nosiče pro lokální aplikaci antibiotik s kontrolovanou kinetikou uvolňování. Cílem je zlepšit účinnost léčby a minimalizovat nežádoucí vedlejší účinky spojené se systémovým podáváním antibiotik. Experimentální část zahrnuje přípravu porézního fosforečnanu, kde bylo klíčovým krokem vypálení porogenu Avicel PH-101. Dále byla vytvořena lipidická vrstva s antibiotikem, a zkoumány různé modifikace této vrstvy, včetně porozity, složení lipidů a přítomnosti cholesterolu a PLGA (poly(lactic-co-glycolic acid).Výsledky práce naznačují, že různé parametry nosiče ovlivňují kinetiku uvolňování antibiotika z nosiče. Porozita a přítomnost cholesterolu zpomalují uvolňování, zatímco přidání PLGA nemá významný vliv v krátkodobém hledisku. Produktem je nosič s kontrolovanou kinetikou uvolňování antibiotika, kterou lze upravit změnou různých parametrů nosiče.Budoucí směry výzkumu zahrnují detailní zkoumání mechanismů uvolňování antibiotika a experimenty s porézními minitabletkami jakožto alternativní porézní kostra nosiče. Tato studie otevírá nové perspektivy pro využití kompozitních porézních nosičů v oblasti lokální aplikace léčiv.

Metodika stavby simulace míchaných agregačních nádrží

Bc. Vojtěch Bílek (M2)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Výpočetně úsporný model správně popisující hydrodynamické podmínky uvnitř flokulačních nádrží, které jsou součástí úpraven pitné vody, umožní optimalizaci těchto zařízení a přispěje k efektivnější a úspornější výrobě. Geometrická rozmanitost nádrží a odlišnost použitých typů míchadel, společně s velmi omezenou možností zisku experimentálních dat na reálných zařízeních, vyžaduje robustní metodiku simulace proudění míchané nádrže. Přestože literatura obsahuje četné poznatky o modelování míchaných zařízení, práce se často rozcházejí použitou metodikou pro popis turbulence, přístupem ke stavbě výpočetní sítě a neexistuje jednotná metodika simulací. Naopak závěry prací si často odporují, a to i pro standardní narážkovou nádobu s Rusthonovou turbínou. Tato práce testuje 4 přístupy lišící se flexibilitou tvorby sítě pro složitější geometrie a očekávanou kvalitou sítě vzhledem k použitým numerickým metodám. Výsledky vykazují vysokou citlivost na zvolené metodice stavby výpočetní sítě. Porovnáním výsledků s experimentálními daty dostupnými v literatuře byla vybrána nejvěrohodnější metodika, dále použitá pro simulaci zařízení s geometrií obdobnou flokulační nádrži. Vypočtená data jsou porovnána s vlastními experimentálními údaji získanými metodou PTV.

Elektrochemické reaktory s 3D elektrodami

Bc. Tomáš Němec (M1)

Školitel: doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Elektrochemie a elektrochemické reaktory nachází v průmyslu široké uplatnění. Pod elektrochemickým reaktorem si můžeme představit jak zařízení, ve kterém elektrochemickou reakcí vzniká žádaná látka, tak i například baterii. Jedním z faktorů, které významně limitují rychlost a účinnost elektrochemické reakce je difuze reaktantů na povrch elektrody a následná difuze produktů z povrchu elektrody do jádra roztoku. Cílem je tedy maximalizovat mezifázový povrch elektroda/roztok a zajistit krátké transportní vzdálenosti mezi elektrodou a jádrem roztoku. Postup 3D strukturování elektrod jsme již dříve úspěšně aplikovali na případ vanadové průtočné baterie využitím uhlíkových nanotrubek a porézních uhlíkových plstí. Podobný postup nyní využíváme při syntéze hypervalentních sloučenin jodu, které se používají v organických syntézách jako oxidační činidla. Tyto sloučeniny se klasicky připravují za použití toxických látek a elektrochemie zde potenciálně nabízí bezpečnější způsob výroby. V rámci projektu jsme se zaměřili na syntézu λ^3 a λ^5 – iodanů z kyseliny jodobenzoové.

Static mixers and electrolyte additives for dendrite free zinc deposition at elevated current densities

Bc. Adam Sedlačík (M1)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

V snahe obmedziť výrazné znečisťovanie životného prostredia a rapídne zmeny klímy sa čoraz viac snažíme využívať obnoviteľné zdroje energie. Avšak tieto zdroje nie vždy zabezpečia kontinuálny prísun energie, a preto svet potrebuje zariadenia na ukladanie a zároveň distribúciu energie z týchto zdrojov keď je jej prebytok, respektíve nedostatok. Sľubnou technológiou by mohli byť hybridné prietokové batérie zinok-vzduch (ZVHPB), ktoré by mohli vďaka nízkym nákladom, vysokej energetickej hustote a minimálnemu zaťaženiu životného prostredia predstavovať lacné, efektívne a predovšetkým ekologické riešenie. Ukladanie energie v týchto batériách je uskutočnené elektrolytickým vylučovaním zinku zo zinočnatých iónov rozpustených v alkalickom roztoku KOH. Napriek niekoľkým snahám stále nedošlo k efektívnemu obmedzeniu rastu dendritickej štruktúry pri vyšších prúdových hustotách počas nabíjania ZVHPB, čo značne znižuje životnosť batérií. V tejto práci sa zaoberám potláčaním rastu dendritov a zhomogenizovaním nadeponovanej štruktúry pomocou aditív pridaných do roztoku elektrolytu alebo aplikácie vonkajšieho magnetického poľa. Depozícia zinku z prúdiaceho elektrolytu prebiehala pri zvýšenej teplote 40 °C v galvanostatickom režime a nadeponované vrstvy boli následne charakterizované pod SEM.

Vývoj zařízení pro elektroforézu ve volném toku

Bc. Matouš Tůma (M1)

Školitel: prof. Ing. Michal Přibyl, Ph.D.

Syntéza a separace speciálních chemikálií v kontinuálním režimu je v dnešní době významným požadavkem farmaceutického a chemického průmyslu. Předložená práce je zaměřena na vývoj zařízení pro kontinuální elektroforetickou separaci chemických látek ve volném toku, kdy je kolmo na směr proudu nosného elektrolytu vloženo stejnosměrné elektrické pole. Oproti bakalářskému projektu, na který předložená práce navazuje, došlo k významným změnám v konstrukci zařízení a byl použit jiný druh membrán k oddělení separační komory od elektrodových rezervoárů, což napomohlo k lepším výsledkům separačního procesu. Testování funkčnosti vyrobeného zařízení bylo uskutečněno pomocí ve vodě rozpustných barviv nesoucích elektrický náboj. Pomocí experimentálních parametrických studií byly nalezeny režimy, které umožňují vychylování koncentračních trajektorií barviv ze směru toku elektrolytu. Uvedený výsledek je podmínkou nutnou pro kontinuální separaci látek s elektrickým nábojem ve zkonstruovaném zařízení. Z experimentálních dat bylo též možné odhadnout hodnotu efektivní elektroforetické mobility barviva v prostředí nosného elektrolytu. Dosažené výsledky mohou napomoci při vývoji kontinuálně pracujících elektroforetických separátorů pro oddělování enantiomerů a dalších speciálních chemikálií.

Polymer additives removal for sustainable recycling of plastics

Bc. Ludmila Řiháková (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Plastics are multifunctional materials that are used in all sectors as an indispensable material. Plastics production is therefore increasing more and more every year, where piles of used plastics and textiles are becoming a serious environmental issue. Unfortunately, no method has yet been devised to solve the problem of increasing plastic waste, as it is cheaper to produce new plastic than to recycle used plastics.This work focuses to find a novel approach how to close circular plastic waste economy. It is solvent based recycling process that is used to extract polymer additves by dissolving polymers with suitable solvents and extraction agent. recycling. Common plastic waste has an undefined composition of additives species and its concentration in polymer matrix. We need to then produce small amount of defined plastic waste to conduct comprehensive study with various solvents, extraction agent and process conditions. These plastic waste with various and defined concentration is used to calibrate spectroscopic method which provide us a pointer how to find the optimal process conditions for the plastics recycling. Our goal is to create the simplest, cheap and sophisticated method for recycling plastics that is environmentally friendly.

Charakterizace vlastností agregátů v závislosti na hydrodynamických podmínkách při úpravě vody

Bc. Veronika Chudá (M1)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

K odstranění koloidních částic při úpravě vody se využívává flokulace, tedy agregace částic do větších struktur – vloček. Jejich velikost či struktura mají vliv na účinnost následné separace a je tak žádoucí vlastnosti agregátů řízeně ovlivňovat. Charakteristika vloček závisí jak na jejich chemické podstatě dané povahou nečistot, tak na hydrodynamických podmínkách ve flokulačním zařízení. Charakterizace vloček v závislosti na proměnlivých podmínkách v reálných průtočných zařízeních by usnadnila návrh a optimalizaci úpraven, dobře je ale popsaná pouze ve vsádkových systémech za konstantních podmínek. K doplnění chybějících dat byla navržena a postavena aparatura s úzkou distribucí gradientu rychlosti, kterým jsou hydrodynamické podmínky popsány. Díky tomu je možné podmínky kontrolovaně měnit, a tak simulovat pohyb agregátu reálným zařízením a jeho vývoj. Naměřená data ukázala, že svůj účel aparatura plní pouze při vyšších hodnotách otáček, tedy při vyšších gradientech. Při nižších dochází k nechtěným jevům, např. sedimentaci vloček, a tak ke zkreslení výsledků. Pro získání dat i v této oblasti byla navržena nová aparatura vycházející z původní, která by tento problém měla eliminovat. Na té bude následně probíhat experimentální studie dané závislosti.

Modelování depolymerizace kyseliny polymléčné

Bc. Adéla Kavalová (M1)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Kyselina polymléčná (PLA) se řadí mezi přední komerční polymery vyráběné z obnovitelných zdrojů, jako je škrob nebo cukrová třtina. Její uplatnění sahá od obalových materiálů a izolačních pěn až po automobilový průmysl. Jednou z hlavních výhod, která PLA odlišuje od konvenčních plastů získávaných z fosilních paliv, je její schopnost biologické rozložitelnosti. V dnešní době je recyklace materiálů esenciální pro dosažení udržitelného rozvoje, a i z toho důvodu je depolymerizace na monomerní jednotky předmětem četných studií. PLA je syntetizováno tzv. polymerací s otevřením kruhu (angl. „Ring Opening Polymerization“), což je reverzibilní chemická reakce, jejíž směr lze obrátit vhodnými podmínkami. Klíčovým faktorem pro tuto reakci je tzv. teplota depolymerizace (angl. „ceiling temperature“), která stanovuje rovnováhu mezi dopřednou a zpětnou reakcí. Cílem této studie je využít již validovaný víceúrovňový model výroby kyseliny polymléčné a upravit jej za účelem otočení rovnováhy ve prospěch depolymerizace. Takto získaný model depolymerizace PLA na laktid (cyklický dimer kyseliny mléčné) bude dále rozšířen o popis vlivu termodynamických interakcí v systému polymer-monomer-rozpouštědlo a využit pro optimalizaci procesu.

Ústav fyziky a měřicí techniky (444)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

SEZNAM SEKCÍ

1. Fyzika a měřicí technika I

2. Fyzika a měřicí technika II

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKY A MĚŘICÍ TECHNIKY

Fyzika a měřicí technika I

MÍSTO: B220

KOMISE

prof. Dr. Ing. Martin Vrňata (předseda)

Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Ing. Martin Straka, Ph.D.

Ing. Michal Pisko, Ph.D.

Ing. Filip Matějka

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 Amálie Burešová (B3, Ing. Jan Kejzlar)

Nanodráty na tenkých vrstvách kovů

09:20 Jan Donát (B3, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)

Postup přípravy aerogelu a jeho možná použití

09:40 Denis Najman (B3, Ing. Bc. Michal Novotný, Ph.D.)

Cesta k černému kovu skrze plazmochemii

10:00 Cyril Popek (B3, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)

Růst černých kovů na modifikovaných substrátech

10:20 Bc. David Kavka (M1, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)

Optimalizace parametrů syntéz křemíkových nanočástic s cílem maximalizovat efektivitu luminiscence

10:40 Bc. Miriam Magočiová (M1, prof. Dr. Ing. Martin Vrňata)

Kalibrační směsi par pro senzoriku připravované systémem Owlstone

11:00 Bc. Radim Weisser (M1, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)

Symetrické a hybridní superkondenzátory založené na vodných elektrolytech s vysokou koncentrací solí

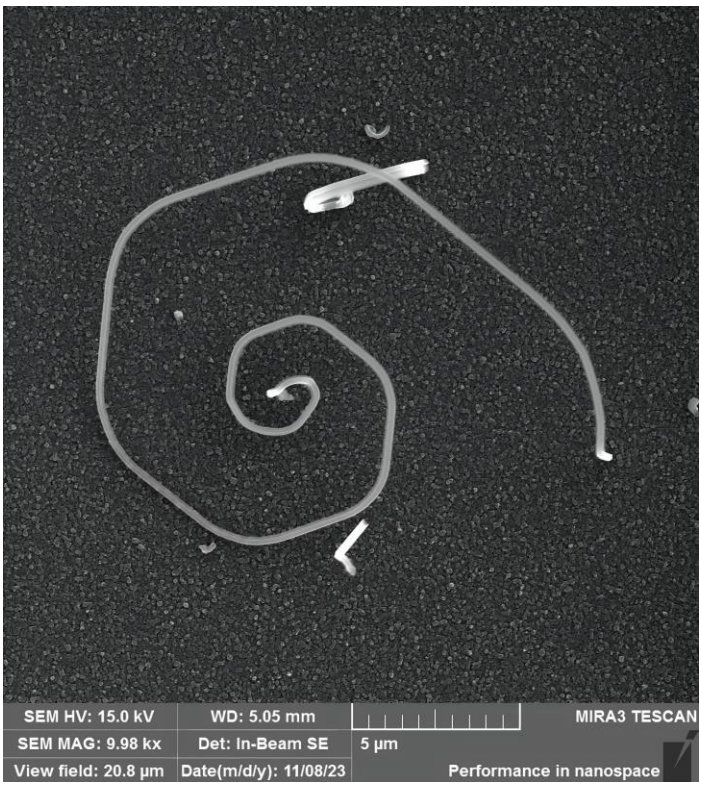
vyhlášení výsledků

Nanodráty na tenkých vrstvách kovů

Amálie Burešová (B3)

Školitel: Ing. Jan Kejzlar

Tato práce je věnována růstu a charakterizaci nanodrátků na černé hliníkové vrstvě. Pozorována byla intenzita růstu drátků v závislosti na teplotě vzorku. Současně byl testován vliv mechanického poškození jinak homogenní vrstvy na růst nanodrátků. Testovány byly vzorky černého hliníku připravené metodou magnetronového naprašování v atmosféře argonu s příspěvkem dusíku. Pro studium morfologie byla vybrána metoda skenovací elektronové mikroskopie (SEM). Na povrchu vrstvy byly překvapivě nalezeny nanodrátky již před zahřátím, možné vysvětlení tohoto jevu je vliv teploty při depozici či oxidace atmosférickým kyslíkem při skladování. Po prvotní analýze byly vzorky vyhřáty na 200°C a opět přezkoumány. Četnost nanodrátků se tímto postupem rapidně zvýšila, potvrzujíc vliv teploty na jejich růst. Dále bylo potvrzeno, že nanodrátky lépe rostou z mechanických defektů vrstvy.



Postup přípravy aerogelu a jeho možná použití

Jan Donát (B3)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Gel je koloidní systém, který vzniká zesíťováním nanočástic tvořící porézní strukturu, která je schopna zachytit určitý objem kapaliny. Aerogel, nazývaný taktéž zmrzlý dým, patří mezi pevné látky. Při jeho přípravě je nejprve vytvořen gel, ve kterém je následně kapalina nahrazena plynem. Nejčastější materiál používaný pro výrobu aerogelu je oxid křemičitý, který jsme si zvolili jako první pro výrobu. Příprava je ovšem možná i z jiných metalických oxidů (chrom, zinek, nikl, hliník, lanthanoidy). Gel je možno připravit mnoha cestami. Námi zvolená je bazicky katalyzovaná reakce tetramethyl orthosilikátu, který následně vysušíme metodou superkritického CO_2. Dosavadním pokrok práce činí vyzkoušení tvorby gelu a sestavení aparatury, která je schopna udržet kapalný CO_2. Aerogely se vyznačují vysokou porozitou, která dosahuje až 99,98%, a obrovským vnitřním povrchem, až 1000 m^2/g. V důsledku vysoké porozity patří mezi látky s nízkou hustotou, řádově jednotek g/dm^3. Těchto jejich unikátních vlastnosti již využívá NASA. Velký vnitřní povrch umožňuje aplikaci v procesech, při kterých je výhodné maximalizovat mezifázový povrch (např. adsorpce plynů nebo katalytické reakce). Použitím materiálů využívaných v chemických senzorech by tedy mohlo být možné docílit nízkého detekčního limitu.

Cesta k černému kovu skrze plazmochemii

Denis Najman (B3)

Školitel: Ing. Bc. Michal Novotný, Ph.D.

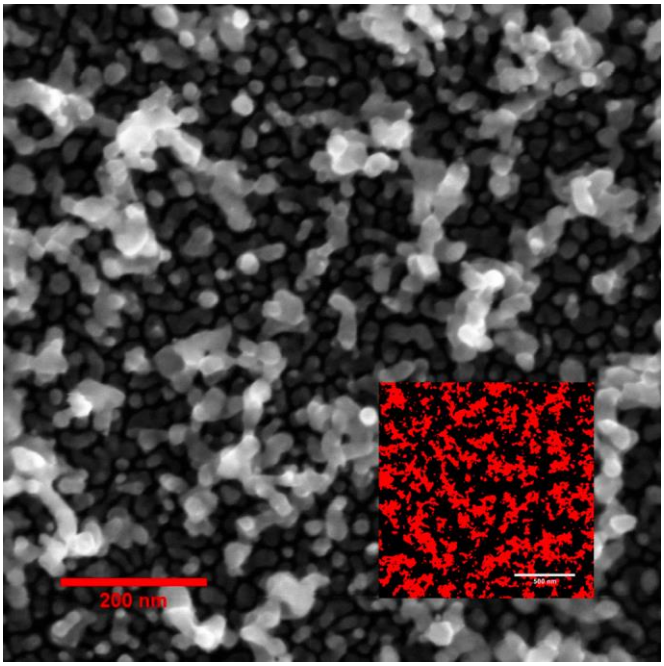
Již po staletí bylo snem alchymistů přeměnit levné kovy na zlato. Dnes je taková představa jednoduše realizovatelná skrze pokovování povrchů pomocí materiálů se zlatavým vzhledem. Jedním takovým materiálem se zlatým vzhledem je TiN. S trochou nadsázky lze říci, že tématem této práce bude obrácený alchymistický postup, za účelem přeměny zlatavého povrchu TiN na černý. Zhruba od roku 1930 je totiž známo, že kovy, které jsou napařovány v přítomnosti plynu o tlaku zhruba 100 Pa, jsou deponovány jako porézní tenké vrstvy, nazývané černé kovy. Tyto kovy vykazují vysoký podíl povrchu ku objemu a představují vhodné kandidáty pro použití jakožto aktivní vrstvy v plynových či pyrometrických senzorech.Cílem této práce je studovat plazmochemické reakce během růstu vrstev a s jejich pomocí predikovat co nejvhodnější podmínky pro přípravu černého titanu pomocí magnetronového naprašování. Budou použity metody zkoumající vliv depozičních podmínek (tlak, druh plynu, výkon magnetronu) na chování plazmatu. Jednou z těchto použitých metod je optická emisní spektroskopie, která je nedestruktivní metodou prvkové analýzy. V této práci byla použita k naleznutí vhodných podmínek plazmatu, k výpočtu excitačních teplot atomů Ti I či rotačních a vibračních teplot dvouatomové molekuly dusíku.

Růst černých kovů na modifikovaných substrátech

Cyril Popek (B3)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Vrstvy černých kovů jsou vysoce nano-strukturované. Jejich povrchová morfologie způsobuje silnou absorpci dopadajícího světla. Vrstvy černých kovů mohou mít díky svým unikátním vlastnostem aplikaci jak v senzorice plynů, tak také například v katalýze. Příprava vrstev černého zlata probíhala vakuovým napařováním z wolframové lodičky za zvýšeného tlaku (15 Pa, Argon) ve vakuové aparatuře. V rámci práce byl různými způsoby modifikován (očištěn) křemíkový substrát. Jeden substrát byl pouze očištěn organickými rozpouštědly, druhý byl vystaven argonové plazmě v RF výboji, a třetí byl exponován ozonem a UV zářením. Pomocí skenovací elektronové mikroskopie byla studována morfologie černého zlata připraveného na takto modifikovaných substrátech a vliv stejných technologii na vlastní strukturu povrchu černého zlata. Získané snímky byly studovány pomocí dostupného software pro analýzu obrazu.



Optimalizace parametrů syntéz křemíkových nanočástic s cílem maximalizovat efektivitu luminiscence

Bc. David Kavka (M1)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

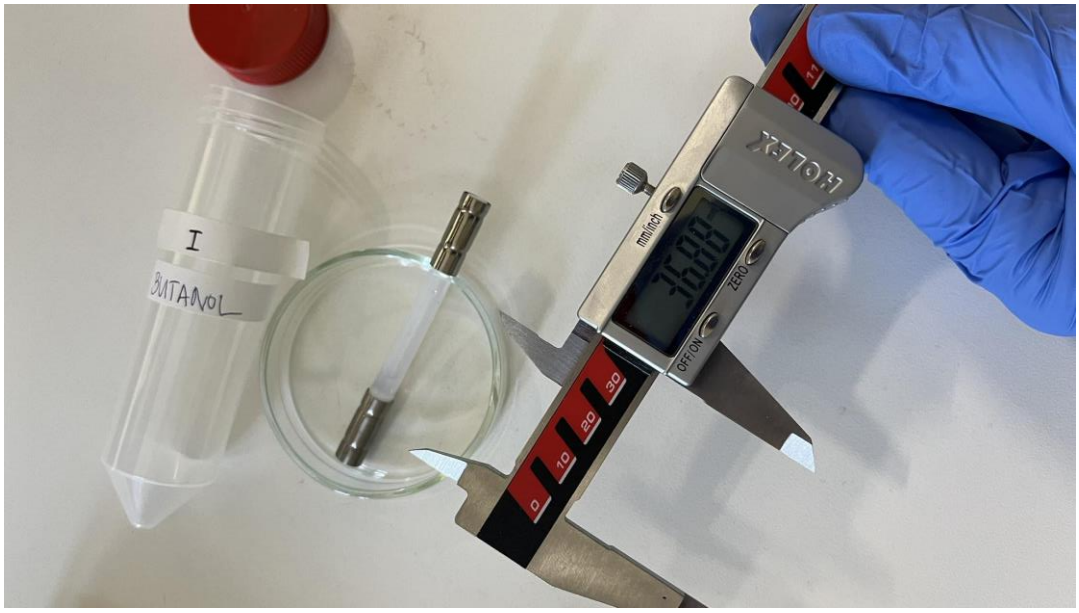
Během posledních dvaceti let se křemíkové nanokrystaly (Si-NCs) staly klíčovým předmětem výzkumu v oblasti elektroniky, optoelektroniky, optiky a fotovoltaiky. Zmenšením rozměrů a úpravou povrchové terminace lze zlepšit vlastnosti křemíku, včetně tuhosti, povrchové reaktivity a zejména světelné emisivity. Navzdory intenzivnímu výzkumu čelí masová aplikace Si-NCs výzvám, přičemž klíčovým problémem je vytvořit efektivní metodu přípravy s dostatečným množstvím kvalitního nanomateriálu.Tato práce se zaměřuje na optimalizaci přípravy Si-NCs pomocí netermálního plazmatu. Experimentálně se zkoumají různé parametry syntézy, včetně výkonu zdroje plazmatu, průtoku pracovních plynů a jejich tlaků. Úspěšnost syntézy je hodnocena na základě spektrální pozice fotoluminiscence nanočástic. Nejlepší vzorky budou také podrobeny charakterizaci struktury a chemického složení povrchu. Cílem je nalezení optimálních podmínek pro efektivní výrobu Si-NCs s požadovanými vlastnostmi.

Kalibrační směsi par pro senzoriku připravované systémem Owlstone

Bc. Miriam Magočiová (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Martin Vrňata

Plynné zmesi s definovanou nízkou koncentráciou zložiek majú bohaté využitie v senzorike, kde sa používajú na validáciu limitu detekcie, cilivosti a selektivity pripravených senzorov. Jednou z možných metód prípravy plynných zmesí je permeačná metóda, pri ktorej výsledná zmes vzniká permeovaním zložky cez steny teflónovej trubice do prúdu nosného plynu v smere záporného gradientu koncentrácie. Permeačné trubice sú preferovanou voľbou v laboratórnej alebo priemyselnej praxi najmä kvôli ich jednoduchej príprave, stálosti parametrov v čase a lineárnej zmene permeačnej rýchlosti s teplotou.Táto práca sa zaoberá štúdiom teplotne a vekovo závislých anomálií permeačných trubíc plnených butanolom alebo kyselinou octovou, ktoré som objavila pri meraní svojej bakalárskej práce. Práve vďaka veľkému potenciálu permeačných trubíc ako zdrojov kalibračných zmesí je dôležité vyhodnotiť, pri akých podmienkach poskytujú trubice plynné zmesi so stálou koncentráciou zložiek. Zmesi rôzne starých permeačných trubíc boli vyhodnocované pri rôznych teplotách dvoma analytickými metódami. Porovnaním so skoršie získanými dátami bola stanovená optimálna teplota a optimálny vek trubíc pre získanie čo najpresnejšie definovaných koncentrácií zmesí.

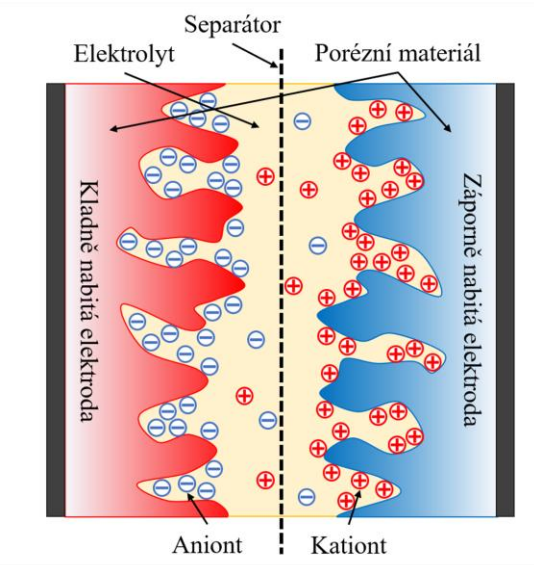


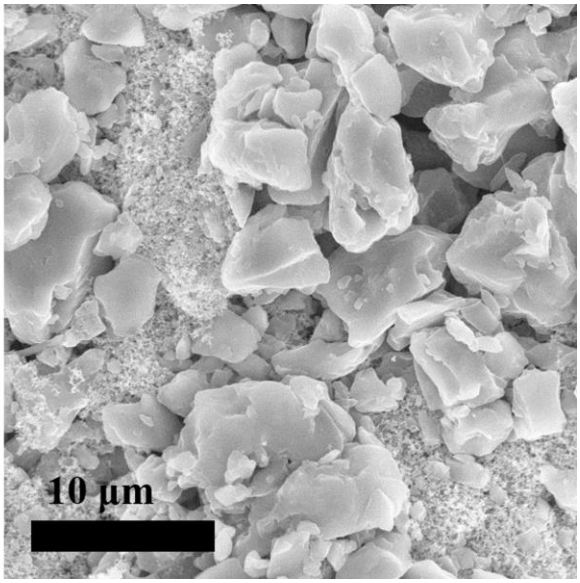
Symetrické a hybridní superkondenzátory založené na vodných elektrolytech s vysokou koncentrací solí

Bc. Radim Weisser (M1)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Současná doba klade velké nároky na účinné uchovávání elektrické energie. Nyní jsou běžnými zařízeními pro skladování elektrické energie baterie, které mají také své nevýhody. Superkondenzátory tyto nevýhody v některých oblastech dokáží efektivně řešit, právě díky principu uchovávání elektrické energie ve formě elektrostatického pole nebo v rychlých redoxních reakcích při povrchu elektrody. Tato práce je zaměřena na symetrické superkondenzátory s elektrickou dvojvrstvou s použitím aktivního uhlíku jako aktivního materiálu elektrody a vodného roztoku chloristanové soli o vysoké koncentraci jako elektrolytu (tzv. „water in salt“), který poskytl široké potenciálové okno. Superkondenzátor s elektrodou z aktivního uhlíku a $LiClO_4$ „water in salt“ elektrolytem vykazoval specifickou kapacitu 38,4 F/g. Dlouhodobé experimenty prokázaly cyklickou životnost více než 100 000 cyklů se ztrátou pouhých 13 % ze své počáteční specifické kapacity. Dalším krokem je vytvoření hybridního superkondenzátoru s jednou již vyzkoušenou elektrodou z aktivního uhlíku, kde nebude docházet k redoxním dějům, zatímco na druhé elektrodě z organického materiálu budou probíhat rychlé redoxní reakce, což pomůže výrazně zvýšit celkovou kapacitu oproti předchozímu systému.





Fyzika a měřicí technika II

MÍSTO: B212

KOMISE

doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc. (předseda)

Dr. Mgr. Jana Jirešová

Ing. Jitka Kopecká, Ph.D.

doc. Ing. Vladimír Myslík, CSc.

Ing. Anna Machková

PROGRAM

09:30 **zahájení**

09:30 Lucie Dorazilová (B3, Dr. Mgr. Jana Jirešová)

Dekontaminace trvanlivých potravin pomocí netermálního plazmatu

09:50 Ondřej Michal (B3, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.)

Separce CO ze směsí plynů vzniklé z nízkoteplotní plazmy

10:10 Bc. Tomáš Albert Štefanov (M1, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.)

Návrh, výstavba a využitie nízkopoľového spektrometru nukleárnej magnetickej rezonancie

10:30 Bc. Anna Hodžiová (M2, Dr. Mgr. Jana Jirešová)

Využití netermálního plazmatu k ošetření plísní napadených stavebních materiálů

10:50 Bc. Laura Thonová (M2, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)

Diagnostika korónového výboje typu point-to-ring jako nástroje pro inhibici mikroorganismů

11:10 Bc. Jakub Novotný (M2, Dr. Mgr. Jana Jirešová)

Nový směr léčby onychomykóz

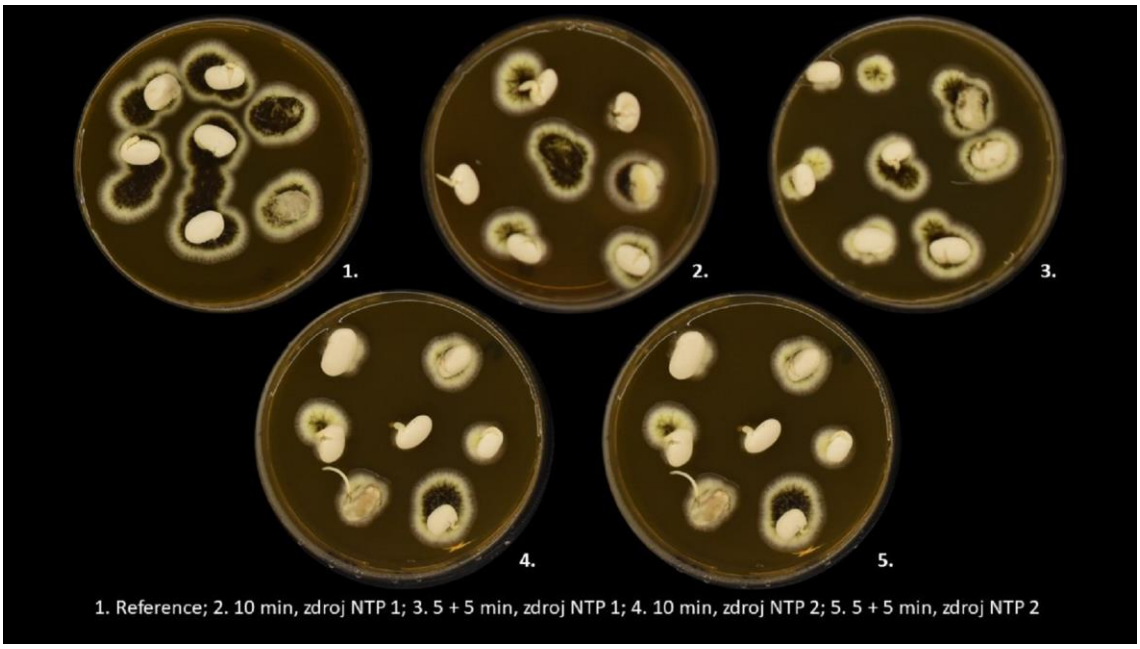
vyhlášení výsledků

Dekontaminace trvanlivých potravin pomocí netermálního plazmatu

Lucie Dorazilová (B3)

Školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Trvanlivé potraviny často bývají kontaminovány různými mikroorganismy. Přestože je jejich množství hlídáno a není pro běžného člověka nebezpečné, může představovat riziko pro lidi s oslabenou imunitou a také snižovat kvalitu a trvanlivost potravin. Stále se vyvíjejí nové metody, které zbaví potraviny nežádoucích mikroorganismů a zároveň zachovají původní kvalitu potravin. Jednou z nových metod je použití netermálního plazmatu (NTP). NTP se generuje pomocí elektrického výboje ve vzduchu či v jiných plynech. NTP obsahuje radikály a jiné reaktivní kyslíkové částice, které účinně likvidují nežádoucí mikroorganismy. NTP se dá použít i na potraviny, pro něž by byly jiné metody dekontaminace nevhodné. V této práci jsem zkoumala vliv NTP na potraviny, které byly uměle kontaminovány plísní *Aspergillus brasiliensis*. Růst plísně na potravinách vystavených NTP byl zpomalen oproti neošetřeným vzorkům. Pro generaci plazmatu byly použity dvě rozdílné aparatury a byl srovnáván jejich vliv.



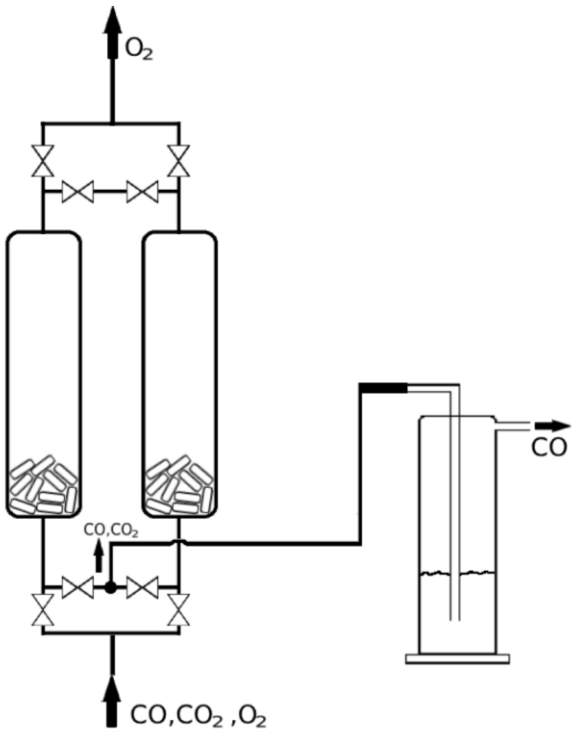
1. Reference; 2. 10 min, zdroj NTP 1; 3. 5 + 5 min, zdroj NTP 1; 4. 10 min, zdroj NTP 2; 5. 5 + 5 min, zdroj NTP 2

Separce CO ze směsí plynů vzniklé z nízkoteplotní plazmy

Ondřej Michal (B3)

Školitel: Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Jedna z aplikací netermálního plazmatu je rozklad skleníkového plynu, oxidu uhličitého, na oxid uhelnatý a kyslík. Tato směs také obsahuje oxid uhličitý, který se nerozložil. Tato práce se zabývá separací těchto plynů od sebe, s cílem dosáhnout co největší čistoty. Tato separace se provádí ve dvou částech. V první části se oddělí kyslík pomocí jednotky PSA (pressure swing adsorption), která jako sorbent využívá zeolity. Zbylá směs obsahuje oxid uhličitý a uhelnatý. Tyto dva plyny se poté oddělí ve druhé části práce, a to sorpcí oxidu uhličitého do bazického roztoku ethanolaminu. Tento proces může být ekologicky významný, jelikož se jedná o recyklaci oxidu uhličitého ze spalovacích procesů a oxid uhelnatý je velmi významná molekula v oblasti průmyslu (výroba methanolu, močoviny a syntézního plynu).



Návrh, výstavba a využitie nízkopoľového spektrometru nukleárnej magnetickej rezonancie

Bc. Tomáš Albert Štefanov (M1)

Školitel: Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

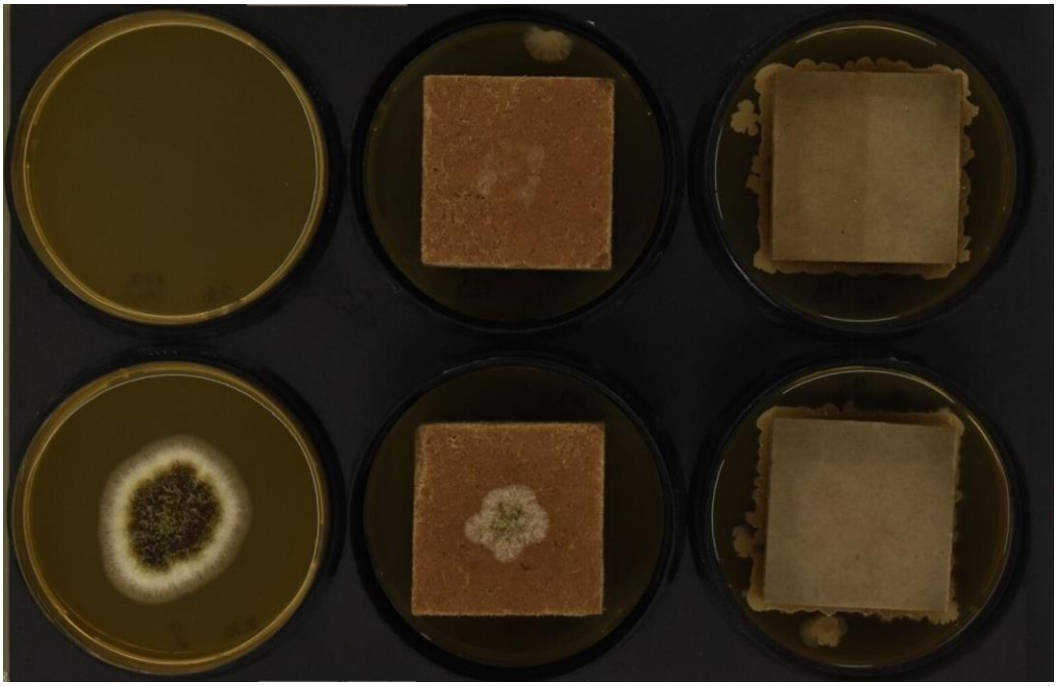
Molekuly v kondenzovanej fáze vykonávajú najrozmanitejšie formy pohybu, ktoré sú ovplyvnené ich vzájomnou interakciou, tvarom, teplotou a pod. Jedným zo spôsobov akým tieto javy študovať experimentálne je spolu s mikrovlnnou a dielektrickou spektroskopiou spektroskopia NMR. Relaxačné časy T_1 (spin-mriežkový) a T_2 (spin-spinový) namerané pomocou NMR poskytujú informácie o dynamických parametroch systému, ako napríklad rotačné korelačné časy τ_c, popisujúce rotáciu molekúl súvisiacu s mikroviskozitou. V tejto práci sa zameriavam na návrh prístroja schopného merať relaxačné parametre kondenzovaných systémov, postrádajúceho nevýhody klasických prístrojov ako vysoká počiatočná cena, prevádzkové náklady či imobilita. Práca začala teoretickým popisom prístroja a metódy na základe ktorého sa následne navrhovali jednotlivé obvody a software. Ako základ pre kontrolu elektroniky som použil rozšírenú a cenovo prijateľnú platformu Arduino založenú na mikrokontrolére ATmega2560 programovateľnú v C++. Generáciu vysoko homogénnych magnetických polí som dosiahol výrobou cievok neobvyklého sférického tvaru. Cielom tejto práce je popis, výroba a charakterizácia jednotlivých segmentov, úspešné sprevádzkovanie celého prístroja a jeho kvalitatívne porovnanie s klasickými NMR spektrometrami.

Využití netermálního plazmatu k ošetření plísní napadených stavebních materiálů

Bc. Anna Hodžiová (M2)

Školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Plazma je ionizovaný plyn, ktorý je síce celkovo neutrálny, ale obsahuje vysoký počet elektricky nabitých častíc. Pri interakcii elektrónov s atómami a molekulami dochádza k disociácii molekúl a k ionizácii. Atómy, ióny a radikály či už v základnom alebo ionizovanom stave nachádzajúce sa v plazme sú vysoko reaktívne. Práve týmto časticiam sa z veľkej časti pripisuje antimikrobiálny účinok plazmy. Poškodzujú bunečnú stenu a DNA, čo môže viesť až k smrti buniek.Značná časť výskumu sa venuje účinkom nízkotermálnej plazmy na baktérie, v tejto práci boli skúmané účinky nízkotermálnej plazmy na plesne. S plesňami sa najčastejšie stretávame v budovách, a teda pre simuláciu takýchto podmienok boli použité stavebné materiály – drevovláknitá doska a sadrokartón. Pre porovnanie bolo použité aj živné médium. Vybraný bol *Aspergillus brasiliensis* ako zástupca početného rodu plesní. Vzorky boli exponované v rôznom časovom intervale od inokulácie, pričom boli exponované raz alebo opakovane. Sledované bolo tempo ich rastu v porovnaní s kontrolnými vzorkami. Cieľom je optimalizovať toto ošetrenie plazmou tak, aby bolo možné plesne úplne zahubiť.

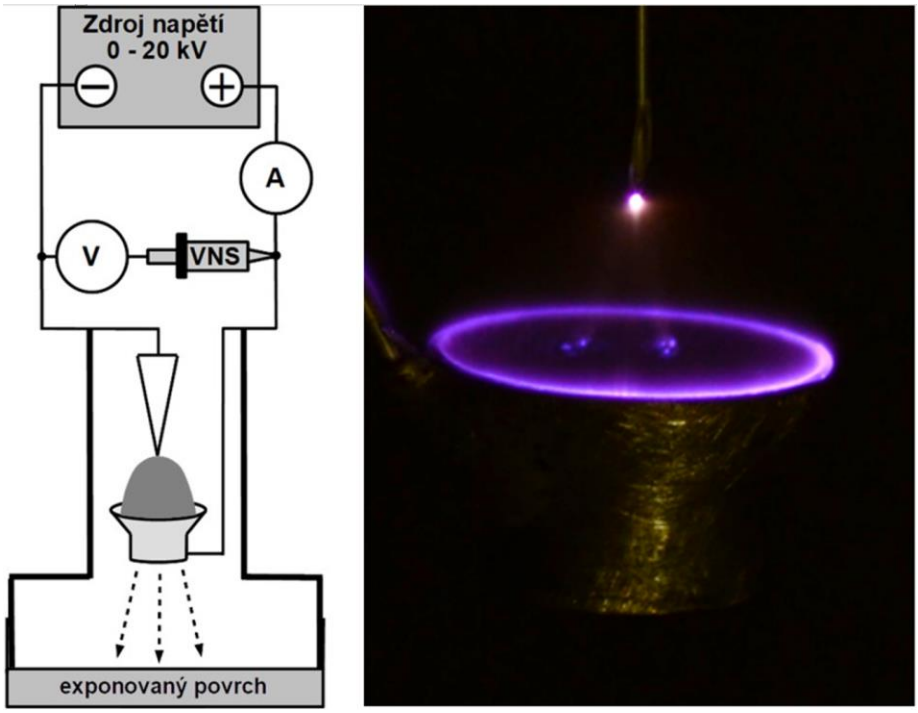


Diagnostika korónového výboje typu point-to-ring jako nástroje pro inhibici mikroorganismů

Bc. Laura Thonová (M2)

Školitel: doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Diagnostika korónového výboje jako nástroje pro inhibici mikroorganismůJméno studenta: Bc. Laura ThonováVedoucí práce: doc. Ing.Vladimír Scholtz, Ph.D.Korónový výboj jako jeden ze zdrojů netermálního plazmatu podléhá již několik desítek let podrobnému výzkumu včetně studia jeho potenciálních baktericidních účinků. V dosavadních výzkumech byla dávána přednost zejména elektrodovým konfiguracím korónového výboje hrot proti rovině (ang. point-to-plane) a hrot proti hrotu (ang. point-to-point).Cílem této práce bylo provést základní fyzikální a chemickou diagnostiku bipolárního korónového výboje v méně prostudované elektrodové konfiguraci hrot proti prstenci (ang. point-to-ring) s ohledem na jeho využití pro inhibici mikroorganismů. Na zvoleném korónovém výboji byla měřena voltampérová charakteristika, časové průběhy napětí a proudu včetně vyhodnocení jejich frekvenčních spekter a koncentrace generovaného ozónu a oxidů dusíku (NO, NO_2). Zmíněné diagnostiky byly změřeny pro různé parametry výboje (napětí, proud, výkon, mezi-elektrodová vzdálenost).



Nový směr léčby onychomykóz

Bc. Jakub Novotný (M2)

Školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Tato práce se zaměřuje na problematiku léčby onychomykózy, častého onemocnění nehtů způsobeného dermatofyty, které vyžaduje dlouhodobou léčbu. Lokální léčba onychomykózy trvá obvykle až jeden rok a vyžaduje aktivní spolupráci pacienta. Systémová léčba má nezanedbatelné vedlejší účinky. Využití netermálního plazmatu (NTP) pro léčbu přináší určité zlepšení, avšak není účinné ve všech případech.Hledání nových možností vede k kombinaci dezinfekčních přípravků s NTP. Předchozí práce naznačuje, že kombinace NTP s bengálskou červení poskytuje lepší výsledky, avšak stále není dokonalá. Tato práce zkoumá potenciál kombinace NTP s Betadine, což představuje potenciální výhodu vzhledem k širokému využívání Betadine jako standardní dezinfekce, na niž jsou zvyklí jak pacienti, tak lékaři.

Ústav matematiky, informatiky a kybernetiky (446)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

SEZNAM SEKCÍ

1. Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika I

2. Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika II

SPONZOŘI ÚSTAVU MATEMATIKY, INFORMATIKY A KYBERNETIKY

MSD

SIDAT
AUTOMATION-INFORMATICS

EATON
Powering Business Worldwide

ORLEN Unipetrol

HUMUSOFT | MathWorks

PRO.MED.CS
Praha a.s.

EXPS
Engineering Technology

Pilsner Urquell

vesmír

Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika I

MÍSTO: A335

KOMISE

doc. Ing. Jan Švihlík, Ph.D. (předseda)

Ing. Jan Kohout, Ph.D.

Mgr. Šimon Axmann, Ph.D.

Ing. Olga Rubešová (EATON)

Ing. Tereza Svatoňová (ExPS)

Petra Majerová (SIDAT)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 Bc. Jakub Ciler (M1, Ing. Jan Kohout, Ph.D.)

Klasifikace asymetrie v obličeji pomocí neuronové sítě

08:50 Milana Dejaková (B2, Ing. Ondřej Studeník)

Vývoj nástroje pro analýzu CFD-DEM simulací

09:10 Ivana Havlenová (B2, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

Příprava výpočetního prostředí pro topologickou optimalizaci mikrofluidního čipu

09:30 Bc. Hana Josífková (M1, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)

Vývoj navigačního systému pro kontrolu a řízení trajektorie rakety

09:50 Bc. Jan Michna (M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)

Voice Pathology Detection

10:10 Bc. Eliška Paulíková (M1, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

Návrh a konstrukce Pellobota pro manipulaci s drobnými objekty

10:30 Bc. Jakub Seiner (M1, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)

Detekce poruch hlasu ze zvukových nahrávek

vyhlášení výsledků

Klasifikace asymetrie v obličeji pomocí neuronové sítě

Bc. Jakub Ciler (M1)

Školitel: Ing. Jan Kohout, Ph.D.

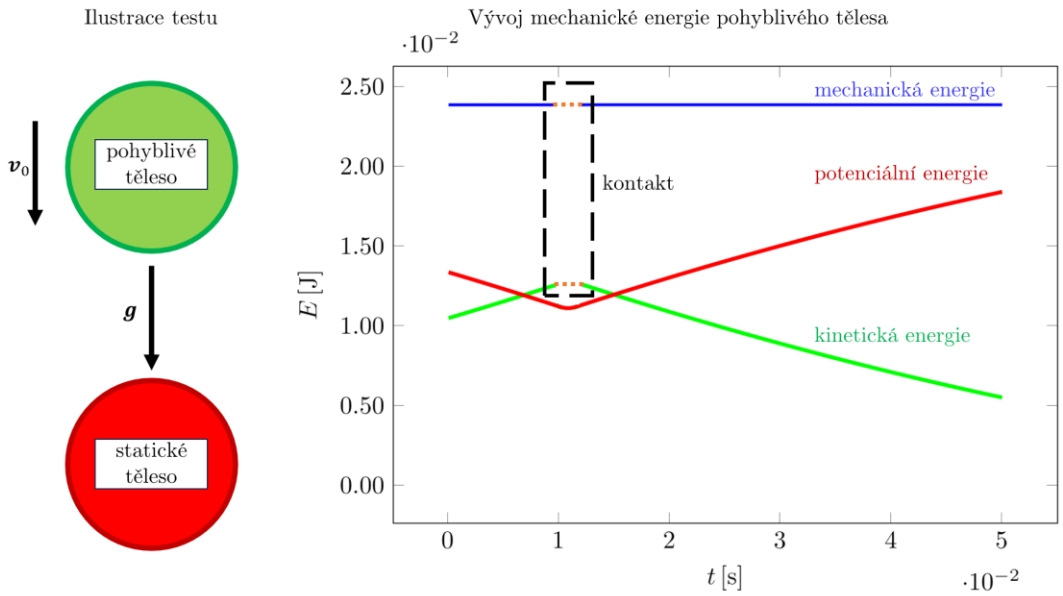
Při operaci rovnovážného ústrojí dojde k přerušení lícního nervu. Následná rehabilitace je závislá na pravidelných návštěvách lákaře, které ovšem nemusejí být dostatečně frekventované. Z tohoto důvodu je snaha vyvinout aplikaci, která by pacientům poskytovala okamžitě a v domácím prostředí informace o jejich stavu. Ten je vyhodnocován pomocí neuronové sítě implementované v Pythonu. Používají se konvoluční a plně propojené vrstvy pro extrakci a klasifikaci příznaků. Pro vyhodnocení sítě jsou využity charakteristiky jako F1 Score, Recall, Accuracy a Precision. Implementace zahrnuje také k-fold a leave-one-out validační postupy pro posouzení spolehlivosti modelu.

Vývoj nástroje pro analýzu CFD-DEM simulací

Milana Dejaková (B2)

Školitel: Ing. Ondřej Studeník

Ve spolupráci Ústavu matematiky, informatiky a kybernetiky a Ústavu chemického inženýrství je vyvíjen unikátní řešič umožňující simulaci unášení nepravidelných částic tekutinou, včetně interakcí mezi částicemi a částic se stěnami systému. Vyvíjený řešič je nadstavba otevřené C ++ knihovny OpenFOAM zaměřené na výpočetní dynamiku tekutin (CFD) a rozšiřuje jí o implementaci metody vnořené hranice a metody diskrétních elementů (DEM) umožňující simulaci pohyblivé pevné fáze. Vzniklý CFD-DEM řešič je schopen popisu zmíněných systémů až do 10 000 částic, kdy je pro každou částici vyhodnocena interakce s okolní tekutinou i případný kontakt s jinou částicí nebo hranicí systému. Aby bylo možné využít aplikační potenciál nového CFD-DEM řešiče, je nutné ověřit správnost globální bilance, tedy zákony zachování. V této práci, prezentuji vývoj nástroje, který umožňuje analýzu průběhu simulace na základě načtení výpisu CFD-DEM řešiče. Načtená data jsou uspořádána dle času a individuálních částic a zpracována. Toto umožňuje verifikovat přesnost globální bilance a případně identifikovat nedostatky ve stávající implementaci CFD-DEM řešiče. Hlavním výsledkem této práce je automatizace třídění načtených dat a výpočet globální bilance energie těles s bližším pohledem na výpočet energie kontaktu.



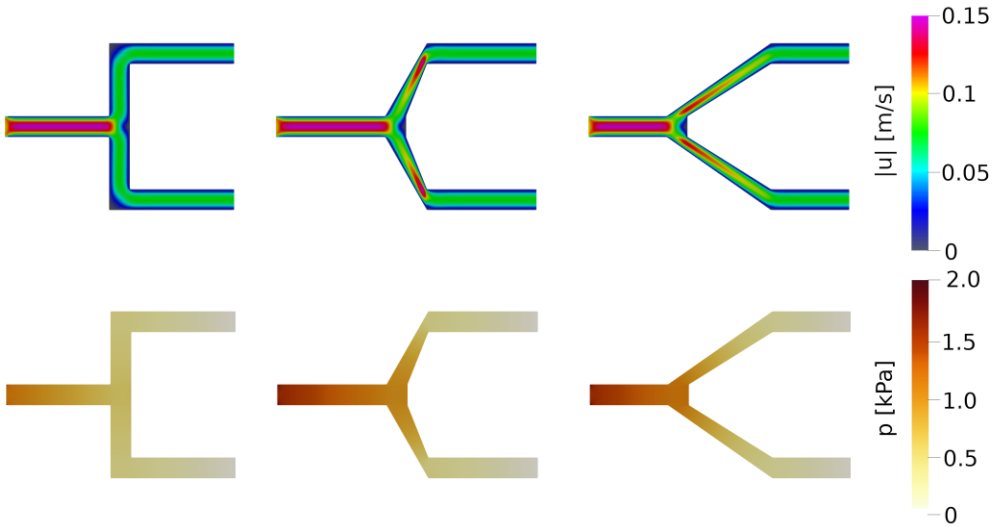
Příprava výpočetního prostředí pro topologickou optimalizaci mikrofluidního čipu

Ivana Havlenová (B2)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Automatická optimalizace designu je klíčovým krokem při navrhování moderních zařízení s optimálními vlastnostmi. Jedním z takových zařízení jsou mikrofluidní čipy, které nacházejí stále větší uplatnění v průmyslu i medicíně, mimo jiné pro rychlou analýzu malého množství kapalin jako tzv. lab-on-chip. Cílem této práce je tvorba výpočetního prostředí, které umožní automatickou a robustní topologickou optimalizaci mikrofluidního čipu. Vlastnosti čipu se při optimalizaci vyhodnocují pomocí metody výpočetní dynamiky tekutin (CFD), kde se všechny kroky řešení od generace výpočetní sítě přes spuštění a kontrolu numerické simulace až po zpracování výsledků provádějí automaticky na základě scriptů v pythonu. Vývoj prostředí he hlavním předmětem práce. Dosažené výsledky prezentujeme na rozměrové optimalizaci mikrofluidního rozdělovače, kde je kritériem optimality minimalizace tlakové ztráty. Na tomto optimalizačním problému je testováno chování prostředí s využitím různých optimalizačních algoritmů.

Ukázka aplikace vyvíjeného prostředí



Vývoj navigačního systému pro kontrolu a řízení trajektorie rakety

Bc. Hana Josífková (M1)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Teorie řízení má široké spektrum aplikací od jednoduchého kontrolování hladiny v nádrži až po sofistikované systémy, mezi které patří například řízení auta bez řidiče, udržování ideálních podmínek v reaktoru či právě navigační systémy. Raketu s vlastním navigačním systémem, která je schopna se zorientovat pouze pomocí základních informací integrovaných přímo v ní, je poté daleko snazší řídit a dostat na požadované místo dopadu. Implementace simulačního programu pro odhad trajektorie letu rakety je realizována v jazyce Python. Samotný nagivační systém pro čip rakety je vytvářen v C++.

Voice Pathology Detection

Bc. Jan Michna (M2)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

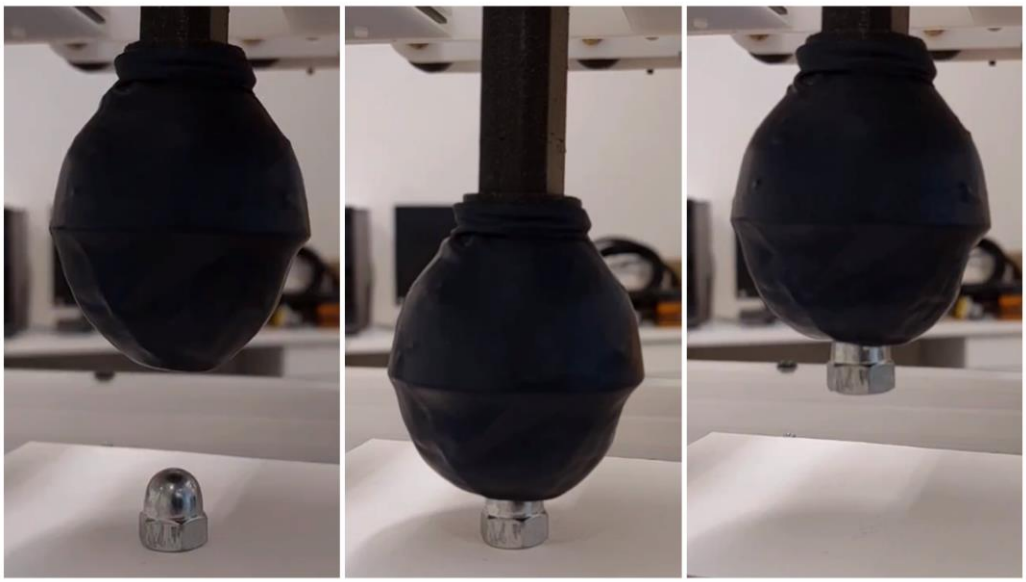
Voice disorders detection nowadays relies on either very subjective doctor testing on expensive and uncomfortable surgery neither of which are optimal for screening and early disorder detection. Due to the huge improvement of computing possibilities as well as artificial intelligence and especially deep learning and convolutional neural networks a new method has presented itself in voice recording analysis. My work aims at developing an accurate method at detecting voice disorders as a result of numerous diseases. The method developed will be implementable into a mobile application available to the public thus aiding the medical facilities as well as offering significantly cheaper and more accurate results to the patients.

Návrh a konstrukce Pellobota pro manipulaci s drobnými objekty

Bc. Eliška Paulíková (M1)

Školitel: doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Manuální práce prováděná v laboratoři, jako je pipetování nebo přesun různých objektů z jednoho experimentu do druhého, může potenciálně zahrnovat značnou míru lidské chybovosti, kterou je těžké zcela eliminovat. Nejúčinnějším způsobem, jak tomuto riziku předcházet, je robotizace. V rámci předložené práce byl znovu uveden do provozu téměř deset let starý pipetovací robot Evobot, u kterého byla provedena nutná optimalizace softwaru. Evobot je založený na modulární robotice umožňující využívat rozhraní plug'n'play. Každý z pipetovacích modulů komunikuje díky plošným spojům (PCB), které ovládají krokové motory v jednotlivých modulech pomocí SPI komunikace. Řídící jednotkou je Arduino s rozšiřující deskou Ramps 1.4. Jeden z cílů této práce je vytvořit chapadlo pro manipulaci s drobnými objekty, s touto nadstavbou přichází i nový název Pellobot. Pro tento účel je nezbytné navrhnout a vytvořit model pomocí 3D tisku. Vytištěné objekty jsou poté umístěny do jednoho z původních pipetovacích modulů. V chapadle následně dochází k vytvoření vakua pomocí peristaltického čerpadla, které tvaruje spodní část chapadla podle tvaru přenášeného objektu, čímž umožní s daným objektem manipulovat.



Detekce poruch hlasu ze zvukových nahrávek

Bc. Jakub Seiner (M1)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Tento příspěvek pojednává o inovativním přístupu k využití adaptivních metod detekce novosti v oblasti zdravotnictví, a to konkrétně při analýze záznamu hlasu pacientů trpících hlasovou dysfunkcí. Detekce novosti sama o sobě již ve zdravotnictví své místo má, jako příklad lze uvést detekci demence nebo Alzheimerovy choroby z EEG signálu. Oba zmíněné příklady se vyznačují vysokou selektivitou a lze tedy předpokládat že i v problematice hlasových poruch může detekce novosti být vhodným řešením. V případě prokázání funkčnosti a vývoji vhodného softwaru pro automatickou diagnostiku těchto onemocnění by došlo ke sjednocení výsledků a vedlo ke kvalitnější léčbě. Doposud diagnostika využívala zejména experty, specializující se na tento typ onemocnění, kteří museli strávit podstatnou část svého studia a praxe, analýzou zasažených pacientů, což ale při vyhodnocování vede k subjektivnímu hodnocení. To by se v případě úspěchu mohlo stát minulostí a mělo by za následek snížení nároků na odbornost a tím i rozšíření kvalitnější péče.

Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika II

MÍSTO: A40

KOMISE

Ing. Jan Vrba, Ph.D. (předseda)

Ing. Jakub Steinbach

Mario Vazdar, Ph.D.

Ing. Jan Čedík (EATON)

Ing. Lenka Skuhrovcová (ORLEN Unipetrol)

Ing. Michal Hájek / Ing. Jan Herbst (SIDAT)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 Bc. Jakub Hanzl (M2, doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.)

Automatizace a řízení HW pro laboratoř spektrální analýzy

08:50 Bc. Lukáš Hospodár (M2, Mgr. Markéta Zikmundová, Ph.D.)

Analýza demograficko-ekonomických vlivů na potenciál produktu na trhu

09:10 Bc. Martin Jež (M2, doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.)

Implementace grafického uživatelského rozhraní ve vestavných systémech

09:30 Bc. Lukáš Marek (M2, Ing. Jan Kohout, Ph.D.)

Analýza biomedicínských dat

09:50 Bc. Daniel Martynek (M2, prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.)

Interaktivní analýza záznamů biomedicínské databáze

10:10 Bc. Alexandra Molčanová (M2, prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.)

Zpracování pohybových dat s využitím mobilních sensorů

10:30 Bc. Matej Ružička (M2, doc. Ing. Radoslav Paulen, Ph.D.)

Modelovanie procesu doprednej osmózy pomocou experimentálnych dát

vyhlášení výsledků

Automatizace a řízení HW pro laboratoř spektrální analýzy

Bc. Jakub Hanzl (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Automatizace je pojem, který je významným tématem neposledních pár let. Umožňuje nám řešit rutinní postupy a tak šetřit čas, pracovní sílu a s tím související náklady. Automatizace ovšem není tématem jen průmyslového sektoru, ale své zastoupení najde i ve výzkumných činnostech, kde může zastávat neméně důležitou roli. Práce si klade za úkol zprostředkování komunikace vybraných přístrojů s řídícím SW a vývoj aplikace, konkrétně grafického uživatelského rozhraní. Tato aplikace má za úkol zpřehlednit a zjednodušit zadávání vstupních parametrů jednotlivých přístrojů namísto stávajících SW dodávaných od výrobců. Dále pak možnost provádět plně autonomně rutinní metody měření v rámci laboratoře s čímž souvisí i případné předávání dat mezi jednotlivými přístroji. V poslední řadě bude uživatel schopen v aplikaci zpracovat naměřená data z jednotlivých přístrojů. Aplikace je vyvíjena v prostředí Matlab za použití vyšší úrovně programování a to prostřednictvím DLL, které jsou součástí SDK modulů právě pro vývoj. Cílem je ulevit pracovníkům laboratoře po stránce časové náročnosti měření, tak aby se mohli plně věnovat aktivní části výzkumné činnosti za podmínky, že bude zaručena stejná kvalita výstupů z aplikace jako u dodávaných SW.

Analýza demograficko-ekonomických vlivů na potenciál produktu na trhu

Bc. Lukáš Hospodár (M2)

Školitel: Mgr. Markéta Zikmundová, Ph.D.

V dnešnej dobe sa v priemyselnej praxi kladie veľký dôraz nielen na podmienky a možnosti výroby chemicko-potravinárskeho produktu ako takého, ale aj na zbieranie dát o správaní sa výrobku a o jeho spotrebiteľoch na konkurenčnom trhu. Výzvou už zväčša nie je zbierať a uchovávať dáta, ale vhodne ich spájať, interpretovať a použiť pre strategické rozhodnutia podniku. Táto práca sa zaoberá práve vytvorením databázy dát z rôznych zdrojov, jej analýzou a interpretáciou výsledkov ako prínosu pre výrobcu produktu. Analýza tohto typu hľadá dosiaľ možný nepokrytý potenciál rozvoja odbytu pre produkty výrobcu. Cieľom práce je vytvoriť a analyzovať komplexnú sadu dát hovoriacich o výrobku. Práca sa postupne zaoberá hľadaním a spájaním kvalitatívnych a kvantitatívnych faktorov o výrobku v kombinácii s demograficko-ekonomickými ukazateľmi o zákazníkoch. Následne ich unifikáciou a očistením o náhodné tendencie a vyvodením odporúčaní na základe požiadavku zadávateľa pri využití matematických postupov a metód. V záverečnom výstupe táto práca využíva prostredie analytického grafického užívateľského rozhrania Power BI. Najpopulárnejším rozhraním pre konečných užívateľov sú programy spoločnosti Microsoft, ktoré s každou ďalšou generáciou prinášajú nové možnosti využitia.

Implementace grafického uživatelského rozhraní ve vestavných systémech

Bc. Martin Jež (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Vestavné systémy, tedy veškerá zařízení, která mají v sobě počítač, nás v dnešním světě obklopují na každém kroku. Od mobilních telefonů, přes ledničky po žehličky. Současný vývoj technologií vestavných systémů je analyzován v kontextu současných inovací ve smyslu průmyslu 4.0. Technická implementace konceptů jako například *Internet of Things* nebo *Cloud Networking* vyžaduje značnou výpočetní sílu hardwaru, který je v dnešní době překvapivě cenově dostupný, mimojiné díky popularitě smartphonů.Cílem mé práce je vývoj moderních vestavných systémů za užití toolchainu Yocto se zvláštním zřetelem pro grafická uživatelská rozhraní implementovaná v jazyce C/C++.

Analýza biomedicínských dat

Bc. Lukáš Marek (M2)

Školitel: Ing. Jan Kohout, Ph.D.

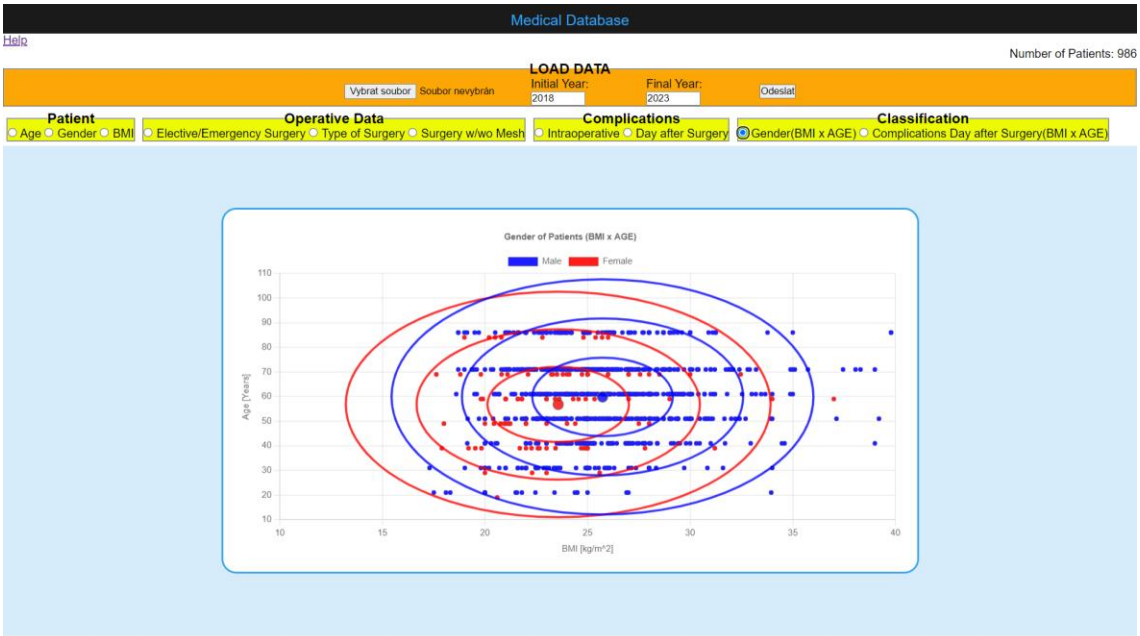
V této práci zpracováváme obličejová data zdravých pacientů za účelem nalezení vztahu mezi *věkem* a *pohyby mimického svalstva* v průběhu vykonávání standardních obličejových cviků (mračení, úsměv a jiné). Tento vztah nám umožní lépe pochopit obecný vliv stárnutí na schopnost projevovat mimické výrazy. Zároveň jej lze použít k filtraci vlivu stárnutí (tzv. odstranění baseline) a tím nám umožní lépe modelovat poruchy v mimice, které jsou dány jinými vlivy, jako je například částečná paréza obličeje. Data, která analyzujeme, jsou představena ve formě časových řad, což nám umožňuje detailně sledovat dynamiku mimických výrazů v čase. Na tato data nahlížíme dvěma způsoby. Prvním je funkcionální přístup, kdy nahlížíme na data jako na funkce a tím druhým je přístup topologický, pomocí kterého studujeme obecný tvar dat a jak se tento tvar mění v průběhu cviku. Kombinace těchto přístupů nám pak dovoluje robustněji modelovat výše zmíněný vztah.

Interaktivní analýza záznamů biomedicínské databáze

Bc. Daniel Martynek (M2)

Školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Kýlní operace představují běžný, avšak komplexní aspekt chirurgické praxe, vyžadující pečlivou analýzu pro informovaná rozhodnutí. Tato práce představuje řešení, které kombinuje integraci Evropské databáze kýlních operací s interaktivní webovou a desktopovou aplikací pro offlinové a online použití.S využitím programovacího jazyka Python a Tk interface, jsme vytvořili desktopovou část projektu s důrazem na uživatelsky přívětivé rozhraní. Zároveň jsme rozšířili naše řešení vytvořením webové aplikace s využitím frameworku Django k vytvoření backendu. Pro vytvoření frontendu jsme použili HTML a Javascript v kombinaci s CSS. Tato řešení umožňují přehlednou vizualizaci dat z Evropské databáze. Prezentace se zaměří na klíčové aspekty implementace, včetně procesu zpracování a filtrace dat z Evropské databáze, návrhu uživatelského rozhraní a implementace bezpečnostních opatření.Cílem projektu je poskytnout lékařům a výzkumníkům snadný a efektivní přístup k relevantním informacím o kýlních operacích.



Zpracování pohybových dat s využitím mobilních sensorů

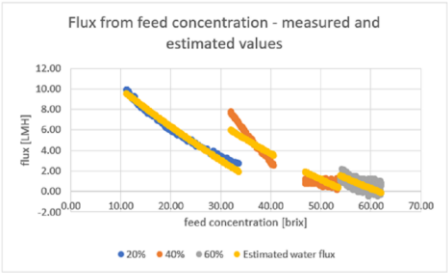
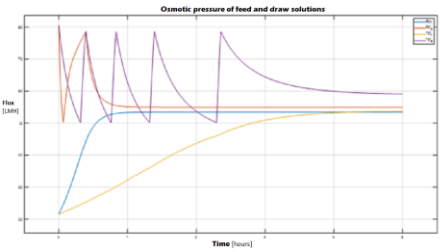
Bc. Alexandra Molčanová (M2)

Školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Prvé využitie senzorov v biomedicínskych aplikáciách bolo zaznamenané už v 20. storočí, pričom ich využitie sa postupne rozvíjalo a inovovalo až do dnešnej doby. Dnes sú už neoddeliteľnou súčasťou medicínskych postupov, ktoré si nevieme predstaviť bez využitia prostriedkov ako je záznam EKG alebo EEG. Rapídny progres vo vývoji senzorov spolu s prostriedkami analýzy dát umožňujú zaviesť nové postupy do diagnostiky, monitorovania a rehabilitácie pacientov. Akcelerometre, gyroskopy, senzory pulzu alebo polohy vieme každý z nás jednoducho použiť na záznam dát prostredníctvom smartfónov alebo chytrých hodiniek.V našej práci zaznamenávame akcelerometrické a pozičné dáta u detských pacientov pomocou smartfónu v mobilnej aplikácii Matlab. Navrhli sme metodiku pre analýzu symetrie chôdze u detí rôzneho veku, pohlavia a zdravotného stavu za použitia diskrétnej Fourierovej transformácie a štatistických metód. Na základe toho sme vytvorili algoritmus na spracovanie zaznamenaných dát implementovaný v mobilnej aplikácii Matlab, aby bolo možné vyhodnotiť predbežné výsledky merania bezprostredne po uskutočnení záznamu dát. Naša práca má potenciál poskytnúť cenné informácie pre lepšiu diagnostiku a rehabilitáciu detských pacientov, a tak prispieť k zlepšeniu kvality poskytovanej liečby.

Modelovanie procesu doprednej osmózy pomocou experimentálnych dát

Bc. Matej Ružička (M2)

Školitel: doc. Ing. Radoslav Paulen, Ph.D.

Dopredná osmóza (FO) je v porovnaní s reverznou osmózou (RO) technologicky menej často využívaným procesom pre transport vody, je však jej vhodným doplnkom. Podobne ako reverzná osmóza tak aj dopredná sa využíva v oblasti získavania čistej vody – najmä v podmienkach, pri ktorých samotná RO nedokáže byť aplikovaná. Našim cieľom je proces optimalizovať, preto je potrebné poznať jeho model. Pretože prostredníctvom vytvorenia modelu sme schopní proces simulovať a tým zisťovať jeho dynamiku, správanie sa pri rôznych podmienkach, pozorovať zmeny spojené s iným nastavením, vplyv vstupov na výstupy, atď. Nami vytvorený model simuluje reálny FO proces pri vsádzkovom a taktiež aj pri spojitom zapojení. Pre účely firmy Aquaporin A/S sme porovnali konkrétne návrhy FO procesu (konkrétne varianty nastavenia vstupov, parametrov a počiatočných podmienok) pre využitie na zakoncentrovanie pomarančového džúsu na požadovanú výslednú koncentráciu. Obr 1. Graf závislosti nameraných hodnôt intenzity toku od koncentrácie vstupujúceho produktu pre tri rôzne koncentrované odťahové roztoky (20%, 40% a 60%) . Na základe týchto dát sme sa následne dopracovali ku kvadratickému modelu (žltý graf). Obr. 2. Grafy zobrazujúce vplyv pridania membrán na osmotický tlak odťahového a produktového roztoku.