

Seznam sekcí a složení komisí

Sekce:	Analytická chemie I. posluchárna A105, 8:30
Komise:	
Předseda:	doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.
Členové:	Mgr. Alla Synytsya, Ph.D. Ing. Patrik Kania, Ph.D. RNDr. František Kesner, Ph.D. (NICOLET CZ)
Soutěžící:	Fagan Patrik Grafová Lucie Hegrová Martina Loula Martin Marková Silvie Pospíchalová Jana Švejcarová Soňa
Sekce:	Analytická chemie II. místnost A238, 8:30
Komise:	
Předseda:	doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.
Členové:	Ing. Vadym Prokopec, Ph.D. Mgr. Iryna Goncharova, Ph.D. Mgr. Filip Dvořák (P-Lab)
Soutěžící:	Bc. Brožáková Kateřina Bc. Čičvak Marek Bc. Grygoryeva Kateřina Bc. Hrubá Lucie Bc. Jenišťová Adéla Bc. Schimmerová Renata Bc. Švecová Marie
Sekce:	Analytická chemie III. posluchárna A21, 8:30
Komise:	
Předseda:	doc. RNDr. Dr. David Sýkora
Členové:	Ing. Oldřich Vyhnálek, CSc. Ing. Magda Vosmanská, CSc.
Soutěžící:	Bc. Benediktová Kristýna Bc. Cinková Petra Bc. Mašek Jindřich Bc. Matějka Jiří Bc. Sedláček Jakub Bc. Šimek Matěj

Sekce: **Fyzikální chemie I.
místnost A135, 9:00**

Komise:

Předseda: prof. Dr. Ing. Pavel Matějka

Členové: Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.
Ing. Kryštof Pilnáček

Soutěžící: Jan Blažek
Veronika Jurásková
Jakub Kubečka
Václav Pokorný
Štěpán Sršeň
Ondřej Šrom

Sekce: **Fyzikální chemie II.
místnost A125, 9:00**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Ivan Cibulka, CSc.

Členové: Ing. Daniel Ondo, Ph.D.
Ing. Martin Klajmon

Soutěžící: Bc. Petr Číhal
Bc. Žofie Hádková
Bc. Kristýna Kantnerová
Bc. Miroslav Kludský
Bc. Maja Matoušová
Bc. Aigerim Mustafina
Bc. Kateřina Slabá

Sekce: **Fyzikální chemie III.
posluchárna C13, 9:00**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Pavel Chuchvalec, CSc.

Členové: Mgr. Jan Heyda, Ph.D.
Ing. Ondřej Svoboda

Soutěžící: Bc. Tomáš Belloň
Bc. Tomáš Martinek
Bc. Jakub Med
Bc. Vladimír Palivec
Bc. Martin Pospíšil
Bc. Daniela Šmídová

Sekce: **Fyzikální chemie IV.
místnost A402, 9:00**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Karel Friess, Ph.D.

Členové: Ing. Michal Bureš, CSc.

Ing. Daniel Hollas

Soutěžící:

Bc. Michal Bezek

Bc. Jan Chalabala

Bc. Jakub Polák

Bc. Václav Radoň

Bc. Martina Rubešová

Bc. Vít Svoboda

Sekce: **Chemical engineering I.
posluchárna B139, 8:30**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Členové: Ing. Zdeněk Grof, Ph.D.

Ing. Libor Labík

Ing. Josef Chmelař

Ing. František Plát, Ph.D. (Škoda Auto)

Ing. Martin Hubička, Ph.D. (Lovochemie)

Ing. Jaroslav Haluza (Macco Organiques)

Soutěžící:

Viktorie Čermochová

Jan Haša

Bc. Simon Jantač

Bc. Dickson Daniel Owusu Kofi

Bc. Inês Mendonca

Bc. Giulia Nannetti

Bc. Matěj Novák

Bc. Marek Šoltys

Bc. Marek Václavík

Jan Vávra

Sekce:	Chemické inženýrství II. posluchárna K3, 8:30
Komise:	
Předseda:	doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha
Členové:	Ing. Petr Kočí, Ph.D. Ing. Jaroslav Kotowski Ing. Nina Sarvašová Ing. Jan Nájemník, CSc. (Momentive Specialty) Mgr. Markéta Reidingerová (Medicem)
Soutěžící:	Bc. Jan Březina Tereza Herinková Denisa Lizoňová To Quyen Nguyenová Bc. Adam Rygl Milan Solík Bc. Helena Suchanová Marie Vyhlídková
Sekce:	Chemické inženýrství III. posluchárna B03, 8:30
Komise:	
Předseda:	prof. RNDr. Drahoslava Janovská, CSc.
Členové:	Ing. Lukáš Valenz, Ph.D. Ing. Alexandr Zubov, Ph.D. Ing. Tomáš Jindra, PhD. (Pure Bohemia) Ing. Lucie Dolejší (Chemoprojekt Nitrogen) Ing. Martin Růžička (Unipetrol)
Soutěžící:	Michal Janda Bc. Elvíra Khafizová Jiří Kolář Petr Kovář Bc. Patrik Schneider Peter Ševčenko Anna Zítková Bc. Martina Živčáková

Sekce: **Chemické inženýrství IV.
posluchárna BIII, 8:30**

Komise:

Předseda: prof. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

Členové: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Ing. Michal Vonka

Ing. Pavel Beránek

Ing. Jiří Dohnal (Zentiva)

Dr. Ing. Juraj Kilián (Mondi)

Soutěžící: Bc. Jakub Dvořák

Kateřina Ježková

Iveta Kršková

Pavel Kupka

Patrik Labík

Marie Prajzlerová

Bc. Alexandr Romanov

Bc. Ivo Šnajdr

Sekce: **Chemické inženýrství V.
místnost B141b, 8:30**

Komise:

Předseda: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Členové: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Ing. Michal Dudák

Ing. Jiří Vrána

Ing. Jan Hronza, Ph.D. (Ricardo)

Ing. Václav Křepáček (Česká rafinérská)

Ing. Zuzana Nováková (Silon)

Soutěžící: Aleš Ďurič

Bc. Damián Gorný

Bc. Kateřina Haškovcová

Vojtěch Klimša

Lenka Krajáková

Bc. Eva Roučková

Matěj Slaviček

Bc. Viktor Vodrážka

Sekce: **Podnikový management a marketing
posluchárna C11, 8:00**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Členové: Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Ing. Stanislav Kubeš

Soutěžící:

Bc. Blažek Radim

Bc. Černá Petra

Bc. Dubský Václav

Bc. Gregorová Anežka

Bc. Kavalír Martin

Bc. Kohlová Jana

Bc. Müllerová Tereza

Bc. Navrátil Vít

Bc. Pospíšilová Lucie

Bc. Souček Michal

Bc. Živec Josef

Sekce: **Fyzika a měřicí technika
místnost B220, 9:00**

Komise:

Předseda: doc. Dr. Ing. Martin Vršata

Členové: doc. RNDr. Jaroslav Julák, CSc. (1. LF UK)

RNDr. Pavel Galář

Mgr. Tomáš Kotrba

Dr. Mgr. Jana Jirešová

Soutěžící:

Lucie Čtvrtečková

Pavel Hozák

Andrea Hujacová

Tereza Kordová

Michaela Švarcová

Jana Kučerová

Petra Vaňková

Sekce: **Inženýrská informatika a řízení procesů
posluchárna**

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jan Náhlík, CSc.

Členové: Ing. Darina Bártová, Ph.D.

RNDr. Pavel Cejnar

Ing. Jana Finkeová, CSc.

Soutěžící:

Bc. Dolejšek Michal

Jůzl Jakub

Kletečka Michal

Matonoha Tomáš

Bc. Polák Ondřej

Šíma Michal

Zuntová Klára

Sekce: **Analytická chemie I.**
posluchárna A105, 8:30

Komise:

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

Členové: Mgr. Alla Synytsya, Ph.D.
Ing. Patrik Kania, Ph.D.
RNDr. František Kesner, Ph.D. (NICOLET CZ)

Soutěžící:

Fagan Patrik
Grafová Lucie
Hegrová Martina
Loula Martin
Marková Silvie
Pospíchalová Jana
Švejcarová Soňa

Sponzoři sekce Analytická chemie I:



OLYMPUS

Your Vision, Our Future



lach:ner

MANEKO
LABORATORNÍ POTŘEBY A TECHNIKA



SIGMA-ALDRICH

tevak
LEYBOLD V ČR A SR



Partner sekce Analytická chemie I:



Sekce : Analytická chemie I

Studium chiroptických vlastností reálných vzorků kokainu

Autor: Patrik Fagan
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.

S rozvojem užívání drog se stále častěji objevuje trend výrobců a dealerů těchto látek je ředit a maskovat novými způsoby a tím tak znesnadnit jejich identifikaci. V běžné kriminalistické praxi se nejčastěji k analýze drog využívá vysokoúčinné kapalinové (HPLC) a plynové chromatografie (GC) ve spojení s hmotnostně spektrometrickou (MS) detekcí. V reálných vzorcích bývá nejen snížený obsah účinné látky, ale bývají v nich také přítomny adulteranty. Jsou-li tyto látky chirální, lze projevy jejich optické aktivity sledovat metodami chiroptické spektroskopie.

V této práci byla využita spektroskopie vibračního (VCD) a elektronového cirkulárního dichroismu (ECD) společně s infračervenou (IR) spektroskopií k analýze reálných vzorků kokainu. Naměřená spektra vzorků byla porovnána se spektry čistého kokainu. Z výsledků vyplývá, že v reálných vzorcích byl snížený obsah účinné látky, což bylo potvrzeno porovnáním s výsledky získanými metodou GC-MS. Zároveň byly sledovány projevy adulterantů v těchto spektrech. Přítomnost rozpustných adulterantů byla zaznamenána v IR spektrech a v případech, že vykazovaly optickou aktivitu, byly sledovány také změny ve spektrech VCD.

Sekce : Analytická chemie I

Změny ve struktuře a vlastnostech bílkovin krevního séra vlivem oxidačního stresu

Autor: Lucie Grafová
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Mgr. Iryna Goncharova, Ph.D.

Oxidační stres je stav, kdy dochází k porušení rovnováhy mezi účinkem volných radikálů a ochrannými mechanismy v organismu. Převaha tvorby volných radikálů způsobí oxidaci biologicky významných molekul a to ve svém důsledku vede k poškození tkání a vzniku nemocí jako je ateroskleróza, Parkinsonova choroba nebo syndrom chronické únavy.

Následkem oxidačního stresu vznikají u savců specificky modifikované bílkoviny, jež se liší od své přírodní formy jak strukturou, tak i funkcí. Metodami analytické chemie je možné oxidačně-modifikované bílkoviny detekovat a využít je jako potenciální markery oxidačního stresu a tím včas odhalit rozvíjející se nemoci.

Cílem této práce je s využitím metody elektronového cirkulárního dichroismu (ECD) charakterizovat změny ve struktuře bílkovin krevního séra (albumin, α -, β -, a γ -globuliny, hemoglobin a lysozym) a změny jejich vazebných vlastností působením různých druhů oxidačních činidel (NO_2 , H_2O_2 , HOCl a organických peroxidů). Získané výsledky pro jednotlivé bílkoviny byly porovnány s výsledky působení oxidantů v reálném lidském, hovězím a králičím krevním séru.

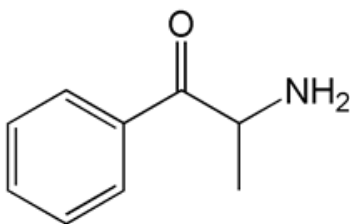
Sekce : Analytická chemie I

Separace kathinonů kapilární elektroforézou pomocí cyklodextrinů

Autor: Martina Hegrová
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.

Kathinon (obr. 1) je látka přírodního původu, který byl objeven v keři kata jedlá (*Catha edulis*). Látka je ve vysoké koncentraci přítomna pouze v čerstvých částech rostliny. Kathinon je β -keto analog amfetaminu a má obdobné psycho-stimulační účinky. Při hledání látek majících silnější účinky než samotný kathinon byla připravena řada jeho derivátů ve formě racemátů. Pro charakterizaci těchto nově syntetizovaných látek z hlediska čistoty i případného různého zastoupení jednotlivých enantiomerů lze s výhodou využít kapilární elektroforézu s přidavkem chirálního selektoru do základního elektrolytu.

Tato práce se zabývá analýzou šesti derivátů kathinonu, které dosud nebyly chirálně separovány. Analýza byla prováděna na kapilární elektroforéze se základním elektrolytem tvořeným fosfátovým pufrům o pH 2,5. Byl studován vliv chirálních selektorů (β -cyklodextrinu, karboxymethylovaného β -cyklodextrinu a sulfatovaného β -cyklodextrinu) na enantioseparace.



Obr. 1. Struktura kathinonu

Sekce : Analytická chemie I

Stanovení thallia v řepce oleje

Autor: Martin Loula
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: prof. Ing. Oto Mestek, CSc.

Řepka olejka dokáže v nadzemních částech rostliny akumulovat toxické thallium v relativně vysokých koncentracích. Existují obavy, že při velkém využití řepkového oleje v potravinářství může docházet ke zvýšení jeho příjmu z potravy.

Prvním cílem této práce bylo ověřit metodu hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem pro stanovení stopových množství thallia. Dalším cílem bylo stanovit obsah thallia v semenech řepky a v odtučněném řepkovém šrotu a bilancí zjistit jeho případný přestup do oleje. První pokusy provedené se semeny odrůdy řepky SY Cassidy pěstované v oblasti Humpolce naznačují, že k přechodu thallia do oleje nedochází.

Sekce : Analytická chemie I

Využití ATR spektroskopie k analýze vlasů

Autor: Silvie Marková
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Mgr. Iryna Goncharová, Ph.D.

Průměrný zdravý jedinec ztratí denně okolo 75 – 100 vlasů. Vlasy ulpívají na místech, kde se člověk pohyboval, ale dokonce i na osobách, se kterými přišel do styku. To z nich dělá spolu se skutečností, že jsou vlasy díky svému složení odolné vůči vlivům prostředí, jednu z nejpoužívanějších biologických stop při vyšetřování trestných činů.

Během růstu vlasu se do jeho struktury ukládají informace o užívaných lécích, drogách, o podstupovaných kosmetických procedurách a tak se z něj stává jakási osobní karta jeho nositele. Nejčastější metodou ve forenzní analýze vlasů byla analýza DNA, ale vzhledem k malému množství vzorku, byla úspěšnost metody kolem 25 %. V poslední době se mění přístup k analýze vlasů jako biologické stopy - pomocí dnes dostupných nedestruktivních metod již lze určit pohlaví původce, jeho příslušnost k etnické skupině, dokonce i krevní skupinu.

Představená práce se zaměřuje na nedestruktivní analýzu vlasů pomocí ATR spektroskopie. Během práce se analyzovaly rozdíly ve struktuře nejen hlavní stavební bílkoviny (keratinu) ale i charakteristického barviva (melaninu) ve vzorcích vlasů příslušníků několika etnických skupin. Dále byly v práci sledovány změny struktury vlasu následkem různých typů denaturací, jako je barvení, tepelná nebo chemická denaturace.

Sekce : Analytická chemie I

Studium samoasociátů bilirubinu pro vývoj disoluční léčby cholelithiázy

Autor: Jana Pospíchalová
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Mgr. Iryna Goncharová, Ph.D.

Přítomnost žlučových kamenů ve žlučníku (cholelithiáza) patří k velmi častým onemocněním a v průmyslově rozvinutých zemích na ně trpí až 20 % populace. Hlavní rizikem této nemoci je, že při pohybu může kamínek poškodit stěnu žlučníku (způsobují 95 % akutních zánětů žlučníku). Žlučové kamínky mohou také úplně ucpat žlučové cesty a způsobit poškození jater a zánět slinivky (pankreatitis). Podle složení se rozlišují dva hlavní typy kamenů: cholesterolové kameny (žlutohnědé kameny s vysokým obsahem cholesterolu) a pigmentové kameny (černé nebo hnědé barvy obsahující hlavně soli žlučových barviv). Podle posledních studií je zárodek každého typu kamínku tvořen samoasociáty žlučových barviv na matici z bakteriálních bílkovin anebo glykoproteinů (mucin). Aktuálním problémem je vývoj neinvazivní disoluční léčby - rozpuštění kamenů. V současné době je tento typ léčby používán k odstranění cholesterolových kamenů, avšak není účinný pro pigmentové kameny. Představená práce se zaměřuje na přípravu modelové žluči s vysokým indexem saturace cholesterolem, charakterizaci a následně krystalizaci s nekonjugovanými žlučovými barvivy. Výsledky krystalizace byly porovnány se systémy s přísadkami žlučových barviv a mucinu. Přítomnost, druh a množství konkrementů bylo stanoveno vizuálně s pomocí mikroskopu. Vzniklé konkrementy byly analyzovány pomocí ATR spektroskopie a porovnány s výsledky analýzy reálných žlučových kamenů.

Sekce : Analytická chemie I

Stanovení výtěžku extrakce pseudoefedrin hydrochloridu z dostupných léků v závislosti na extrakčních podmínkách

Autor: Soňa Švejcarová
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. RNDr. Dr. David Sýkora

Česká republika je největším ilegálním producentem metamfetaminu v Evropě. V nelegálních laboratořích je metamfetamin vyráběn nejčastěji redukcí pseudoefedrinu za použití jódu a červeného fosforu v přítomnosti kyseliny fosforečné (tzv. českou metodou). Pseudoefedrin, jakožto hlavní prekurzor výroby, je získáván extrakcí z volně dostupných léčiv.

Cílem této práce je stanovit výtěžnost extrakce pseudoefedrin hydrochloridu z dostupných léčiv metodou vytřepání bazického vodného roztoku rozpuštěných tablet do toluenu a zpětné extrakce do okyselené vodné fáze. Výtěžek extrakce je sledován v závislosti na druhu použitého léčiva a na počtu extrakčních kroků.

Ke stanovení obsahu pseudoefedrinu v jednotlivých fázích po extrakci je použita kapalinová chromatografie s UV detektorem.

Sekce:	Analytická chemie II. místnost A238, 8:30
Komise:	
Předseda:	doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.
Členové:	Ing. Vadym Prokopec, Ph.D. Mgr. Iryna Goncharova, Ph.D. Mgr. Filip Dvořák (P-Lab)
Soutěžící:	Bc. Brožáková Kateřina Bc. Čičvak Marek Bc. Grygoryeva Kateřina Bc. Hrubá Lucie Bc. Jenišťová Adéla Bc. Schimmerová Renata Bc. Švecová Marie

Sponzoři sekce Analytická chemie II:



OLYMPUS

Your Vision, Our Future



lach:ner

MANEKO
LABORATORNÍ POTŘEBY A TECHNIKA



SIGMA-ALDRICH

tevak
LEYBOLD V ČR A SR



Partner sekce Analytická chemie II:



Sekce : Analytická chemie II

Spektrální analýza plicních tkání

Autor: Bc. Kateřina Brožáková
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Mgr. Alla Synytsya, Ph.D.

Spektroskopické metody, zejména metody vibrační spektroskopie, jsou jedny z nedestruktivních metod, které dovolují sledovat stav biologických tkání s minimálním zásahem do vzorku. Zároveň se považují za metody s velkým potenciálem při vyhledávání nových, neinvazivních, účinnějších a rychlejších přístupů v diagnostice různých typů onemocnění. Zhoubná nádorová onemocnění se řadí mezi nejrozšířenější a nejnebezpečnější onemocnění ve světě, s velmi vysokým počtem úmrtí. Nejčastějším nádorovým onemocněním je karcinom plic, kterým každoročně onemocní téměř dva miliony pacientů. Včasná diagnóza v počáteční fázi může výrazně zvýšit šanci na vyléčení a přežití.

Tato práce je věnována spektrální analýze plicních tkání, získaných od pacientů při endoskopickém vyšetření u lékaře. Vzorky zdravé tkáně a tkáně s patologickým nálezem, odebrané pro histologickou analýzu, byly paralelně proměřovány pomocí Ramanovy a infračervené spektroskopie. Spektra zdravých a nemocných tkání byla vzájemně porovnávána s cílem vyhledat charakteristické píky, které by mohly mít význam pro diagnostiku onemocnění. Z naměřených a vyhodnocených spekter je zřejmé, že metody vibrační spektroskopie mají budoucnost v diagnostice plicních karcinomů.

Sekce : Analytická chemie II

Rotační spektroskopie v analýze lidského pachu: studie kyseliny valerové

Autor: Bc. Marek Čičvak
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Ing. Patrik Kania, Ph.D.

Mnoho důležitých a zajímavých informací o lidském jedinci je generováno jeho pachovým profilem. Analýza lidského pachu má nezpochybnitelný význam v oblasti klinické diagnostiky, forenzní chemie či kriminalistiky. Kyselina valerová (pentanová) je jednou z klíčových molekul tvořících primární pach člověka.

Aplikace rotační spektroskopie pro precizní analýzu této pachové molekuly umožňuje získat cenné informace o geometrii molekuly, neboť velmi přesným spektroskopickým experimentem lze získat rotační konstanty, které jsou svázány s informacemi o délkách vazeb a vazebných úhlech.

Úspěšné naměření rotačních spekter kyseliny valerové může být odrazovým můstkem pro zcela nový přístup k analýzám pachové signatury člověka.

Sekce : Analytická chemie II

Fotochemie fenolu a jeho nitroderivátů v klastrech

Autor: Bc. Kateřina Grygoryeva
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.
Školitel: Mgr. Michal Fárník, Ph.D.

Kyselina dusitá, HNO_2 , je jednou z klíčových molekul v atmosférickou chemii, její původ v atmosféře však není zcela objasněn. Jedním z diskutovaných zdrojů HNO_2 jsou fotochemické reakce *o*-nitrofenolu. V této práci se zabýváme fotodisociací O-H vazby v molekule *o*-nitrofenolu, která je prvním krokem při tvorbě HNO_2 z *o*-nitrofenolu¹. Pro srovnání jsme analogické procesy studovali také u molekul *p*-nitrofenolu a fenolu.

Zaměřili jsme se zejména na vliv solvatace na sledované procesy. Za tímto účelem jsme vytvářeli různé molekulové klastry fenolu a jeho nitroderivátů. Pomocí metody „zobrazování rychlostních map“ byly získány distribuce rychlostí (resp. kinetických energií) vodíkových fragmentů vznikajících při fotodisociaci, experiment jsme dále doplnili o hmotnostně-spektrometrická měření. Získali jsme tak detailní experimentální poznatky na molekulové úrovni o fotochemii a solvataci fenolu a jeho nitroderivátů.

Reference:

[1] Bejan, I., et al., Phys. Chem. Chem. Phys., **8** (2006), 2028-2035.

Sekce : Analytická chemie II

Speciace jodu v živočišných tkáních

Autor: Bc. Lucie Hrubá
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Ing. Antonín Kaňa

Biologická dostupnost jodu závisí nejen na celkovém obsahu jodu, ale zejména na obsahu jednotlivých specií, proto byla tato práce zaměřena na provedení speciální analýzy jodu spojením vylučovací chromatografie a hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem. V předložené práci byly testovány různé mobilní fáze pro optimální separaci specií jodu. Jako nejlepší mobilní fáze byl vybrán 20 mmol.l^{-1} tris-(hydroxymethyl)-aminomethan o pH 7,5. Pro jednotlivé specie (thyroglobulin, albumin, jodičnan, jodid, trijodthyronin a thyroxin) byly stanoveny mez detekce, mez stanovitelnosti a výtěžnost chromatografické analýzy. Vyvinutá metodika byla aplikována na vzorky živočišných tkání. Ve vzorcích byly nalezeny jak nízkomolekulární, tak vysokomolekulární specie, z nichž thyroglobulin, albumin a jodid byly identifikovány na základě retenčních časů standardů.

Sekce : Analytická chemie II

Studium interakce stříbrných a zlatých nanočástic s modelovým vzorkem kůže

Autor: Bc. Adéla Jenišťová
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Léčivá působení stříbrných a zlatých nanočástic (AgNP, AuNP) jsou známá již z dob starověku. AgNP se vyznačují především svými antibakteriálními účinky, AuNP mají hlavně protizánětlivé vlastnosti. Také se uvažuje o využití AuNP při cíleném transportu léčiv do těla pacienta či k *in vivo* zaměřování nádorů povrchem zesílenou Ramanovou spektroskopií. Rovněž se vedou spekulace i o posílení penetračních vlastností kůže vlivem zmíněných nanočástic (NP). V této práci byla studována interakce kožních vrstev a masťového základu s přísadkou AgNP či AuNP v různém hmotnostním podílu infračervenou spektroskopií, konkrétně technikou zeslabeného totálního odrazu. Měřena byla spektra kůže samotné a ošetřené masťovým základem bez NP a s různým podílem NP. Kinetika interakce modifikovaných masťů s kůží byla sledovaná v průběhu dvou hodin s pětiminutovými intervaly mezi každým měřením. Získané série spekter byly vyhodnoceny vícerozměrnými statistickými metodami, čímž byly pozorovány spektrální změny u časově závislých spekter a odchylky v poměrech intenzit pásů. Vliv NP na penetrační vlastnosti pokožky jsou evidentní a budou podrobněji zkoumány pro systémy s farmaceuticky aktivními složkami i jinými potenciálními posilovací penetrace.

Sekce : Analytická chemie II

Chiroptická spektroskopie krevní plazmy v diagnostice karcinomu tlustého střeva

Autor: Bc. Renata Schimmerová
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.

Kolorektální karcinom patří mezi jedny z nejčastějších příčin úmrtí na nádorová onemocnění. Česká republika dosahuje v incidenci tohoto onemocnění statisticky jedno z předních míst. Vysoká úmrtnost je zapříčiněna především diagnostikou až pokročilých stádií. Nevýhodou současných metod diagnostiky (především screeningového testu okultního krvácení a koloskopie) je jejich relativně nízká spolehlivost, citlivost a nežádoucí invazivita v případě koloskopie. Snahou je tedy vyvinout metody spolehlivější, citlivější a méně invazivní.

Patologické procesy v průběhu onemocnění způsobují změny ve struktuře biomolekul, z nichž mnohé jsou chirální a tyto změny tedy zachytitelné vysoce citlivými metodami chiroptické spektroskopie. V této práci bylo využito metod elektronového cirkulárního dichroismu a Ramanovy optické aktivity doplněných o Ramanovu a infračervenou spektroskopii. Bylo analyzováno 24 vzorků krevní plazmy, z toho 14 vzorků od pacientů v různých stádiích nemoci, 7 kontrolních jedinců a 3 vzorky vyléčených pacientů. Vybrané spektrální pásy byly vyhodnoceny metodou lineární diskriminační analýzy, která klasifikovala vzorky na základě vztahu ke klinické diagnóze. Získané výsledky naznačují slibný potenciál výše uvedených metod v diagnostice tohoto onemocnění.

Sekce : Analytická chemie II

Studium flavonoidů metodami povrchem zesílené vibrační spektroskopie

Autor: Bc. Marie Švecová
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Flavonoidy, jež se řadí mezi sekundární metabolity, mají významné pozitivní účinky na lidské zdraví. Pomáhají svými antioxidačními, antibakteriálními, antivirovými, protizánětlivými a antialergickými účinky, svou úlohu hrají i v prevenci mozkových příhod a kardiovaskulárních onemocnění, slouží také jako inhibitory rakoviny. V rostlinách se vyskytují v nízkých koncentracích, a proto jsou k jejich studiu vhodné metody povrchem zesílené vibrační spektroskopie, tedy povrchem zesílený Ramanův rozptyl a povrchem zesílená infračervená absorpce, pro něž lze dosáhnout nízkých limitů detekce.

V této práci byly pro zesílení signálu využity hydrosoly především stříbra, dále i zlata a mědi. Nanočástice s analytem byly proměřovány a upravovány přidavkem chloridu draselného, centrifugací a redispergací. Ze spekter vyplývá různá orientace analytu k povrchu při koncentracích v rozsahu 10^{-3} – 10^{-9} mol/l. Jednotlivé serie byly zpracovány vícerozměrnými statistickými metodami, konkrétně analýzou hlavních komponent a regresí metodou nejmenších částečných čtverců, která umožnila vytvořit kalibrační modely.

Sekce: **Analytická chemie III.**
posluchárna A21, 8:30

Komise:

Předseda: doc. RNDr. Dr. David Sýkora

Členové: Ing. Oldřich Vyhnálek, CSc.
Ing. Magda Vosmanská, CSc.

Soutěžící: Bc. Benediktová Kristýna
Bc. Cinková Petra
Bc. Mašek Jindřich
Bc. Matějka Jiří
Bc. Sedláček Jakub
Bc. Šimek Matěj

Sponzoři sekce Analytická chemie III:



OLYMPUS

Your Vision, Our Future



lach:ner

MANEKO
LABORATORNÍ POTŘEBY A TECHNIKA



SIGMA-ALDRICH

tevak
LEYBOLD V ČR A SR



Partner sekce Analytická chemie III:



Sekce : Analytická chemie III

Porovnání techniky headspace a kapalného nástřiku v GC-MS při analýze lidského pachu

Autor: Bc. Kristýna Benediktová
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Jednou z oblastí zájmu současné vědy je zkoumání molekulového složení lidského pachu. Výsledky tohoto výzkumu mohou nalézt uplatnění například ve forenzních nebo lékařských vědách, v kosmetickém průmyslu, či při výcviku psů.

Hlavním cílem experimentu bylo zjistit, která z použitých technik plynové chromatografie se jeví jako vhodnější pro analýzu vzorků lidského pachu, druhotným cílem bylo porovnání molekulového složení pachu dobrovolnic.

Byly sledovány rozdíly mezi technikou headspace a kapalným nástřikem. Experimentu se zúčastnily tři dobrovolnice stejné věkové kategorie. Pachové vzorky se odebíraly z dlaní na teflonové válečky. Pomocí GC-MS analýzy byly nalezeny různé látky, které se dají zařadit do skupin podle typu: alkany, alkeny, alkoholy, aldehydy, estery, ketony, kyseliny a jiné.

Sekce : Analytická chemie III

Studium lidského pachu pomocí headspace GC-MS: porovnání skla a teflonu jako sorpčních materiálů

Autor: Bc. Petra Cinková
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Ing. Patrik Kania, Ph.D.

Pro studium lidského pachu je nezbytně nutný co nejkvalitnější odběr vzorků. Prozatímní postupy odběrů se liší co do výběru sorpčního materiálu, délky odběru vzorku a jeho následného zpracování.

Vzhledem k povaze látek obsažených v lidském pachu je možné využít jejich sorpce na různých materiálech.

V rámci experimentu byla porovnávána vhodnost dvou sorpčních materiálů (sklo, teflon) pro headspace GC-MS analýzu vzorků lidského pachu. Vzorky byly odebírány z dlaní deseti dobrovolníků (pět mužů, pět žen). Následnou GC-MS analýzou byla zjištěna přítomnost látek s různými funkčními skupinami (alkany, alkoholy, aldehydy, ketony, karboxylové kyseliny, estery a jiné).

Sekce : Analytická chemie III

Využití NMR a ECD ke studiu interakcí cyklodextrinů a Trögerovy báze

Autor: Bc. Mašek Jindřich
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka Ph.D.

Existence optických isomerů a studium chirálních interakcí jsou známy už od první poloviny 19. století. Znalost odlišných účinků jednotlivých enantiomerů látek, a to zejména v živých organismech, je hlavním důvodem, proč je dnes studium chirálních látek důležitou součástí chemického výzkumu. Mezi metody vhodné ke studiu chirálních látek a jejich interakcí patří nukleární magnetická resonance a metody cirkulárního dichroismu. Tyto dvě metody se ke studiu chirálních látek používají již několik desítek let, a to ke stanovení struktur chirálních komplexů a ke zjištění jejich konstant stability.

Tato práce si klade za cíl stanovit konstanty stability komplexů tvořených enantiomery Trögerovy báze s několika vybranými chirálními činidly ze skupiny cyklodextrinů. Experimenty byly prováděny použitím metod nukleární magnetické resonance a elektronového cirkulárního dichroismu ve vodném prostředí.

Sekce : Analytická chemie III

Využití destilační jednotky s kryogenním chlazením k zakoncentrování pachových vzorků

Autor: Bc. Jiří Matějka
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Člověk vylučuje řadu více či méně těkavých látek v závislosti na svém genetickém kódu, stravovacích návycích, stresu, nemocích, medikaci a stavu imunitního systému. Podle funkčních skupin se jedná o širokou škálu molekul, např. karboxylové kyseliny, alkoholy, aldehydy, uhlovodíky, estery, ketony, aminy nebo heterocyklické sloučeniny. Atraktivita výzkumu pachových molekul spočívá ve velké variabilitě složení lidského pachu. Někteří odborníci dokonce věří, že každý jedinec na světě je charakteristický svým pachem. Předpokládá se, že všichni lidé vylučují přibližně stejný soubor látek, avšak koncentrační poměry mezi jednotlivými látkami jsou pro každého jedince rozdílné.

Cílem předkládané práce je navrhnout a otestovat destilační jednotku s kryogenním chlazením sloužící k zakoncentrování vzorků lidského pachu. Součástí studie je i optimalizace celého procesu vzorkování a následného zakoncentrování tak, aby bylo možné získat vzorky lidského pachu ve větším množství. Vyvíjená destilační jednotka ve spojení s dalšími analytickými metodami, zejména HS/GC-MS, bude v budoucnu použita k počáteční separaci pachových molekul z použitého sorbentu.

Sekce : Analytická chemie III

Potenciální fotosenzitizéry založené na porfyrinových derivátech Trögerovýchází

Autor: Bc. Jakub Sedláček
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Fotosenzitizéry jsou sloučeniny schopné po excitaci zářením produkovat cytotoxické specíe, zejména singletní kyslík. Této vlastnosti se využívá při fotodynamické terapii nádorových onemocnění. Ozářením fotosenzitizéru zářením o vhodné vlnové délce je populován jeho excitovaný singletní stav S_1 , následně je mezisystémovým přechodem populován tripletní stav T_1 a přenosem energie ze stavu T_1 do základního stavu kyslíku dochází k produkci kyslíku v excitovaném singletním stavu. Vzniklý singletní kyslík oxiduje molekuly nezbytné pro metabolismus buňky, čímž zahajuje sled dějů vedoucích až k odumření nádoru. Aby byl fotosezítizér použitelný pro terapii, musí vykazovat vysokou absorpci v oblasti tzv. terapeutického okna od 600 do 900 nm, kde jsou tkáně pro záření nejvíce prostupné. Jedním z nejprostu-dovanějších fotosenzitizérů je Foscan, který v $CHCl_3$ vykazuje intenzivní absorpci u 651 nm ($\log \epsilon = 4,41$). Tetrafenylporfyrinatónikelnatý derivát spiro-Trögerovy báze vykazuje v CH_2Cl_2 maximum absorpce u 622 nm ($\log \epsilon = 3,84$) a jeho měďnatý analog u 623 nm ($\log \epsilon = 4,36$). Kombinace strukturních motivů Foscanu a spiro-Trögerovy báze by mohla vést k novým fotosenzitizérům použitelným pro terapii.

Sekce : Analytická chemie III

Meta-tetra(hydroxyfenyl)chlorin – stanovení produkovaného singletového kyslíku

Autor: Bc. Matěj Šimek
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Kamil Záruba, Ph.D.

Meta-tetra(hydroxyfenyl)chlorin, s komerčním názvem Foscan, je fotosensetizérem schváleným pro využití ve fotodynamické léčbě rakoviny. Foscan po osvitě viditelným zářením reaguje s tripletovým kyslíkem v roztoku a produkuje singletový kyslík. Singletový kyslík lze stanovit jednak přímo pozorováním luminiscenčního přechodu singletového kyslíku, anebo nepřímým sledováním reakcí singletového kyslíku s takovými látkami, které tvoří specifické produkty oxidace.

Tato práce se zabývá nepřímým stanovením singletového kyslíku ve vodném prostředí metodou, kdy je ozařována směs Foscanu a kyseliny 9,10-anthracendiyl-bis(methylen)dimalonové. Při produkci singletového kyslíku je kyselina oxidována za vzniku neabsorbujícího endoperoxidu a tento proces je sledován spektrofotometricky.

Sekce: **Fyzikální chemie I.**
místnost A135, 9:00

Komise:

Předseda: prof. Dr. Ing. Pavel Matějka

Členové: Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.
Ing. Kryštof Pilnáček

Soutěžící: Jan Blažek
Veronika Jurásková
Jakub Kubečka
Václav Pokorný
Štěpán Sršeň
Ondřej Šrom

Sponzoři sekce Fyzikální chemie I:



Ventile & Fittings Praha



SPECTRO CS

mega



doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Sekce : Fyzikální chemie I

Sečenovovy konstanty v systému vinylacetát + voda + anorganická sůl

Autor: Jan Blažek
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

V práci jsou shrnuty výsledky experimentálního stanovení limitního aktivního koeficientu vinylacetátu (VAC) v čisté vodě a ve vodě s přídavkem anorganické soli. Stanovení byla prováděna saturační metodou (Inert Gas Stripping - IGS), která využívá plynovou chromatografii jako analytický nástroj. Měření byla prováděna za konstantní teploty 298,15 K a v rozmezí koncentrací soli 0,2 až 1 mol/kg. Pro každou sůl byla vypočtena hodnota tzv. Sečenovovy konstanty. Získaný soubor dat byl podroben dalšímu teoretickému vyhodnocení, jehož výsledkem jsou hodnoty příspěvků jednotlivých iontů k hodnotě Sečenovovy konstanty pro směs vinylacetát + voda + anorganická sůl.

Sekce : Fyzikální chemie I

Spektroskopické vlastnosti tautomerů oxyluciferinu a jeho selenových analog ve vodném roztoku

Autor: Veronika Jurásková
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: doc. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.

D-luciferin společně s enzymem luciferasou tvoří jeden z nejvýznamnější bioluminiscenčních systému. Tato světluškami syntetizovaná molekula nachází využití v nejrůznějších oblastech, ať už se jedná o bioluminiscenční zobrazování buněčných struktur a pochodů, nebo kontrolu kvality vod. D-luciferin se během reakce s luciferasou oxiduje na oxyluciferin. Právě excitovaný stav oxyluciferinu je zodpovědný za bioluminiscenci, při jeho návratu do základního stavu dochází k emisi záření.

Oxyluciferin představuje dosti komplexní a experimentálně obtížně uchopitelný systém. V roztoku vytváří šest různých tautomerních forem. V předkládané práci jsem se zaměřila na modelování absorpčních spekter těchto tautomerů ve vodném roztoku se zahrnutím prvních šesti excitovaných stavů pomocí metod TD-DFT. Roztok byl aproximován různými přístupy od jednoduchého dielektrického modelu až po explicitní modelování roztoku. Při molekulových simulacích byla využita efektivní technologie GPU. Simulovaná spektra byla poté srovnána s nedávno naměřenými experimentálními spektry.

Dále byly navrženy struktury nového selenového analoga oxyluciferinu. Tyto struktury byly optimalizovány v plynné fázi a byla pro ně vypočtena absorpční spektra v roztoku.

Sekce : Fyzikální chemie I

Neadiabatická ab initio molekulární fotodynamika nitrofenolu

Autor: Jakub Kubečka
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Nitrofenol byl v nedávné době uvažován v kontextu fotochemické tvorby kyseliny dusité v atmosféře. Ve své práci se zaměřuji na teoretické studium *o*-nitrofenolu a primární děje probíhající po jeho fotoexcitaci. Tato molekula má v základním stavu intramolekulární vodíkovou vazbu, která by mohla umožnit rychlý přenos protonu, resp. vodíku mezi hydroxydovou a nitro skupinou.

Studium *o*-nitrofenolu jsem zahájil mapováním hyperplochy potenciální energie, tj. optimalizací *o*-nitrofenolu a jeho příslušných *aci*-nitroforem (tj. forem s intramolekulárně přeneseným atomem vodíku) v elektronově základním singletním a tripletním stavu. Porovnal jsem výsledky získané různými metodami teoretické chemie a to od vysoce korelované metody CCSD(T) přes DFT metodu s různými funkciónály až po multireferenční CASSCF přístup. Multireferenční efekty se ukázaly být pro některé struktury velmi důležité. Pomocí metody neadiabatické molekulární dynamiky jsem modeloval chování molekuly *o*-nitrofenolu po vybuzení do vyšších elektronových stavů. Simulace jsem statisticky zpracoval. Výsledky diskutuji v kontextu atmosférické chemie.

Sekce : Fyzikální chemie I

Doporučené hodnoty tlaku nasycených par vybraných kyslíkatých rozpouštědel

Autor: Václav Pokorný
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Doc. Ing. Květoslav Růžička, CSc.

V předložené práci jsou uvedeny nově naměřené hodnoty teplot a entalpií fázových přechodů (kalorimetrem TA Q1000) a tepelných kapacit (kalorimetrem Setaram microDSCIIIa) pro významná průmyslová rozpouštědla diethyl karbonát (CAS RN: 105-58-8), gama-butyrolakton (CAS RN: 96-48-0), 1,2-dimethoxyetan (CAS RN: 110-71-4), ethylen karbonát (CAS RN: 96-49-1), propylen karbonát (CAS RN: 108-32-7), a dimethyl karbonát (CAS RN: 616-38-6). Dále byly z literatury vybrány (popřípadě odhadnuty) hodnoty tepelných kapacit těchto látek ve stavu ideálního plynu. Výše uvedená data byla spolu s literárními hodnotami o tlacích nasycených par a o výparných entalpiích simultánně korelována. Výsledkem jsou doporučené hodnoty tlaku nasycených par v technologicky významném rozsahu teplot (260 K až 315 K).

Sekce : Fyzikální chemie I

Spektroskopie reaktivních atmosférických částic: Criegeeho intermediát

Autor: Štěpán Sršeň
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: doc. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.

Oxidy karbonylu známé jako Criegeeho intermediáty (CI) vznikají při ozonolýze alkenů a hrají významnou roli v troposférické chemii. V poslední době byla také nalezena souvislost CI s globálním oteplováním díky schopnosti CI oxidovat oxid dusičitý či oxid siřičitý a vytvářet tak aerosoly. Pro svou reaktivitu nebyly po dlouhou dobu přímo detekovatelné, až v poslední době bylo vyvinuto několik metod pro jejich stanovení a určení jejich reakční kinetiky.

Tato práce se zabývá *ab initio* studiem struktury nejjednoduššího Criegeeho intermediátu CH_2OO v základním stavu v závislosti na použitých metodách a bázích, výpočty excitovaných stavů a jejich posouzením na základě úrovně výpočtu a modelováním UV absorpčního spektra a jeho porovnáním s experimenty. Zvláštní pozornost je věnována vlivu duálního charakteru CH_2OO , který zahrnuje jak zwitteriontový tak biradikálový charakter, na přesnost použitých metod a shodu s experimenty.

Ukázalo se, že duální charakter CH_2OO vede k nutnosti použít k modelování spekter výpočetně náročné multireferenční metody. Dále se ukázalo, že ke kvantitativnímu popisu je potřeba poměrně kvalitní jedoelektronová báze. Výsledné spektrum je v dobré shodě s některými experimenty, mezi experimentálními spektry jsou však odlišnosti.

Sekce : Fyzikální chemie I

Mikroskopický popis efektivní interakce mezi nanočásticemi

Autor: Ondřej Šrom
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Mgr. Alexandr Maliževský, Ph.D.

Struktura a fázové chování tekutin může být silně ovlivněno přítomností stěny (substrátu) v důsledku povrchových jevů řízených van der Waalsovými interakcemi. Cílem mé práce bylo zkoumat tyto jevy pomocí statisticko-mechanických modelů založených na klasické teorii funkcionálu hustoty. Mým prvním úkolem bylo studium rovnováhy kapalina-pára v rovinném póru s mikroskopickou vzdáleností mezi rovnoběžnými pevnými stěnami. V důsledku interakce plyn-stěna, a také díky redukci objemu dostupného molekulám plynu v jedné dimenzi, dochází ke kapilární kondenzaci. Tento jev jsem zkoumal pomocí DFT a srovnal odpovídající rovnováhu s binodálou fázového diagramu objemového systému („bulku“). V dalším úkolu jsem uvažoval systém dvou vertikálních rovnoběžných nekonečně velkých ploch, na které byl adsorbován tenký film kapaliny. Při výpočtech jsem měnil kolmou vzdálenost mezi plochami a zjišťoval, jak daleko musí být plochy od sebe, aby došlo k tzv. bridgingu (ke spojení obou filmů kapaliny). Třetí úkol byl rozšířením druhého s tím rozdílem, že šlo o dvoudimenzionální výpočet (krom kolmé vzdálenosti byla přidána také informace o jednom z rozměrů plochy). Takovýto model přibližuje situaci styku dvou molekul reprezentovaných koulemi – tuto aproximaci lze provést díky mikroskopickým rozměrům interagujících ploch.

Sekce: **Fyzikální chemie II.**
místnost A125, 9:00

Komise:

Předseda: doc. Ing. Ivan Cibulka, CSc.

Členové: Ing. Daniel Ondo, Ph.D.
Ing. Martin Klajmon

Soutěžící: Bc. Petr Číhal
Bc. Žofie Hádková
Bc. Kristýna Kantnerová
Bc. Miroslav Kludský
Bc. Maja Matoušová
Bc. Aigerim Mustafina
Bc. Kateřina Slabá

Sponzoři sekce Fyzikální chemie II:



Ventile & Fittings Praha



SPECTRO CS

mega



doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Sekce : Fyzikální chemie II

Charakterizace sorpčních vlastností polybutylen sukcinátu pro látky s nízkým tlakem sytých par

Autor: Bc. Petr Číhal
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

Cílem práce bylo stanovení sorpčních vlastností folií složených polybutylen sukcinátu (PBS) a polybutylen sukcinátu adipátu (PBSA) pro možnost využití v obalových materiálech potravin. U obalových materiálů je požadována nízká propustnost látek do okolí a nízká sorpce látek do folie, za účelem minimalizace ochuzování potravin o vonné látky, které se v nich vyskytují.

Ke stanovení byly spolupracujícím ústavem určeny v potravinářství významné látky, tak aby sorpci podobných látek bylo možné odhadnout. Jelikož se většinou jedná o látky s velmi nízkým tlakem sytých par, dochází k relativně významnému poklesu tlaku při sorpčním experimentu. Při použití standardních modelů pro vyhodnocení neustálené sorpce dochází vlivem tohoto jevu k vysoké chybě stanovení difuzního koeficientu. Proto byl vytvořen model, kterým je možné vyhodnotit difuzní koeficient i pro experiment, kde je relativní pokles tlaku vysoký.

PBS a PBSA patří mezi biologicky rozložitelné materiály, proto zastávají „zelený trend“ v obalových technologiích. Tento materiál je potencionálně využitelný i v dalších odvětvích průmyslu a tudíž je znalost sorpčních vlastností nezbytnou součástí pro využití tohoto materiálu k dalšímu výzkumu a následnému použití v řadě aplikací.

Sekce : Fyzikální chemie II

Termofyzikální vlastnosti vodných roztoků hluboce eutektického rozpouštědla (cholin chlorid + kyselina levulová)

Autor: Bc. Žofie Hádková
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.

Hluboce eutektická rozpouštědla (Deep Eutectic Solvents, DES) jsou často diskutovaným tématem posledních dvou až tří let. Termofyzikální a jiné vlastnosti těchto nových médií a jejich interakce s dalšími látkami nejsou vesměs známy, a představují proto výzvu pro experimentální výzkum. Předložená práce prezentuje výsledky našeho studia pseudobinárního systému {cholin chlorid a kyselina levulová [1:2] (DES2) + voda} a jejich porovnání s výsledky pro analogický pseudobinární systém {betain a kyselina levulová [1:2] (DES1) + voda}, který jsme studovali již dříve. Měření aktivity vody v systému DES2 + voda provedená v závislosti na složení a teplotě indikují slabé kladné odchylky od Raoultova zákona a exotermní míšení DES2 s vodou. Aktivita vody byla dále stanovena i v dílčích binárních systémech cholin chlorid + voda (betain + voda) a kyselina levulová + voda, s cílem umožnit ternární modelování získaných dat. Toto modelování ukázalo, že interakce mezi cholin chloridem a kyselinou levulovou je sice silná, nicméně výrazně slabší než mezi betainem a kyselinou levulovou, což potvrzují i měření viskozity vodných roztoků obou DES. Měřena byla dále hustota vodných roztoků DES2, a to včetně velmi zředěné oblasti, což dovolilo spolehlivé vyhodnocení standardního parciálního molárního objemu DES2.

Sekce : Fyzikální chemie II

Orthohtalaldehyd - jeho elektrochemická redukce, hydratace a reaktivita s nukleofily

Autor: Bc. Kristýna Kantnerová
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.
Školitel: prof. RNDr. Jiří Ludvík, CSc.

Orthohtalaldehyd (OPA) je látka používaná k detekci aminokyselin v kombinaci s kapalinovou chromatografií (HPLC) a v medicíně jako dezinfekční činidlo. Obě tyto metody byly vyvinuty pouze empiricky, což dokazují rozdílné návody na přípravu aktivních dezinfekčních roztoků i na pre- nebo post-column derivatizaci aminokyselin. Tyto aplikace jsou založeny na reakcích OPA s nukleofily (zejména s aminy), mechanismus však není znám, a to ani ve vodném, ani v organickém prostředí. Měření byla proto prováděna v pufrech o různých pH a v acetonitrilu, neboť hydratace OPA zde hraje významnou roli. Ke sledování průběhu reakcí, k měření kinetiky a k zachycení (mezi)produktů byla v této práci použita DC-polarografie, cyklická voltametrie, coulometrie, hmotnostní spektrometrie, UV/Vis spektrofotometrie a spektroeletrochemie. Bylo zjištěno, že hydratace ftalaldehydu probíhá v pufrovaných roztocích rychleji než v destilované vodě. Dále, že hydratace je kompetitivní reakcí k reakci OPA s aminokyselinami, proto se mechanismus ve vodném i v organickém prostředí liší. Z použitých aminokyselin reaguje nejrychleji glycin, nejpomaleji potom kyselina α -aminoisomáselná. Během reakcí nevzniká žádný elektrochemicky aktivní meziprodukt nebo produkt. Byly určeny rychlostní konstanty studovaných reakcí OPA s aminokyselinami a byly diskutovány strukturní vlivy.

Sekce : Fyzikální chemie II

Sorpce par do nových modifikací Nafionu

Autor: Bc. Miroslav Kludský
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

V důsledku snižujících se zásob fosilních paliv se světový výzkum snaží vyvíjet nové průmyslové procesy, které budou energeticky a ekonomicky méně nákladné a mnohem účinnější. Jednou z těchto možností jsou membránové separační procesy, které jsou schopny v některých případech nahradit např. destilaci.

V této práci se zabývám výzkumem separačních membrán na bázi Nafionu. Komerčně vyráběný Nafion je polymer tvořený perfluorethylenovým skeletem obsahující vedlejší řetězce zakončené sulfoskupinami, které způsobují jeho značně hydrofilní charakter a degradaci membrány v čase. Potenciálně zajímavým využitím Nafionu je dělení azeotrop-tvořících směsí *tert*-butyl methyl etheru (MTBE) a methanolu, jejichž dělení je však znemožněno kyselokatalytickým rozkladem MTBE na čistém Nafionu. Hlavním cílem této práce jsou cílené úpravy struktury Nafionu, a tím odstranění obou podstatných nedostatků čistého Nafionu. Čistý Nafion a jeho modifikace byly zkoumány za pomoci měření sorpce par methanolu, vody, MTBE a dimethyl karbonátu využitím gravimetrické sorpční aparatury. V práci je vyhodnocen vliv modifikací polymeru na rovnovážnou sorpci a difúzní koeficienty měřených látek, dále jejich rozpouštěcí tepla a aktivační energie difúze.

Sekce : Fyzikální chemie II

Studium mísitelnosti γ -Valerolaktonu s uhlovodíky

Autor: Bc. Maja Matoušová
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Karel Řehák, Csc.

γ -Valerolakton (GVL) je látka, kterou je možno ve velkém měřítku vyrábět z biomasy, a která se v blízké budoucnosti může stát významnou surovinou. Tuto látku je totiž možné využít na výrobu paliva do tryskových motorů nebo na bionaftu. Také se předpokládá, že by se mohla přidávat jako aditivum do benzínu. V neposlední řadě by se dala využít jako ekologické rozpouštědlo. Z tohoto hlediska jsou informace o vzájemné mísitelnosti GVL a uhlovodíků velmi žádoucí. Tato práce se v první části zabývá vyhodnocením naměřených výsledků rovnováhy kapalina-kapalina GVL s heptanem, cyklohexanem, dodekanem a 2,4,4-trimethylpent-1-enem. Na základě těchto dat se práce v druhé části věnuje stanovení vzájemné mísitelnosti GVL v ternárních systémech a to GVL + heptan + toluen a GVL + dekan + toluen. Data byla měřena přímou analytickou metodou využívající plynový chromatograf.

Sekce : Fyzikální chemie II

Solubility of solid organic compounds in green solvents

Autor: Bc. Aigerim Mustafina
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

Solubility of pharmaceutical products is one of the major concerns of chemical industry. There are new solvents with reduced chemical impact on human health and contamination of the environment known but no literature data of solubility are available.

The aim of this work is to determine the solubility of drugs or drug-like compounds in two solvents, 2-methyltetrahydrofuran and cyclopentyl methyl ether, that are considered to be green alternative to traditional solvents. The experimental data were obtained by the UV-Vis spectrophotometry in the temperature dependence. The acquired data were correlated by the Scatchard-Hildebrand model of regular solution and NRTL-SAC model. The molecular parameters of the NRTL-SAC were determined for both solvents. These parameters can be used for further prediction of drugs solubility. Also the pharmaceutically interesting van't Hoff enthalpies of solutions were calculated from the temperature dependencies of solubility data.

Sekce : Fyzikální chemie II

Rozpustnost vybraných flavonoidů ve vodě a v organických rozpouštědlech

Autor: Bc. Kateřina Slabá
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

Práce se zabývá rozpustností přírodních látek, konkrétně flavonoidů, v organických rozpouštědlech a ve vodě. Z velké škály těchto látek byly vybrány flavonoidy kvercetin a chrysin, které mají rozsáhlé využití ve farmaceutickém průmyslu, a jako doplňky stravy. Cílem této práce tedy bylo získat základní experimentální data o rozpustnosti těchto látek ve vybraných rozpouštědlech a pokusit se tato data využít pro predikci rozpustnosti v dalších průmyslově využívaných rozpouštědlech. Pro tento odhad byl využit termodynamický model NRTL-SAC. Experimentální i odhadnutá data pak mohou posloužit jako podklad pro výběr vhodných extrakčních kapalin pro získávání těchto látek z přírodních zdrojů.

Sekce: **Fyzikální chemie III.**
posluchárna C13, 9:00

Komise:

Předseda: doc. Ing. Pavel Chuchvalec, CSc.

Členové: Mgr. Jan Heyda, Ph.D.
Ing. Ondřej Svoboda

Soutěžící: Bc. Tomáš Belloň
Bc. Tomáš Martinek
Bc. Jakub Med
Bc. Vladimír Palivec
Bc. Martin Pospíšil
Bc. Daniela Šmídová

Sponzoři sekce Fyzikální chemie III:



Ventile & Fittings Praha



SPECTRO CS

mega



doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Sekce : Fyzikální chemie III

Modelování fotochemických vlastností halogenovaných uhlovodíků s využitím ab initio teorie

Autor: Bc. Tomáš Belloň
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Tato práce je zaměřena na studium struktury a vlastností molekuly CFC-12 (CCl_2F_2) pomocí *ab initio* modelování. Halogenované uhlovodíky patří k významným zdrojům reaktivních částic způsobujících rozklad atmosférického ozónu. Dosud plně nerozumíme mechanismu fotodisociace, i přesto, že již byla provedena řada studií zaměřena na destruktivní účinky této molekuly na atmosférický ozón.

V první části své práce se věnuji modelování absorpčního spektra molekuly CCl_2F_2 v UV oblasti. S použitím reflexního principu a metody dráhových integrálů jsem spektra modeloval na několika úrovních *ab initio* teorie a výsledná spektra porovnal s experimentálně naměřeným absorpčním spektrem. Dalším krokem byla simulace absorpčního spektra CCl_2F_2 na vodních částicích. Řada chemických reakcí v atmosféře probíhá na částicích aerosolu, a proto modelování spektra solvatované molekule představuje důležitý krok při studiu vlastností molekul nacházejících se na jiných částicích. Posledním krokem byla simulace fotodisociace molekuly CCl_2F_2 s využitím metody neadiabatické molekulové dynamiky. Sledována byla kinetická energie odštěpených fragmentů molekuly CCl_2F_2 , což nám pomůže při popisu fotodisociace molekuly CCl_2F_2 a lépe tak pochopit proces rozkladu stratosférického ozónu.

Sekce : Fyzikální chemie III

Popis iontového párování Ca-Cl ve vodném prostředí pomocí ab initio molekulové dynamiky

Autor: Bc. Tomáš Martinek
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Školitel: prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.

Vápenaté ionty hrají důležitou roli v mnoha biochemických procesech. Správný popis jejich párování s jinými ionty a interakce s molekulami vody, je důležitý pro průběh molekulových simulací těchto procesů. Studovali jsme párování vápenatého kationtu s chloridovým aniontem ve vodném prostředí. Popis těchto interakcí je složitý kvůli vysoké hustotě kladného náboje na vápenatém kationtu a může být zatížen nevhodnou volbou parametrů. Proto jsme použili metody *ab initio* molekulové dynamiky. Získali jsme profil volné energie disociace iontů Ca-Cl v závislosti na jejich vzdálenosti. Tyto výsledky jsme porovnali s výsledky získanými metodami klasické molekulové dynamiky pomocí různých forcefieldů a pokusili se odhadnout jejich nejistotu. Protože interakce může být ovlivněna rozpouštědlem, prozkoumali jsme také interakce těchto iontů s okolními molekulami vody.

Sekce : Fyzikální chemie III

Interakce sodíku s atmosférickými aerosoly a simulace jejich srážky pomocí metod výpočetní chemie

Autor: Bc. Jakub Med
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Petr Slavíček, PhD.

Chemie na úrovni nanočástic předurčuje důležité atmosférické procesy, mimo jiné nukleaci aerosolových částic, které jsou základem mj. polárních stratosférických mračen. Experimentální popis takových procesů je však značně omezený. Metoda dopování sodíkovým atomem umožňuje na tyto procesy nahlížet pomocí hmotnostní spektrometrie, a je proto důležité důkladně porozumět interakcím mezi sodíkem a atmosférickými nanočásticemi.

Ve své práci se zaměřuji na studium energetiky, reaktivity a interakci čistých vodných klastrů a vodných klastrů kyseliny dusičné se sodíkovým atomem pomocí DFT a *ab initio* metod výpočetní chemie.

Při interakci sodíku s čistým vodným klastrem dochází k solvataci valenčního elektronu sodíku. Pokud je však součástí klastru kyselina dusičná, interaguje sodík přednostně s kyselinou, buď za vzniku komplexu $\text{Na}^+ \dots \text{HNO}_3(\text{H}_2\text{O})_n$, anebo reaktivně za vzniku NaOH a NO_2 , a neumožňuje tak měkkou ionizaci valenčního elektronu pro hmotnostní spektrometrii.

Sekce : Fyzikální chemie III

Allosteric effects of phenolic ligands and ions on insulin hexamer structure

Autor: Bc. Vladimír Palivec
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Školitel: prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.

The insulin hexamer is an allosteric protein capable of undergoing conformational changes between three states: T6, T3R3 and R6. Transitions and formation of insulin hexamers are mediated through binding of phenolic ligands or ions. Herein, we present a molecular dynamics study of allosteric behavior of insulin using classical non-polarizable force field. Two effects are closely inspected – cation (Zn, Ca, K and Na) binding to the T6 insulin hexamer and possible binding of two neurotransmitters – dopamine and serotonin to the phenolic pocket. The results show that high charge density cations (Zn, Ca) slow down the diffusion inside the B13 glutamate cavity and prevent other cations from entering. On the other hand low charge density cations (Na, K) do not have this effect. The serotonin molecule binds well to the phenolic pocket in a similar way as phenol, however thanks to the charged amino group, the binding could be stronger. Because of that, the serotonin molecule might possibly serve as *in vivo* phenolic ligand which would drive insulin hexamers to R6 conformations. The dopamine molecule does not bind to the phenolic pocket, however three new binding spots in R6 hexamer have been found and described.

Sekce : Fyzikální chemie III

Diffusion and capillary condensation in percolating networks

Autor: Bc. Martin Pospíšil
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Mgr. Alexandr Maliževský, Ph.D;
prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D. (konzultant)

Properties of microporous materials are interesting from both scientific and engineering viewpoint. One attractive possibility the potential application of the microporous media offers is a controlled transport and targeted release of active substances encapsulated in microparticle with porous wall whose penetrability can be controlled on a molecular level. The active substance transport is realized by the diffusion through solvent fluid.

For the purpose of studying the diffusion through the porous was developed simple numerical model, stemming from the findings of the percolation theory. The wall is represented by the 3D graph where bonds (graph vertices) represent single pores. The diffusion depends on the permeability of the bonds. On the basis of the model the percolation threshold is computed, which represents the bordering condition between the states with and without the diffusion. The results are compared with the theoretical predictions.

The permeability of a pore depends on the phase of the solvent fluid (liquid vs. vapor), which is strongly influenced by the capillary phenomena on to the microscopic scale. The fluid phase equilibrium is computed for a confined geometries using classical density functional theory and the results are compared with the classical thermodynamics approach.

Sekce : Fyzikální chemie III

Procesy v sodíkem dopovaných klastrech

Autor: Bc. Daniela Šmídová
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.
Školitel: Mgr. Michal Fárník, Ph.D.

Na povrchu ledových částic polárních stratosférických mraků dochází k heterogenním reakcím, které přispívají k úbytku ozonu. Tyto procesy je možno experimentálně sledovat pomocí molekulových klastrů na detailní úrovni a zároveň bez zanedbání vlivu okolní. V experimentu s molekulovými paprsky byly zkoumány smíšené klastry složené z molekul vody a azoxidu (N_2O), který je významným polutantem v atmosférické chemii. Ke studiu klastrů generovaných supersonickou expanzí byly použity dvě metody time-of-flight hmotnostní spektrometrie: elektronová ionizace (EI) a fotoionizace po dopování sodíkem (NaPI). Tato unikátní kombinace uvedených metod představuje nový nástroj pro studium reaktivity solvatovaného elektronu v klastrech¹. Zatímco EI je univerzální a umožňuje ionizovat v principu všechny klastry, pomocí NaPI lze ionizovat pouze klastry se solvatovaným elektronem. V našich experimentech jsme s rostoucím množstvím N_2O pozorovali nárůst intenzity smíšených klastrů $(\text{N}_2\text{O})_m(\text{H}_2\text{O})_n^+$ v hmotnostních spektrech pomocí EI a zároveň mizení signálu u NaPI. Tento úbytek intenzity je způsoben reakcí mezi Na a N_2O na smíšeném vodním klastru, která probíhá mechanismem přenosu náboje. Tato práce přináší nové detailní poznatky o tvorbě a reaktivitě nanočástic tvořených molekulami azoxidu a vody, které hrají důležitou úlohu v atmosférické chemii.

Reference:

[1] Lengyel, J.; et al. J. Phys. Chem. Lett. 2012, 3, 3096–3101

Sekce: **Fyzikální chemie IV.**
místnost A402, 9:00

Komise:

Předseda: doc. Ing. Karel Friess, Ph.D.

Členové: Ing. Michal Bureš, CSc.
Ing. Daniel Hollas

Soutěžící: Bc. Michal Bezek
Bc. Jan Chalabala
Bc. Jakub Polák
Bc. Václav Radoň
Bc. Martina Rubešová
Bc. Vít Svoboda

Sponzoři sekce Fyzikální chemie IV:



Ventile & Fittings Praha



SPECTRO CS



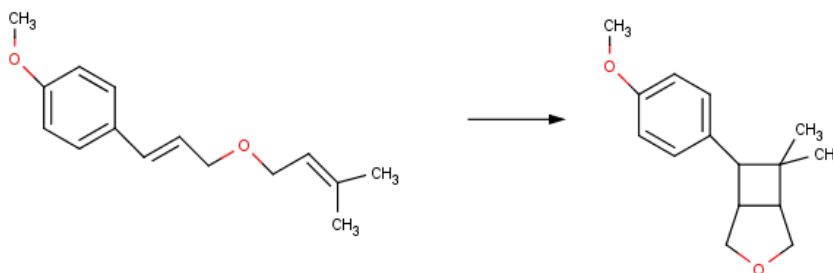
doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Sekce : Fyzikální chemie IV

Teoretický rozbor [2+2] cykloadice při fotochemické syntéze cyklobutanového kruhu

Autor: Bc. Michal Bezek
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.

Cílem mé práce je teoretické studium [2+2] fotocykloadic, tedy reakcí, při kterých působením světla vzniká z dvou izolovaných dvojných vazeb cyklobutanový kruh. Tento typ reakcí nacházíme v různých přírodních dějích, kupř. při tvorbě melanomu. Mimo to tato reakce představuje zajímavý reakční krok v organické syntéze. Tento aspekt také motivoval tuto práci. Má práce směřuje ke studiu komplexních systémů čítajících circa třicet atomů. Mechanismus fotocykloadice je v zásadě patrný už při tvorbě cyklobutanového kruhu ze dvou molekul etylenu. Mechanismus této reakce je hledán pomocí kvantově-chemických výpočtů mapováním hyperplochy potenciální energie základního, excitovaného singletního a tripletního elektronového stavu. Při výpočtech byly použity DFT a multireferenční metody. V další části se zaměřuji již na realistické systémy podléhající intramolekulární fotocykloadici.



Sekce : Fyzikální chemie IV

Modelování fotoionizační dynamiky dimeru amoniaku

Autor: Bc. Jan Chalabala
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: doc. RNDr. Petr Slaviček Ph.D.

Simulace fotochemických dějů se v minulém desetiletí stala standardní součástí teoretického modelování. Poměrně malá pozornost byla ale věnována modelování dějů následujících po ionizaci. Jde přitom o primární děje v radiační chemii a porozumění ionizaci je důležité také v kontextu hmotnostní spektrometrie. V této práci se zaměřuji na dimer amoniaku.

Dimer amoniaku má v základním stavu podobnou geometrii jako isoelektronový dimer vody, charakteristický přítomností vodíkové vazby. Toto uspořádání však není stabilní v ionizovaném stavu, ve kterém dochází k intramolekulárnímu přenosu náboje a protonu mezi atomy dusíku. Pomocí kvantově-chemických výpočtů s různou úrovní elektronové korelace byly identifikovány dva energeticky výhodné stavy kationtu $(\text{NH}_3)_2^+$ a tranzitní stav mezi nimi. Interpolace přenosu vodíku s využitím multi-referenčních CASSCF a MRCI metod ukázala, že v závislosti na typu molekulového orbitalu, ze kterého byl elektron vyražen, nemusí tento proces nutně vést ke stabilizaci kationtu. Po vyhodnocení relativní energetiky základního a excitovaných stavů kationtu byla provedena simulace časového průběhu ionizace dimeru metodou semi-klasické molekulové dynamiky, která umožňuje popsat přeskoky mezi elektronovými stavy. Výsledkem je časový vývoj populací excitovaných stavů během 500 fs simulace pro 3000 trajektorií.

Sekce : Fyzikální chemie IV

Ověření platnosti aditivního charakteru Sečenovovy konstanty v systému Toluén+Voda+hořečnatá sůl

Autor: Bc. Jakub Polák
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

Sečenovova rovnice a její konstanta se tradičně používají k popisu chování organických rozpuštěnců ve vodných roztocích iontových sloučenin v nejrůznějších oblastech chemie (biochemie, ekologie, odpadové hospodářství aj.). Pro tyto konstanty se předpokládá jejich aditivní charakter, tedy že pro jednoho konkrétního rozpuštěnce se Sečenovova konstanta každé soli dá vypočítat jako součet příspěvků všech iontů v této soli. Dřívější experimenty tuto teorii potvrdily u různých rozpuštěnců i solí, avšak u hořečnatých solí se zdá, že tento předpoklad nemusí vždy platit. V rámci této práce byly pomocí saturační metody (inert gas stripping - IGS) stanoveny limitní aktivitní koeficienty toluenu při 25 °C ve vodných roztocích MgCl_2 , MgBr_2 a MgSO_4 . Z těchto hodnot byly vyhodnoceny konstanty Sečenovovy rovnice, u kterých bylo následně provedeno ověření aditivního charakteru.

Sekce : Fyzikální chemie IV

Rovnováha kapalina-kapalina ve dvousložkových systémech – experiment a analýza digitálního obrazu

Autor: Bc. Václav Radoň
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Perfluorované uhlovodíky (PFC) jsou látky, které obsahují pouze atomy uhlíku a fluoru. Tyto sloučeniny vykazují nízkou vzájemnou rozpustnost s běžnými rozpouštědly. Výjimkou jsou některé systémy PFC + ether, u kterých je vzájemná mísitelnost vyšší či dokonce neomezená. Pro organické syntézy prováděné ve dvoufázovém reakčním prostředí jsou zajímavé systémy PFC + ether, u kterých je dosažitelná horní kritická rozpouštěcí teplota.

Pro studium rozpustností u těchto systémů se osvědčila objemová metoda, která je založena na přesném odečtení objemů jednotlivých fází. Je to způsobeno vysokou těkavostí měřených látek, která dělá standardní měření obtížnější. V rámci této práce je vyvíjena aplikace v programu Mathematica, která bude sloužit k analýze obrazu fázových rozhraní a k celkovému automatizovanému vyhodnocení dat této experimentální metodiky.

Sekce : Fyzikální chemie IV

Ultrafialová a rentgenová spektroskopie komplexů přechodných kovů

Autor: Bc. Martina Rubešová
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Metoda rentgenové absorpční spektroskopie se stává stále důležitější technikou využívanou ke studiu struktury molekul a dynamiky chemických dějů. Interpretace experimentálních dat je však téměř nemožná bez pomoci *ab initio* teorie. Tato práce je zaměřená na modelování absorpčních spekter komplexů železa. Motivací pro tento výzkum byly experimentální studie fotochemického rozkladu trioxalátoželezitanového iontu $[\text{Fe}(\text{C}_2\text{O}_4)_3]^{3-}$ pomocí UV záření za vzniku $[\text{Fe}(\text{C}_2\text{O}_4)_2]^{2-}$, oxalátového aniontu a oxidu uhličitého. Mechanismus této reakce zatím není zcela zřejmý, přičemž jednou z možností jeho zkoumání je právě časově rozlišená absorpční rentgenová spektroskopie.

Ve své práci jsem proto modelovala rentgenová spektra možných meziproduktů této reakce včetně výchozí látky a produktů. Tato spektra jsou následně porovnávána s experimentálními daty ze spektroskopie K-hrany. Další cíle práce představují výpočet excitační energie a energie ionizačního potenciálu. V průběhu práce se ukázalo, že v oblasti modelování absorpčních spekter zůstává řada nevyjasněných otázek, které studuji pomocí jednoduššího modelového komplexu $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$.

Sekce : Fyzikální chemie IV

Ro-vibrační spektroskopie metanolu s vysokým rozlišením

Autor: Bc. Vít Svoboda
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Mgr. Ondřej Votava, Ph. D.

V rámci prezentované práce bude představena metoda empirického přiřazení spodního rotačního stavu jednotlivým ro-vibračním liniím na základě teplotní závislosti jejich intenzit. Tato metoda, označovaná jako dvou teplotní analýza, se zdá být slibným přístupem k analýze složitých overtonových spekter. Metoda byla úspěšně otestována pro malé molekuly s vysokou symetrií (sférický a symetrický setrvačnický) jako CH_4 a NH_3 . V prezentované práci bude metoda použita pro analýzu molekuly metanolu, která je reprezentantem velké asymetrické molekuly s komplikovanou ro-vibrační strukturou a vnitřní dynamikou. Pomocí laserového spektrometru s vysokým rozlišením v kombinaci se supersonickou expanzí byla změřena spektra prvního OH-valenčního overtonu $2\nu_1$ v oblasti mezi $7160 - 7220 \text{ cm}^{-1}$. Celkem byla změřena trojice spekter při různých teplotách (13, 23 a 56 K) za účelem analýzy spektra pomocí dvou teplotní analýzy. Dále byla vypracována a otestována možnost kombinace dvou teplotní analýzy s analýzou spekter pomocí kombinačních diferencí v základním stavu (GSCDs). Kombinace těchto dvou metod vede ke spolehlivému přiřazení ro-vibračních přechodů metanolu a umožňuje tak lepší pochopení komplikované overtonové struktury $2\nu_1$ vibrace.

Sekce:	Chemical engineering I. posluchárna B139, 8:30
Komise:	
Předseda:	doc. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.
Členové:	Ing. Zdeněk Grof, Ph.D. Ing. Libor Labík Ing. Josef Chmelař Ing. František Plát, Ph.D. (Škoda Auto) Ing. Martin Hubička, Ph.D. (Lovochemie) Ing. Jaroslav Haluza (Macco Organiques)
Soutěžící:	Viktorie Čermochová Jan Haša Bc. Simon Jantač Bc. Dickson Daniel Owusu Kofi Bc. Inês Mendonca Bc. Giulia Nannetti Bc. Matěj Novák Bc. Marek Šoltys Bc. Marek Václavík Jan Vávra

Sponzoři sekce Chemical engineering I:

ŠKODA



Strategický partner

MOMENTIVE™

SILON
Fibres • Compounds



Lonza



Sekce : Chemical Engineering I

Two-dimensional manipulation strategies for magnetic microtransporters

Autor: Viktorie Čermochová
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

This work proposes an electromagnetic actuation system using a set of four iron core solenoids (with holding power of 750 N) for separation and precise navigation of micro-objects (50 -200 μm) which can realize two degrees of freedom motion on a liquid-air interface. The research is leading to an automatic manipulation with magnetic micro-transporters and nonmagnetic objects via attachment to and subsequent release from the transporters by position based control algorithm. The magnetic micro-transporters, kerosene micro-droplets containing iron-oxide nanoparticles, were fabricated and transferred into a reservoir, which was placed between the solenoids. Variety of reservoirs were casted from polydimethylsiloxane and agar gel while printing masks on a 3-D printer in search for the best possible experimental setup. With manual control of the magnetic field, successful separation of multiple droplets from each other and navigation of particular droplet to a given position were shown. Parametric study of the micro-object movement in controlled magnetic field was conducted while investigating dependence on x- and y-coordinates, concentration of the iron nanoparticles, size of the droplet and applied voltage. Collected data are essential for a development of an automatic actuation system.

Sekce : Chemical Engineering I

Aggregation of liposomes and release kinetics

Autor: Jan Haša
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D; Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D

Liposomes are small hollow particles created by phospholipid bilayer that are able to encapsulate a hydrophilic content. This effect is essential for use of liposomes in the field of targeted medicine administration. In our research, liposomes are prepared by hydration method using dipalmitoylphosphatidylglycerol combined with cholesterol to improve resistance of the bilayer. Due to the method we use, the concentration of liposomes in our liquid is insufficient and the size of particles is around 100 nm. To increase the concentration, the repulsion between particles is decreased by adding salt into the dispersion of liposomes. This results in aggregation of small particles into clusters with diameter 400-800 nm. The salt concentration needed, ranges between 600 mM and 1000 mM, which is 4-6,5 times higher than typical concentration of physiological solution (154mM). In case of pure DPPG liposomes 97% of content was released. However, we have determined that liposomes made of DPPG: cholesterol rate 8:1 and 2:1 are more stable while aggregating and release of content stays below 10%.

Sekce : Chemical engineering I

Triboelectric charging of polyethylene – experimental study

Autor: Bc. Simon Jantač
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Powder particles undergo various friction contacts as they are transported in pneumatic conveying industrial systems, e.g., in the fluidized-bed polymerization reactor. The contacts of particles with a device wall cause the electrons on the mating surfaces to redistribute. The phenomenon known as the triboelectric charging results in severe operational problems and safety risks. In our work the 'cascade method' apparatus, i.e., the slide followed by the Faraday's cage, was utilized to observe the particle-wall charging of polyethylene powder in the friction contact with various materials. The dependence of the acquired charge on the following parameters has been determined: humidity, slide surface roughness and material of the slide (glass, aluminium and polyethylene). The humidity influences the charging substantially more than the choice of the slide material. We have observed significant charging also when two same materials were in the friction contact in disagreement to obsolete theories of triboelectric series. The maximum (saturated) charge was determined by the repeated experiments for each pair of the material and of the slide. Also, the charging dynamics for each such a case was observed. This work contributes to a better understanding of the triboelectric charging and provides data for the validation of mathematical models.

Sekce : Chemical Engineering I

Selectivity of NO_x reduction in NO_x storage catalyst monolith (NSRC)

Autor: Bc. Dickson Daniel Owusu Kofi
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, PhD.

Nitrogen oxides (NO_x) removal from lean-burn exhaust emission is one of the major challenges in environmental catalysis. NO_x storage reduction catalyst (NSRC) is currently regarded as one of the most practical technologies for NO_x removal in automobile exhaust gas. Several nitrogen compounds can be produced during the regeneration phase in periodically operated NO_x storage and reduction catalyst for conversion of automobile exhaust gases. Depending on the regeneration length, temperature and gas composition, the main products that can be formed are N₂, NO, N₂O and NH₃. This research focuses on the experimental evaluation of the NO_x reduction and selectivity towards the main products (N₂, NO, N₂O and NH₃) within a short rich phase (3 and 6 seconds). An industrial sample of NSRC is employed in nearly isothermal micro reactor for this experiment. The experiments are performed in the temperature range 150-500°C in the presence of CO₂ and H₂O, using H₂, CO and C₃H₆ as reducing agents. The experiments are designed to obtain suitable data that can be used for mathematical modelling and prediction of NO_x reduction selectivity under varying operation conditions.

Sekce : Chemical Engineering I

Measurement of power consumption in stirred vessels

Autor: Bc. Inês Mendonça
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

The knowledge of power input in stirred tank reactors is decisive for a successful scale-up, operation and design of stirred tank reactors. The power input in such vessels is predicted using empirical correlations. To ensure their reliability the correlations should be based on a broad range of operational conditions. The measurements were carried in a pilot-plant vessel and moreover results from laboratory vessel were used. Different types of impellers and their combinations were used including radial, axial and combined liquid flow impellers. Solution of the commercial thickener Sokrat 44 was used as a liquid phase to represent a viscous batch. The power input was measured for various single-, double- and triple-impeller configurations and for different frequencies and several gas flow rates. Gassed and ungassed power inputs were measured. It is shown that upper impellers have higher gassed power input than the bottom one. Correlation equations describing behaviour of particular impellers were evaluated for a viscous batch and for a non-coalescent batch. In addition separate correlations for bottom and upper section were presented. We believe that these correlations can be used for prediction in an industrial scale apparatuses, under wide range of operational conditions.

Sekce: Chemical Engineering I

Bubble behaviour under presence of non-ionic surfactants

Autor: Giulia Nannetti
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

The global consumption of plastics materials is increasing and its recycling is no longer a choice but a needs. To have a good plastics recovery a high degree of separation is required and new techniques are being developed. The froth flotation, used effectively for mineral ore separation, is studying now to gain the maximum efficiency also in flotation of plastics materials. This method is based on selective adhesion of bubbles on more hydrophobic surfaces. During the flotation process, several flotation agents including frothers and wetting agents are used and here the surface active agents (surfactants) belong to the most important group.

The core of this study is to analyse how the presence of surfactants affects the bubble adhesion process. The experiments were done with the non-ionic surfactant pentaethylene glycol monododecyl ether and these data were compared with results obtained for other non-ionic surfactant (Triton X-100). The experiments were carried out using a free rising bubble technique, capturing the bubble adhesion using a high speed camera. The wetting dynamics (three-phase contact line expansion, dynamic surface tension, bubble and drop contact angles) were measured for different surfactant concentration and the important influence of critical micelle concentration was found.

Sekce : Chemical engineering I

Study of the mechanism of decanol chemotaxis

Autor: Bc. Matěj Novák
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Biological chemotaxis is a crucial feature of living organisms, because it represents the ability to locate sources of nutrition and to move towards them. Various synthetic systems have also exhibited signs of chemotactic behavior. The common denominator of these systems is a transfer of chemical into mechanical energy, induced by a concentration gradient of another added substance. In the presented work, we analyzed autonomous movement of decanol droplets on a glass substrate, covered by a thin layer of sodium decanoate solution. The droplets exhibit the ability to move repeatedly towards additions of NaCl, to find the addition source in a maze structure or to transport reactive substances in the process. This type of artificial chemotaxis could be utilized to transport cleaning agents to otherwise inaccessible internal surfaces of machines. Furthermore, a hypothesis was formulated, explaining the mechanism of oriented chemotaxis in the studied system. Since a gradient of surface tension in the vicinity of the droplet seems to contribute to the movement, another surfactant solution, namely sodium dodecyl sulfate, was tested for chemotactic abilities with NH_4Cl acting as trigger of the movement instead of NaCl. The results, obtained in this research, could find an application in future design of microfluidic devices or artificial "chemical robots".

Sekce : Chemical Engineering I

Composite Lipid/ Fe_3O_4 / SiO_2 Sub-micron Particles for Controlled Release of Active Substances

Autor: Bc. Marek Šoltys
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, PhD.

The goal was to prepare surface modified hollow porous magnetic silica nanoparticles (400-600 nm) with iron oxide and lipid layer on top. For the synthesis of the nanoparticles an emulsification method using cetyltrimethylammonium bromide and tetraethoxysilane was used. An electrostatic bonding method was used to prepare nanoparticles with surface modified by iron oxide. For this, iron oxide nanoparticles with positive surface charge had to be prepared and they were mixed with silica nanoparticles, which have negative surface charge. Characterisation of the resulting nanoparticles was done by transmission electron microscopy (TEM), dynamic light scattering (DLS), electrophoretic light scattering (ELS), electro-magnetic heating, Brunauer-Emmett-Teller (BET) surface area analysis with pore size analysis, release kinetics of a model substance and a heat induced hydrolysis of loaded ester was measured. Further, a lipid layer was formed around the particles and it's effect on diffusion rate of a loaded substance from the particles was studied.

Sekce : Chemical Engineering

Preparation and performance of multi-layer Lean NO_x trap catalysts

Autor: Bc. Marek Václavík
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Lean NO_x trap (LNT) catalyst is an effective tool for removal of nitrogen oxides (NO_x) from automotive exhaust gas. The NO_x are stored on the active sites and then reduced, which is controlled by periodical changing of the air/fuel ratio. The LNT needs to be combined with other types of catalysts (e.g. DOC for oxidation of CO and hydrocarbons) and there is an effort to combine them in a single monolith reactor. However, when the catalyst layers coated on the walls of monolith channels are too thick, the overall efficiency is influenced by diffusion limitations. Whereas the chemical formulations of the catalysts have been finely tuned by the manufacturers, the role of the transport has not been fully investigated.

This work is focused on preparation of model LNT catalysts coated on flat metal foils, where the uniformity and thickness of the layers are well controlled. The active LNT layers were overcoated with additional layers (either inert or DOC) as the ultimate objective is to examine the effect of gas transport on the catalyst performance. The samples were characterised and tested in a laboratory reactor for oxidation reactions and NO_x storage and reduction.

Sekce : Chemical Engineering I

Ultrathin biocompatible coatings of fluorescent diamonds

Autor: Jan Vávra
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Mgr. Petr Cígler Ph.D.

Diamond nanoparticles are being thoroughly studied as a promising non-toxic material for fluorescent imaging. The combination of superior physical and chemical properties of diamond and its size in the range of tens of nanometers make these particles a viable option for such applications. In contrast to fluorescent proteins and other organic fluorescent dyes which suffer from photobleaching, nanodiamonds are extremely photoresistant and well suited to be used for long-term imaging. Fluorescent diamond nanoparticles are perfectly capable to be used for imaging of living cells in vitro. However, once these particles are introduced into more complex living organisms, an issue of biocompatibility rises. Although the bare nanodiamond particles are chemically inert, they suffer from aggregation in biological environment. Here, we addressed this issue by deposition of self-assembled phospholipid bilayers on diamond nanoparticles. These structures can be made to resemble lipid cell membrane of almost all living organisms and should be ignored by the immunity system. The growth of these supported lipid bilayers has been studied on very few materials, silica being one of them. We developed a method to grow silica shells of controlled thickness on the surface of nanodiamonds. The formation of supported phospholipid bilayers on these silica-coated nanodiamonds has been confirmed using fluorescent assay and their stability has been tested in series of buffer solutions.

Sekce:	Chemické inženýrství II. posluchárna K3, 8:30
Komise:	
Předseda:	doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha
Členové:	Ing. Petr Kočí, Ph.D. Ing. Jaroslav Kotowski Ing. Nina Sarvašová Ing. Jan Nájemník, CSc. (Momentive Specialty) Mgr. Markéta Reidingerová (Medicem)
Soutěžící:	Bc. Jan Březina Tereza Herinková Denisa Lizoňová To Quyen Nguyenová Bc. Adam Rygl Milan Solík Bc. Helena Suchanová Marie Vyhlídková

Sponzoři sekce Chemické inženýrství II:

ŠKODA



Strategický partner

MOMENTIVE™

SILON
Fibres • Compounds



Lonza



Sekce : Chemické inženýrství II

Vliv provozních podmínek na reakce v trojcestném automobilovém katalyzátoru

Autor: Bc. Jan Březina
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, PhD.

Z důvodu neustále se zvyšujícího počtu automobilů a zpřísnujících se emisních limitů je nutné vyvíjet účinnější technologie redukující množství škodlivin ve výfukových plynech. Tato práce je zaměřená na experimenty mapující vliv hlavních provozních parametrů (teplota a složení výfukového plynu, poměr palivo:vzduch) na reakce v trojcestném automobilovém katalyzátoru. Tento typ katalyzátoru se používá zejména pro benzínové spalovací motory. Měření jsou prováděna pomocí směsi plynů simulující reálné výfukové plyny. Vzorek katalyzátoru je umístěn v přesně definovaném temperovaném reaktoru. Průběh experimentu je řízen automaticky podle předem připravené matice zadání. Pozornost je věnována nejen dosahovaným konverzím hlavních sledovaných škodlivin (CO, uhlovodíky, oxidy dusíku – NO_x), ale také selektivitě reakcí. To se týká hlavně redukce NO_x, kde mohou na katalyzátoru za určitých podmínek vznikat vedlejší produkty N₂O a NH₃. Získané znalosti jsou využívány pro další vývoj, výběr vhodného typu katalyzátoru, nastavení řídicí jednotky motoru automobilu, apod. Správné nastavení řízení pracovního režimu motoru je klíčové pro splnění emisních limitů EURO.

Sekce: Chemické inženýrství II

Modelování řízeného vylučování látek ze strukturovaných mikročástic

Autor: Tereza Herinková
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Zdeněk Grof, Ph. D.

Důležitý a zároveň obtížný úkol mají vědečtí pracovníci, kteří se při své práci pohybují ve světě mikroskopických rozměrů. Tímto úkolem je dopravit určitou reaktivní nebo nestabilní látku na místo určení a zabránit dané látce, aby působila nebo podlehla svému rozkladu dříve, než se dostane na požadované místo. Jednou z možností jak tohto uskutečnit je v mikročásticích dopravit na místo určení stabilní prekurzory a ve správném čase spustit chemickou reakci, jejímž produktem je požadovaná látka, a dále řídit rychlost průběhu reakce. Při návrhu mikročástice by to znamenalo experimentálně ověřit nespočet kombinací různých podmínek, za kterých tato reakce probíhá, a zvolit optimální kombinaci. Avšak ve světě výpočetní techniky to znamená pouze přepsání několika čísel, kdy zbytek práce za nás provede počítač. Vytvářený program má sloužit jako nástroj, který ukáže, jak nejvhodněji volit podmínky reakce, aby její průběh co nejlépe vyhovoval našim požadavkům. Pomocí matematického modelování sledujeme vliv různých parametrů (například velikost částice, teplota, difúzní koeficient) na průběh vylučování látky.

Sekce : Chemické inženýrství II

Detekcia fluorescenčných nanočastíc v biologických tkanivách

Autor: Bc. Denisa Lizoňová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, PhD.

Rakovina je jedním z onemocnění rozšířených na celom svete. Len v roku 2012 na rakovinu zomrelo viac ako 8 miliónov ľudí. Súčasťou liečby cytostatikami v mnohých prípadoch neodpovedá všetkým požiadavkám modernej medicíny. Je drahá a má nespočetné množstvo vedľajších účinkov (vypadávanie vlasov, ťažkosti tráviaceho traktu, nauzea a i.), pretože cytostatiká nedokážu rozpoznať rakovinové bunky od zdravých.

Veľkú nádej do oblasti liečby rakoviny vnáša myšlienka cieleného transportu liečiv- spôsobu liečby, ktorý dokáže selektívne pôsobiť na konkrétne bunky, či tkanivá. Nosiče, ktoré dopravia liečivo priamo k nádoru a v tomto mieste budú schopné vylúčiť účinnú látku, sú aj objektom predkladanej práce. Tento prístup totiž značne znižuje množstvo nežiadúcich účinkov a zvyšuje efektivitu samotnej liečby ochorenia.

Aby nosiče- nanočastice dokázali rozpoznať rakovinnú bunku, boli modifikované špecifickou protilátkou (IgG M75), ktorá sa viaže s receptormi prítomnými na membráne tejto bunky. Pridanie fluorescenčného značenia a magnetitových nanočastíc umožňuje detekciu s využitím optických metód (konfokálna mikroskopia, fluorescenčná spektrometria) aj MRI. Práca sa zameriava na detekciu kompozitných nanočastíc v tkanivách orgánov laboratórnych myší.

Sekce : Chemické inženýrství II

Nebiologická chemotaxe – charakterizace systému decanol dekanoát-sůl

Autor: To Quyen Nguyenová
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jitka Čejková, PhD.

Chemotaxe je pohyb biologických systémů (hlavně buněk) ve směru chemického gradientu. Například bílé krvinky jsou schopné vyhledat nebezpečné cizorodé látky na základě chemického gradientu, který je vytvořen chemickými látkami vylučujícími se z cizorodých látek. Nedávno byl objeven systém dekanol-dekanoát-sůl, který tuto schopnost buněk simuluje (v prostředí dekanoátu se pohybuje kapka dekanolu v gradientu soli). Cílem předložené práce je tento systém charakterizovat a to z hlediska vlivu substrátu na chemotaxi a typu soli na rychlosti pohybu kapky dekanolu. Nebiologická chemotaxe je významná jako potencionální mechanismus pro cílené doručování účinných látek. V rámci práce též je ukázána možnost přepravy látek či menších objektů.

Sekce : Chemické inženýrství II

Mikroporézní polystyrenové pěny připravené metodou spinodální dekompozice

Autor: Bc. Adam Rygl
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Mikroporézními pěny rozumíme takové pěny, jejichž velikost pórů je menší než 10 μm . Podle struktury je dělíme na pěny s uzavřenými a otevřenými póry. Pěny s otevřenými póry mají potencionální využití jako nosné struktury v adsorpčních kolonách, v tkáňovém inženýrství, jako membrány v separačních procesech či zlepšené zvukové izolátory. V této práci se zabýváme přípravou mikroporézních polystyrenových (PS) pěn pomocí tepelně indukované fázové separace (spinodální dekompozicí) na aparatuře vlastní výroby. V závislosti na zvolených podmínkách lze připravovat pěny s otevřenou, částečně otevřenou či zcela uzavřenou strukturou pórů, a s póry různých velikostí, což dává velké potencionální využití v mnoha oblastech. Polymer je nejprve rozpuštěn ve vhodném rozpouštědle nad kritickou teplotou systému a v blízkosti kritického složení. Roztok je následně prudce ochlazen, v důsledku čehož dojde k fázové separaci a k zamrznutí rozpouštědla, které se odstraní lyofilizací. Systematicky jsme studovali vliv vybraných podmínek na strukturu PS pěn, kterou jsme charakterizovali rtuťovou porozimetrií a SEM. Podařilo se nám připravit pěny s porositou větší než 80 % a s póry menšími než 10 μm . Dále byl v této práci vypracován návrh aparatury sloužící k měření bodů zákalů (bodů tvořících binodálu), která umožní další optimalizaci vypěňovacího procesu.

Sekce : Chemické inženýrství II

Vplyv parametrov elektrosprejovania na morfológiu a fotodegradačnú aktivitu tenkej vrstvy TiO_2

Autor: Milan Solík
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Oxid titaničitý ako netoxický biely pigment nachádza uplatnenie pri výrobe náterových farieb, plastov, papiera či kozmetiky. Tento zdanlivo obyčajný biely prášok však disponuje aj fotokatalitickými vlastnosťami, ktoré umožňujú rozklad nebezpečných látok. Fotokatalitickú aktivitu TiO_2 ale významne ovplyvňuje veľkosť častíc a morfológia nanosenej vrstvy, preto je treba klásť dôraz na prípravu tohto materiálu. Tu sa uplatňuje metóda elektrorozprašovania, ktorá pri nízkych investičných i prevádzkových nákladoch umožňuje jednoducho generovať submikrónové častice, ktorých depozíciou vznikajú rôzne štruktúry tenkej vrstvy.

Cieľom tejto práce bolo detailné štúdium morfológie vrstiev oxidu titaničitého produkovaných elektrosprejovaním pri rôznych depozičných podmienkach. Fotokatalitická aktivita pripravených vrstiev TiO_2 bola stanovená pomocou degradačných experimentov, pri ktorých boli rozkladané toxické farbivá.

Sekce : Chemické inženýrství II

Dynamika adheze bubliny v přítomnosti ionických surfaktantů

Autor: Bc. Helena Suchanová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

V mnoha průmyslových procesech se setkáváme s interakcí bublin s pevnými částicemi. Příkladem mohou být probublávané kolony, vícefázové reaktory nebo flotace, která je využívána k separaci plastů, uhlí i minerálních rud. Klíčovým krokem je zde úspěšnost adheze bubliny na pevnou částici. Adheze je výrazně ovlivněna přítomností flotačních činidel, což jsou např. pěniče nebo smáčedla. Cílem této práce je zjištění vlivu povrchově aktivních látek (surfaktantů) na proces adheze bubliny. I malé množství těchto látek významně snižuje povrchové napětí, ovlivňuje smáčení pevného povrchu a tedy i pravděpodobnost a průběh adheze. Tato práce se věnuje vlivu ionických surfaktantů, které mají na své hydrofobní části kladný nebo záporný náboj. Průběh adheze bubliny na hydrofobní povrch byl snímán vysokorychlostní kamerou a pomocí obrazové analýzy byly vyhodnoceny smáčecí úhly a průměr třífázového rozhraní. Rovněž bylo měřeno dynamické povrchové napětí. Pro oba typy surfaktantů byl pozorován významný vliv koncentrace surfaktantu a zcela atypické chování okolo kritické micelární koncentrace.

Sekce : Chemické inženýrství II

Charakterizace porézní katalytické vrstvy v mikroměřítku

Autor: Marie Vyhlídková
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D

V automobilovém katalyzátoru prochází výfukové plyny soustavou paralelních kanálků na jejichž stěnách je nanesena porézní katalytická vrstva. V moderních vícevrstvých katalyzátorech může docházet k difúznímu omezení konverze reaktantů. Tato práce se zabývá detailním modelováním struktury katalytické vrstvy a určením difúzního koeficientu. Katalytická vrstva se skládá z porézních částic různé velikosti, které tvoří mezi sebou póry v řádu mikrometrů. Existuje několik možností jak tyto struktury digitalizovat (např.: SEM + rekonstrukce, TEM či CT) – všechny tyto metody jsou však velice časově a finančně náročné. Tato práce využívá matematickou simulaci formování struktury z naměřené distribuce velikosti částic a statistických deskriptorů jako jsou distribuce velikosti pórů, dvoubodová korelační funkce a lineal path function. Použité statistické deskriptory vystihují různé parametry katalytické vrstvy potřebné pro správné vyhodnocení difúzního koeficientu a jedním z úkolů práce je posoudit, které z nich jsou klíčové pro zpřesnění rekonstrukce katalytické vrstvy a tím i přesnější určení difúzního koeficientu.

Sekce:	Chemické inženýrství III. posluchárna B03, 8:30
Komise:	
Předseda:	prof. RNDr. Drahoslava Janovská, CSc.
Členové:	Ing. Lukáš Valenz, Ph.D. Ing. Alexandr Zubov, Ph.D. Ing. Tomáš Jindra, PhD. (Pure Bohemia) Ing. Lucie Dolejší (Chemoprojekt Nitrogen) Ing. Martin Růžička (Unipetrol)
Soutěžící:	Michal Janda Bc. Elvíra Khafizová Jiří Kolář Petr Kovář Bc. Patrik Schneider Peter Ševčenko Anna Zítková Bc. Martina Živčáková

Sponzoři sekce Chemické inženýrství III:

ŠKODA



Strategický partner

MOMENTIVE™

SILON
Fibres • Compounds



Lonza



Sekce : Chemické inženýrství III

Selektivita redukce NO_x v automobilovém katalyzátoru

Autor: Michal Janda
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, PhD.

Produkty katalytické redukce NO_x ve výfukových plynech automobilů jsou N₂, NH₃ a N₂O. Bohatá palivová směs vede k vyšší koncentraci redukčních činidel (H₂, CO, HC) a selektivitě na NH₃, kdežto chudá směs je charakterizována přebytkem kyslíku a vznikem N₂O. Byla provedena série měření v laboratorním reaktoru při teplotách od 150° do 400° C a testována strategie pro řízení provozních podmínek tak, aby bylo dosaženo vysoké selektivity na N₂.

Sekce : Chemické inženýrství III

Studium vlivu elektrického pole na systém dvou nemísitelných vodných fází

Autor: Bc. Elvira Khafizova
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. Michal Přibyl, PhD.

Dvoufázové systémy se segmentovaným tokem jsou v mikrofluidice využívány například pro uskutečňování chemických či biochemických reakcí nebo pro výrobu mikročástic. V mnoha aplikacích se využívá dvoufázový systém typu voda-organické rozpouštědlo, který však nebývá vhodný pro bioaplikace, například z důvodu denaturace proteinů. Řešení tohoto problému nabízí využití segmentovaného toku dvou vodných fází.

Cílem této práce je studium vlivu elektrického pole na systém dvou nemísitelných vodných fází vytvořených ze směsi tvořené polyethylenglykolem se střední molekulovou hmotností 4000 g/mol a vodným roztokem hydrogenfosforečnanu draselného a dihydrogenfosforečnanu draselného s hodnotou pH=7. Experimentálně bylo pozorováno, že malá kapka jedné fáze plovoucí na hladině fáze druhé se v přítomnosti stejnosměrného elektrického pole pohybuje. Směr pohybu lze ovlivnit polaritou elektrického pole. V této práci bude prezentována studie zabývající se závislostmi rychlosti pohybu kapky na poloze v měřící cele. Bude též vyhodnocena reprodukovatelnost experimentů a diskutován charakter získaných závislostí.

Sekce : Chemické inženýrství III

Characterization of hydrophobic polymeric coating produced by electrospray

Autor: Jiří Kolář
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Hydrophobic or superhydrophobic coatings are currently intensively studied as a very attractive topic with many applications. An ability of the coated material to repel water impart anti-corrosion, anti-biofouling, anti-icing and self-cleaning properties, which are demanded not only in industrial branches but also in everyday life. Most of the nowadays available highly hydrophobic materials are based on fluorinated alkylsilanes, which exhibit both bioaccumulative and toxic properties. An alternative to these materials is polystyrene, which is cheap, nontoxic and has low polarity. The hydrophobic coatings based on polystyrene can be easily produced by electrospray, which excels in generation of small particles together with controlled layer morphology. This work was focused on preparation of hydrophobic polystyrene coatings using electrospray to study dependence of contact-angle on layer morphology. Samples of the coatings were characterized by SEM and tested to determine resistance against weather condition and mechanical deterioration.

Sekce : Chemické inženýrství III

Čerpání kapalných kovů na základě Lorentzovy síly v mikrofluidních zařízeních

Autor: Petr Kovář
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

Cílem naší práce je prozkoumat vlastnosti eutektické směsi galia a india, která je za normálních podmínek v kapalném stavu, možnosti jejího využití a použití Lorentzovy síly jako možného způsobu čerpání v mikrofluidních zařízeních. V úvodním experimentu jsme ověřili vliv působení elektřiny v magnetickém poli na chování tekutiny a potvrdily teoretické předpoklady o jejím vlivu na pohyb tekutiny. V práci jsou dále diskutovány další možnosti využití této slitiny.

Sekce : Chemické inženýrství III

Využití TD-NMR pro studium sorpčních procesů v polymerech

Autor: Bc. Patrik Schneider
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polymery jsou v současnosti jedním z nejrozšířenějších druhů materiálů, a přesto stále nejsou zcela objasněny souvislosti mezi jejich strukturou a vlastnostmi (např. morfologickými, mechanickými či sorpčními). Vlastnosti polymerních materiálů jsou tak stále předmětem experimentálního studia a naším cílem je vyvíjet metody jejich měření vhodné pro praktické využití v průmyslu. V této práci jsme se zaměřili na studium sorpčních procesů v polyetylenu a polyuretanu s využitím nukleární magnetické rezonance v časové doméně (TD-NMR). Finanční nenáročnost této metody a rychlost nedestruktivní analýzy široké škály vzorků je skvělým předpokladem pro uplatnění v komerční i vědecké sféře. Tato studie se zaměřila jak na sorpci v kapalině tak i na sorpci v plynné fázi, přičemž studium sorpce plynů pomocí TD-NMR je nová a neprozkoumaná metoda, která dosud nebyla publikována v literatuře. V průběhu sorpce se mění relaxační časy jednotlivých fází v polymeru a tyto změny byly vyhodnoceny jako časové závislosti. Následným proložením těchto závislostí vhodným modelem byly odhadnuty difúzní koeficienty.

Sekce : Chemické inženýrství III

Příprava a charakterizace kompozitních glukonových mikročástic schopných radio-frekvenčního ohřevu

Autor: Peter Ševčenko
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Alternativou k syntetické přípravě mikročástic pro enkapsulaci a řízené uvolňování účinných látek je izolace vhodných mikročástic z přírodních zdrojů a jejich následná modifikace, která dodá materiálu další funkce a zvýší jeho atraktivitu pro následné využití. Cílem předložené práce je příprava a charakterizace kompozitních magnetických glukonové mikročástic pro řízené vylučování účinné látky „na dálkové ovládání“ pomocí radiofrekvenčního ohřevu. Glukonové mikročástice byly získané sérií izolačních kroků z kvasinek a jejich čistota byla zkoumána infračervenou spektrometrií. Takto připravené částice byly modifikovány koprecipitací solí FeCl_3 a FeCl_2 v zásaditém prostředí, což vedlo ke vzniku kompozitního materiálu. Za pomoci UV-Vis spektrometrie a gravimetrie byla určena koncentrace železitých iontů v připraveném materiálu. Pomocí statického rozptylu světla byla sledována distribuce velikostí částic, která byla porovnána s mikroskopií. Povrch připraveného materiálu byl zkoumán pomocí optické a skenovací elektronové mikroskopie. Účinnost radio-frekvenčního ohřevu byla vyhodnocena pomocí měření změny teploty suspenze připravených částic ve vodě. Posledně zmíněná vlastnost bude dále studována se záměrem její aplikace na dálkově ovládanou difuzi modelové látky do prostředí.

Sekce : Chemické inženýrství III

Nanoparticle deposition during electrospraying – Modeling of electrostatic interactions

Autor: Anna Zítková
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Electrospraying is a method employing the electric field for the creation of nanoparticles. Sprayed particles disintegrate thanks to their high surface charge density and the evaporation of a solvent and their final size is in the range of tens of nanometers. The deposition of nanoparticles allows preparing thin films from different materials and main applications are in electro-engineering. Electrospraying is a simple and cheap method, in which morphology of the deposited layer of nanoparticles depends on voltage, temperature, distance between nozzle and substrate etc. Our model is focused on the evolution of the layer morphology. The motion of nanoparticles is controlled by electric field between charged nozzle and the grounded substrate. Local distribution of electric potential is influenced by the moving and deposited nanoparticles. Besides equations of motion we have to solve the 3D Poisson equation for electric potential in each step of the simulation and thus we obtain the actual force acting on nanoparticles. Model considers also other forces, such as van der Waals or Stokes interactions. Output of the model is the dynamic simulation of nanoparticle deposition and is employed to study how spraying conditions affect the morphology of the film.

Sekce : Chemické inženýrství III

Interakcia lipozómov s polyelektrolytom: Prvý krok k lipozomovému nanolegu?

Autor: Bc. Martina Živčáková
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D

Lipozómy sú malé duté častice tvorené fosfolipodovou dvojvrstvou. Veľkosť unilamelárnych lipozómov sa pohybuje od desiatok až po stovky nanometrov. V súčasnosti sa využívajú v medicíne ako nosiče liečiv: vo vnútri môžu niesť hydrofilné aktívne látky a v ich membráne hydrofóbne látky.

V súčasnosti sú známe lipozomálne systémy, ktoré umožňujú prenášať jednu látku. Naším cieľom je vytvoriť systém tzv. „nanolega“, ktorý by nám umožnil enkapsulovať, transportovať a „doručovať“ i viac látok naraz, a za tým účelom pozostával z viacerých zložiek: lipozómov, spojiva a ďalších zložiek (napr. spúšťače, ktoré zariadia vypúšťanie aktívnej látky).

Prvým krokom k tomuto cieľu sú kompozity lipozómov s polyelektrolytom. Zvoleným systémom bol DPPG a chitosán. Veľkosť pripravených lipozómov bola 100 nm, použitý chitosán bol nízkomolekulárnej hmotnosti (Sigma 448869). Zmiešaním lipozómu a chitosánu v určitých definovaných pomeroch sme získali agregáty o stredných veľkostiach (200 nm – 20 µm). Potom sme sledovali vylučovanie enkapsulovanej látky, konkrétne karboxyfluoresceínu z týchto agregátov, študovali sme ich štruktúru pomocou konfokálnej mikroskopie a skúmali vplyv zmeny pH na ich štruktúru a stabilitu.

Sekce:	Chemické inženýrství IV. posluchárna BIII, 8:30
Komise:	
Předseda:	prof. Ing. Dalimil Šnita, CSc.
Členové:	Ing. Aleš Zadražil, Ph.D. Ing. Michal Vonka Ing. Pavel Beránek Ing. Jiří Dohnal (Zentiva) Dr.Ing. Juraj Kilián (Mondi)
Soutěžící:	Bc. Jakub Dvořák Kateřina Ježková Iveta Kršková Pavel Kupka Patrik Labík Marie Prajzlerová Bc. Alexandr Romanov Bc. Ivo Šnajdr

Sponzoři sekce Chemické inženýrství IV:

ŠKODA



Strategický partner

MOMENTIVE™

SILON
Fibres • Compounds



Lonza



Sekce : Chemické inženýrství IV

Využití metody disipativní částicové dynamiky pro modelování emulzních systémů

Autor: Bc. Jakub Dvořák
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D

Kompozitními mikročásticemi nazýváme částice tvořené více materiály s velikostí v řádu desítek mikrometrů. Většinou jsou vnitřně strukturovány ve formě jádra, obalu, nebo vnitřních kompartmentů. V současnosti se hojně využívají v mnoha aplikacích, jelikož jejich kompozitní struktura usnadňuje dosažení specifických funkcionalit, jako například schopnost biospecifické adheze, radiofrekvenčního ohřevu či termoresponzivní změně objemu. Při syntéze těchto částic je kromě samotného návrhu syntézy také podstatné studium jejich chování. V mnoha případech tato studie probíhá jen v živých organizmech a je zaměřená zejména na funkčnost získaných částic než na jejich adhezí vlastnosti, které mohou významně ovlivňovat výslednou funkcionality mikročástic. Tato práce se zabývá adhezí kompozitních Alginát/SiO₂/FeO_x mikročástice ve 3D rozlišeném prostředí. Pro adhezí testy byly vybrány vrstvy z Akrylonitril-Butadien-Styrenu s různou vnitřní strukturou a samotná adheze byla sledována při různých průtocích za pomoci zobrazovací techniky MRI (Zobrazování pomocí magnetické rezonance). Bylo zjištěno, že částice se ve vrstvách usazují v monovrstvě podél celé vrstvy. Jejich množství závisí na rychlosti průtoku částic vrstvou a rychlosti průtoku vody na jejich odmyvání.

Sekce : Chemické inženýrství IV

Analýza vlastností segmentovaného toku pomocí lokálního měření impedance

Autor: Kateřina Ježková
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Lindner, Ph.D.

Segmentovaný tok je jednou z intenzivně studovaných mikrofluidních aplikací; malé rozměry průtočného kanálku umožňují vznik stabilních kapalných disperzí, kdy velikost a vzdálenost jednotlivých segmentů dispergované fáze je prakticky stejná, čehož lze s výhodou využít v řadě aplikací jako je např. příprava nanočástic definovaných vlastností. Pro detailní popis dějů v mikrokanálku je potřeba mj. znát velikost a rychlost pohybu segmentů dispergované fáze. To lze zjistit například přímým pozorováním, pokud fáze vykazují rozdíly v absorbanci či fluorescenci, což se dá realizovat přidávkou vhodné stopovací látky. Cílem této práce je ověřit funkčnost jiné metody pro charakterizaci segmentovaného toku, a to metody založené na rozdílné impedanci fází v poli střídavého elektrického proudu. Výhodou této metody je, že je nedestruktivní a nevyžaduje průhledný mikrokanál či přidavek jiné složky. V rámci práce byl vyroben a sestaven dle dodaných návrhů mikrofluidní čip s polem zlatých mikroelektrod. Dále byla sestavena měřicí aparatura a ověřena základní funkčnost čipu, včetně měření provedeného na dvoufázovém systému dvou nemísitelných kapalin se spojitou organickou fází.

Sekce : Chemické inženýrství IV

Štúdium evolúcie morfológie polyuretánových pien s pomocou metód matematického modelovania

Autor: Iveta Kršková
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polyuretánové peny majú využitie v rôznych sférach priemyslu. Významné sú predovšetkým ich tepelno-izolačné vlastnosti, ktorými sa vyznačujú tvrdé peny s nízkou hustotou a uzavretými bunkami. Vypeňovanie je zložitý proces a v závislosti na výslednej štruktúre sa mechanické a izolačné vlastnosti pien významne menia. Napríklad vytekanie polyméru zo stien do stratov (miesto styku stien) je nežiadúce, pretože môže dôjsť k otvoreniu cieľ prípadne až ku kolapsu celej peny. Cieľom modelovania utvárania morfológie pien je nájsť optimálne podmienky vypeňovania, aby sme dostali penu s požadovanými vlastnosťami. V našej práci je modelovaný rast bublinky riadený difúziou plynu z polyuretánovej reakčnej zmesi, pričom dochádza k prenosu hmoty a hybnosti medzi plynnou a kvapalnou fázou. Bublinka je ohraničená polymérnym plášťom kondenzovanej fázy s určitým množstvom vopred rozpusteného plynu. Ďalší plyn vzniká v dôsledku chemickej reakcie. Viskozita polyméru reakčnej zmesi postupne rastie v dôsledku vytvrdzovacej reakcie. Výstupným parametrom je polomer vyrastenej bublinky, ktorý vypovedá o konečnej veľkosti cieľ v pene. Následné vytekanie polyméru zo stien do stratov, je popísané Reynoldsovou rovnicou a dáva nám údaj o výslednej hrúbke steny.

Sekce : Chemické inženýrství IV

Využití metody disipativní částicové dynamiky pro modelování emulzních systémů

Autor: Pavel Kupka
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Disperze jsou emulze dvou a více nemísitelných kapalných složek, které se objevují při výrobě mnoha produktů, např. mléčných výrobků, čokolády, plastů a kosmetických přípravků. Jejich popis je složitý a mnoho jevů ještě stále není spolehlivě objasněno. Jedním z takových jevů je koalescence. Experimentálně je velice obtížné ji pozorovat, protože probíhá mezi objekty velmi malých rozměrů. Jako užitečný nástroj pro výzkum koalescence v emulzních systémech se jeví matematické modelování. Disipativní částicová dynamika (DPD) je stochastická simulační metoda vhodná pro simulace kapalných a plynných systémů. Metodu DPD lze využít pro simulaci široké škály problémů na meso měřítku. Velikost jedné diskrétní jednotky je zhruba několik molekul jedné fáze (např. voda, olej). V této práci jsme provedli simulaci difúzních vlastností dvojsložkové kapalně směsi. Dále jsme modelovali fázovou separaci a pohyb surfaktantů v emulzi. V oblasti difúze jsou výsledky našeho modulu ve shodě s teoretickým popisem Einsteinovou-Stokesovou rovnicí. V současné době je model DPD adaptován na simulaci tvorby micelárních struktur, koagulaci a koalescenci.

Sekce : Chemické inženýrství IV

Vliv porozity a distribuce velikosti pórů na difuzivitu v nanosené katalytické mikrovrstvě

Autor: Patrik Labík
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, PhD.

Porézní katalytická vrstva v automobilových katalyzátorech se připravuje nanášením suspenze částic na steny keramického monolitu. Vrstvy tlusté přes sto mikrometru mohou difúzně omezovat konverzi. Naší snahou je stanovit vliv struktury na difuzivitu plynu v této vrstvě. Práce se zabývá úpravou distribuce velikosti mikročástic nosiče katalyzátoru a jejich nanášení do tenkých vrstev tak, aby bylo možné kontrolovat tloušťku, porozitu, distribuci velikostí pórů a transportní vlastnosti katalytické vrstvy, které přímo ovlivňují konverze reaktantu. Strukturní informace o připravených vzorcích jsou stanovovány pomocí rastrovací elektronové mikroskopie, laserové difrakce, porozimetrie a chemisorpce. Výsledky poslouží pro matematické predikce difuzních koeficientů bez nutnosti přípravy katalytické vrstvy. Projekt je realizován ve spolupráci s průmyslovým partnerem Johnson Matthey se zaměřením na aplikace při oxidaci automobilových výfukových plynů.

Sekce : Chemické inženýrství IV

Studium kinetiky nukleace obtížně rozpustné účinné látky Dabigatran

Autor: Marie Prajzlerová
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, PhD.

Cílem této práce bylo sledovat chování obtížně rozpustné účinné látky v roztoku. Obtížně rozpustná látka je připravena ve formě tuhé disperze, především jako glass solution, kdy je účinná látka ve formě amorfu rozdispergována v polymerní amorfní matrici, což sice zvýší její rozpustnost, ale vzniká riziko jejího přesycení a následné precipitace. Velikost zprecipitovaných částic je rozhodující v souvislosti s opětovným rozpuštěním vyniklé sraženiny. Pokud jsou částice ve velikosti desítek nanometrů, mohou se znovu rozpustit a účinná látka se tedy může v těle vstřebat. Zkoumanou účinnou látkou je Dabigatran Mesylat, patřící do 2. třídy BSC (Biopharmaceutical Classification System). Precipitace účinné látky byla dosažena pomocí pH titrace a distribuce velikost částic byla měřena pomocí Zetasizeru fungujícího na principu dynamického rozptylu světla. Byl zkoumán vliv dvou různých polymerů, Kollidonu a Soluplusu, na inhibici precipitace a také vliv na velikost částic precipitátu při různém poměru účinné látky a polymeru. Výsledkem práce je zjištění, že polymer Soluplus zvládne v kombinaci s Dabigatranem tvořit částice do 100nm, kdy Soluplusu musí být alespoň 7:1 vůči Dabigatranu, zatímco s Kollidonom byly částice v řádech stovek nanometrů a naopak, při vyšších koncentracích polymeru vzhledem k Dabigatranu částice neustále rostly.

Sekce : Chemické inženýrství IV

Tisková hlava 3D tiskárny pro vytlačování roztavených plastů

Autor: Bc. Alexandr Romanov
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. Šnita Dalimil, CSc.

Tato práce je zaměřena na stadium tiskové hlavy 3D tiskárny (extruder). Extruder byl odpojen z 3D tiskárny BFB-3000 a připojen na stojan pro další výzkum. Studium je zaměřeno na pozorování vytlačování roztavených plastů z tiskové hlavy. Jedním z cílů práce byla možnost provést ovládání rychlosti vytlačování materiálů a nastavení teploty trysky.

Tisková hlava byla připojena k počítači a řízena programem MATLAB. Pomocí programu byla nastavena vhodná rychlost otáčení motoru pro pohyb materiálu. Teplota trysky je regulovaná pomocí regulátoru teploty. Výsledkem práce byly mimo jiné snímky kamery vytlačovaného materiálu při různých nastavených teplotách trysky a rychlosti motoru.

Sekce : Chemické inženýrství IV

Regenerace zinku pro palivové články zinek-vzduch – vliv transportních podmínek

Autor: Bc. Ivo Šnajdr
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D.

V posledních letech roste poptávka po vysokokapacitních mobilních úložištích elektrické energie pro použití v elektromobilech. Zatím se využívají lithiové baterie a postupně se začínají uplatňovat i palivové články. Nejvýznamněji je studován článek vodíkový, jenž ale kvůli nízké účinnosti a vysokým nákladům na jeho konstrukci není ekonomicky atraktivní. Alternativou k vodíkovému článku je palivový článek zinek-vzduch. Zde jako palivo slouží levný a dostupný zinek, který se za přítomnosti vzdušného kyslíku oxiduje na anodě za vzniku oxidu zinečnatého. Energetická náročnost regenerace (redukce Zn^{2+} na Zn^0) významně určuje celkovou energetickou účinnost ukládání energie do zinku. Z předcházející studie se jeví alkalická elektrolyza jako nejúčinnější metoda pro regeneraci zinku s energetickou účinností jednoho cyklu dosahující až 48%.

Cílem této práce je detailní studium redukce zinku. Práce se zaměřuje na pochopení vlivů transportních podmínek na morfologii deponovaného zinku, neboť za různých podmínek depozice tvoří zinek odlišné struktury. Tvar deponovaných struktur hraje důležitou roli při následném zpracování a ovlivňuje vybíjecí vlastnosti palivového článku. Získané informace budou zásadní pro návrh laboratorní jednotky elektrolyzéru.

Sekce:	Chemické inženýrství V. místnost B141b, 8:30
Komise:	
Předseda:	doc. Dr. Ing. Juraj Kosek
Členové:	Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D. Ing. Michal Dudák Ing. Jiří Vrána Ing. Jan Hronza, Ph.D. (Ricardo) Ing. Václav Křepáček (Česká rafinérská) Ing. Zuzana Nováková (Silon)
Soutěžící:	Aleš Ďurič Bc. Damián Gorný Bc. Kateřina Haškovcová Vojtěch Klimša Lenka Krajáková Bc. Eva Roučková Matěj Slaviček Bc. Viktor Vodrážka

Sponzoři sekce Chemické inženýrství V:

ŠKODA



Strategický partner

MOMENTIVE™

SILON
Fibres • Compounds



Lonza



Sekce : Chemické inženýrství V

Softening of polyethylene: effect of molecular weight and polymer density

Autor: Aleš Ďuriš
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polymer softening is a process which contributes to the reactor wall sheeting in the manufacturing process of polymers. Sheetting poses a big problem in fluidized bed reactors in which polymers are produced, since it can lead to the shut-down of the reactor, which is connected with large economic losses. It is therefore important to identify conditions at which the softening will not occur. In this contribution, the theory behind the softening process is discussed, as well as the expected results. We present the experimental method which is used to measure the softening temperature along with the apparatus used for the experiments. We measured the softening of polyethylene samples with different molecular weights and polymer densities in the atmosphere of air, under the pressure of 1 bar. Samples in several groups with similar densities were compared. We observed the increase of the softening temperature with increasing molecular weight and with increasing crystallinity. These results are in agreement with our theoretical expectations. Alternative means of data evaluation were also critically evaluated in order to find potentially more suitable methods of data interpretation.

Sekce : Chemické inženýrství V

Srovnávací studie metod přípravy alginatových mikročástic s ohledem na miniaturizaci

Autor: Bc. Damian Gorný
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D

Technologie InkJet je metoda, která dokáže pomocí tiskové hlavy s vysokou frekvencí generovat mikroskopické kapičky, z nichž je následně iontovou gelací možné vytvořit mikročástice. Cíl práce spočívá ve srovnání dvou tiskových hlav s kapilárami o průměru 80 μm a 20 μm a nalezení spodního limitu velikosti částic, které lze těmito tiskovými hlavami ještě spolehlivě produkovat. Byla provedena studie vlivu klíčových procesních parametrů (např. tlak, napětí) a vlastností tisknuté kapaliny (povrchové napětí, viskozita) na proces tvorby kapiček a na velikost a tvar výsledných mikročástic. Jako vstupní roztok byl použit 1% roztok alginátu sodného, který byl pro menší tiskovou hlavu upravován fotolýzou (UV záření + TiO_2 katalyzátor), čímž došlo v závislosti na délce osvětlení ke zkrácení řetězců alginátu a tím pádem ke snížení viskozity při zachování celkové koncentrace, jež je nutná pro zachování mechanických vlastností výsledných gelových částic. Dále se práce zabývá možnostmi, jak dosáhnout menších částic například použitím laseru v aparatuře a odparem části rozpouštědla za letu.

Sekce : Chemické inženýrství V

Experimentální studie difúze ethyleny v polyethyleny za reálných průmyslových podmínek

Autor: Bc. Kateřina Haškovcová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polyethylen (PE) je jednou z nejvýznamnějších komodit současného chemického průmyslu. Znalost difuzivity monomeru v PE je velice důležitá při jeho výrobě (ovlivňuje rychlost polymerace) a také při následném odplynění reziduálního monomeru, což je krok významný z hlediska bezpečnosti. V naší laboratoři měříme difuzivitu pomocí aparatury „pressure-decay“, která je založena na měření časového vývoje tlaku po jeho skokové změně. V rámci této práce byly studovány kompaktní filmy i porézní částice PE s různými vlastnostmi a pro vyhodnocení difuzních koeficientů byla vyvinuta komplexní metoda, která mimo jiné zahrnuje bobtnání a teplotní roztažnost polymeru. Výsledky této práce shrnují vliv morfologie PE, teploty a tlaku (resp. koncentrace) na transport ethyleny v PE. Naměřené difúzní koeficienty korespondují s daty z literatury a též s předchozími výsledky z naší výzkumné skupiny. Pozorované trendy pak souhlasí s teoretickými předpoklady. Všechny experimenty byly provedeny za průmyslově relevantních podmínek, takže naměřená data jsou přímo využitelná pro optimalizaci stávajících nebo návrh nových výrobních procesů.

Sekce : Chemické inženýrství V

Příprava mikrostrukturovaných agregátů pro in situ produkci nestabilních látek rozprašovacím sušením

Autor: Vojtěch Klimša
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, PhD.

Jedním z problémů současné farmacie je neefektivnost doručení aktivní látky z důvodu vysokého naředění během transportu spojené s vysokou reaktivitou a krátkým poločasem rozpadu. Cílem této práce je překonat tento problém a navrhnout způsob, jak produkovat účinnou látku v dostatečném množství a kontrolovaným způsobem in situ, tj. přímo na místě určení z neaktivního prekursoru. Jako modelový systém pro realizaci konceptu "laboratoř v částici" (angl. Lab-in-a-particle) byl zvolen systém enzym-substrát, kdy je enzym (lakáza) imobilizován v jednom typu mikro-nosičů a substrát (ABTS) v druhém typu, lišícím se povrchovým nábojem. Řízenou agregací těchto dvou typů nosičů v roztoku pak lze poskládat výsledný mikročásticový reaktor. Pro tvorbu částic byly zvoleny bio-polymery alginát sodný a chitosan a pro enkapsulaci metoda rozprašovacího sušení nekonvenční třífázovou tryskou. Objektem prezentované práce je experimentální studie, mapující vliv procesních parametrů na strukturu a stabilitu připravených mikročástic, specifickou aktivitu imobilizovaného enzymu, rychlost tvorby a charakter aglomerátů v závislosti na pH, iontové síle roztoku a poměru použitých částic.

Sekce : Chemické inženýrství V

Termodynamické chování polyetylenu v plynných a kapalných médiích

Autor: Lenka Krajáková
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Roční produkce polyetylenu (PE) je téměř 100 Mt. Při výrobě PE hrají významnou roli jeho termodynamické vlastnosti, které jsou úzce spjaté se semi-krystalickou strukturou. Kinetika polymerace i následného odplynění výrazně závisí na sorpci monomerů a dalších nízkomolekulárních látek a jejich difúzi přes vrstvu vznikajícího polymeru, přičemž sorpčně-difúzní děje probíhají pouze v amorfní fázi semi-krystalického polymeru. Pro vyhodnocení rozpustnosti a difúze látek v PE je nutno změřit nabobtnalý objem částice, který ovlivňuje difúzní dráhu či vztahovou sílu při gravimetrických měřeních. Proto byly vedle sorpčních měření prováděny za pomoci video-mikroskopie v tlakové cele také bobtnací experimenty, jejichž výstupem je vývoj velikosti částice PE v závislosti na tlaku penetrantů. V uplynulých letech byla naměřena sorpční data pro plynné penetranty, ale až doposud chybí jakákoliv relevantní data o sorpci kapalných penetrantů do PE, která jsou zásadně důležitá pro průmyslové „slurry“ polymerace. V práci představujeme nově vyvinutou a optimalizovanou metodiku měření a vyhodnocení sorpčních, difúzních a bobtnacích experimentů v systému PE-kapalina. Současně představíme prvotní výsledky měření využitelné nejen pro publikaci, ale také pro procesní model spolupracujícího výrobce polyolefinů.

Sekce : Chemické inženýrství V

Hoření těkavých kapalin – experiment a modelování

Autor: Bc. Eva Roučková
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Těkavé kapaliny jsou častou příčinou lokálních požárů jak menších rozměrů v domácnostech, chemických laboratořích, dopravních prostředcích, tak i velkorozměrových v průmyslové sféře. Nebezpečnost hořlavých kapalin zvyšuje jejich snadná dostupnost například ve formě pohonných látek (benzín, nafta), kapalných organických čisticích prostředků, ředidel a rozpouštědel. V bezpečnostním inženýrství se v současné době stále více využívají matematické modely požárů (počítačové simulace) pro odhad chování požárů jednak z důvodu prevence a jednak při vyšetřování příčin požárů. Předkládaná práce se zabývá zjištěním rychlosti hoření těkavé látky a teploty v okolí plamene jak experimentálně, tak pomocí CFD modelu řešeném v simulačním programu FDS6. Byla zjištěna dobrá shoda všech parametrů mezi experimentem a modelem.

Sekce : Chemické inženýrství V

Příprava a charakterizace mezoporézních katalyzátorů

Autor: Matěj Slavíček
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Porézní materiály nacházejí široké využití jako nosiče katalyzátorů, dále také v cílené dopravě léčiv a obrazové analýze. Materiály MCM-41 a SBA-15 na bázi siliky (porézní SiO_2) mají dlouhé, rovnoběžné, válcové póry s velmi úzkou distribucí velikostí pórů a pravidelným uspořádáním, proto se používají jako vhodný studijní materiál. Při jejich přípravě vznikají póry v podobě micel tvořených polymerem a surfaktantem, které jsou následně odstraněny. Velikost pórů (micel) jsme kontrolovaně upravovali v rozmezí 3 až 12 nm, abychom zjistili, jaký vliv má velikost póru na velikost krystalu katalytického kovu. Kovový nikl v pórech jsme připravili impregnací, sušením, kalcinací a redukcí. Rentgenovou difrakcí a transmisí elektronovou mikroskopií byla sledována velikost a tvar krystalů niklu. Velikost krystalů se ve většině případů zvětšovala s rostoucí velikostí pórů.

Sekce : Chemické inženýrství V

Metodika určování konstant elektrochemických reakcí pro matematický model

Autor: Bc. Viktor Vodrážka
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. Michal Přibyl, Ph.D.

Elektrochemické reakce jsou matematicky dobře popsány pro makroskopické systémy pomocí Nernstovy a Butler-Volmerovy kinetiky elektrochemických reakcí. Při použití mikroelektrod nejsou tyto popisy ovšem zcela přesné. Tato práce se zaměřuje na experimentální měření jednoduché elektrochemické reakce v roztoku K_2SO_4 na zlatých mikroelektrodách a vytvoření matematického modelu, který by kinetiku této reakce popsal. K vytvoření takového modelu je nutno pochopit probíhající děje na povrchu mikroelektrod a matematicky je popsat. Pak může být model využit k určení odpovídajících konstant dané reakce, které jsou důležité pro další studium probíhajících dějů. Dále může být tento model využit k popisu pohybu elektroaktivních částic v roztocích při elektrochemických dějích, jako je například elektroforéza, elektroosmóza.

Sekce: **Podnikový management a marketing
posluchárna C11, 8:00**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Členové: Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Ing. Stanislav Kubeš

Soutěžící:

Bc. Blažek Radim

Bc. Černá Petra

Bc. Dubský Václav

Bc. Gregorová Anežka

Bc. Kavalír Martin

Bc. Kohlová Jana

Bc. Müllerová Tereza

Bc. Navrátil Vít

Bc. Pospíšilová Lucie

Bc. Souček Michal

Bc. Živec Josef

Sponzor sekce Podnikový management a marketing:



Sekce : Podnikový management a marketing

Zvýšení efektivity pracovišť lisovny vinylu

Autor: Bc. Blažek Radim
Ročník: M2
Ústav: Ústav ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Základním rysem konkurenceschopného výrobního podniku je štíhlá výroba, která spočívá v neustálém vylepšování výrobních procesů, technologií a standardů za účelem odstranění plýtvání.

Cílem této práce bylo pokud možno s minimálními náklady zvýšit efektivitu strojních zařízení na pracovišti lisovny vinylových gramofonových desek ve společnosti GZ Digital Media, a.s. Byly použity metody analýzy a měření práce, a to především snímky pracovního dne.

Na základě dat zjištěných snímkováním byla vyčíslena výchozí hodnota celkové efektivity strojního zařízení. Dále byly identifikovány různé formy plýtvání. Přeorganizováním a standardizací některých procesů spojených s výrobou se podařilo plýtvání redukovat a splnit tak cíl práce.

Sekce : Podnikový management a marketing

Optimalizace laboratoře speciálních plynů

Autor: Bc. Černá Petra
Ročník: M1
Ústav: Ústav ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Stanislav Kubeš

Příspěvek je zaměřen na optimalizaci analytické laboratoře společnosti Linde Gas, a.s. Navazuje na povinnou odbornou praxi, která byla realizována v pražské pobočce této společnosti – v oddělení speciálních plynů. Laboratoř v tomto oddělení je specifická velkou variabilitou analýz, práci analytiků lze normovat jen velmi obtížně. Součástí projektu bylo provedení analýzy současného stavu laboratoře a získání časových náměrů klíčových manipulací a analýz.

Cílem práce je stanovení kapacit jednotlivých přístrojů a zformulování možností pro zefektivnění práce v laboratoři.

Sekce : Podnikový management a marketing

Statistické vyhodnocení vlastností přírodního kaučuku

Autor: Bc. Dubský Václav
Ročník: M2
Ústav: Ústav ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitelé: Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.
Ing. Jiří Brejcha (Mitas a.s.)

Tato práce se zabývá posuzováním kvality přírodního kaučuku používaného pro výrobu pneumatik (Mitas a.s.). Vlastnosti kaučuku jakožto přírodní suroviny mohou být ovlivněny mimo jiné také různým podnebným pásem nebo ročním obdobím. Práce se zaměřuje na analýzu a hodnocení parametrů tohoto materiálu od různých dodavatelů v určitých ročních obdobích a snaží se najít případné závislosti, kterých by bylo možno použít pro predikci těchto vlastností a optimalizaci kvality vstupních surovin do procesu výroby pneumatik. Pro posouzení kvality bylo vybráno sedm různých parametrů. Hlavním cílem práce je zjistit, zda je možné dosáhnout zvýšení kvality výroby pneumatik nákupem surového materiálu v určitých ročních obdobích a následně tak snížit zmetkovost produktů.

Sekce : Podnikový management a marketing

Analýza retailových aktivit vlasové kosmetiky na vybraném potravinářském a drogistickém řetězci

Autor: Bc. Gregorová Anežka
Ročník: M2
Ústav: Ústav ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Práce se zabývá rozbořem trhu vlasové kosmetiky na českém maloobchodním trhu. Vybraným potravinářským subjektem je řetězec Tesco a drogistický řetězec DM Drogerie Markt. Práce je zaměřena na vyhodnocení akčních letákových cen a sekundárního vystavení v první polovině roku 2014. Cílem práce je zhodnotit vliv křížové elasticity, cenové citlivosti a mezivýrobních vztahů mezi jednotlivými konkurenty na trhu vlasové kosmetiky. Dále pak stanovit vývoj prodeje produktů vlasové kosmetiky ve slevách a určit největší konkurenty na tomto trhu.

Sekce : Podnikový management a marketing

Využití recyklovaných plastů v automobilovém průmyslu

Autor: Bc. Kavalír Martin
Ročník: M2
Ústav: Ústav ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

V posledních letech vzrůstá tlak společnosti na ekologická auta. Jeden způsob, jak vytvořit ekologičtější auto, je zvýšit podíl recyklovaných materiálů.

Cílem této práce je zjistit, zda automobilky používají recyklované plasty ve svých vozech. Pokud ano, jaké díly jsou z recyklovaných plastů vyrobeny.

Informace budou získávány pomocí vybraného internetového vyhledávače a komunikací s jednotlivými automobilovými podniky.

Sekce : Podnikový management a marketing

Tréninkové centrum

Autor: Bc. Kohlová Jana
Ročník: M2
Ústav: Ústav ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Klíčovým cílem podniku je především zvyšování jeho výkonnosti a efektivnosti a jedním z nástrojů, jak toho docílit, je využívání znalostního potenciálu pracovníků bez ohledu na to, na jaké pozici se nachází. K tomu slouží tréninkové centrum, které má především praktický význam nejen pro využívání znalostí pracovníků, jejich aktivnímu sdílení, šíření a získávání, ale také pro výběr vhodných zaměstnanců a jejich následné vzdělávání.

Předmětem práce je vysvětlení některých pojmů a shrnutí některých metod, které definují průmyslové inženýrství a které neodmyslitelně patří ke správnému chodu podniku. Pojmy a vybrané metody jsou shrnuty v teoretické části práce. Hlavním cílem této práce je vysvětlení důležitosti tréninkového centra v rámci podniku, především pro nábor nových zaměstnanců na definovanou pracovní pozici. Praktická část popisuje vytváření jednotlivých testů pro jednotlivá stanoviště tréninkového centra a metody, které byly v rámci této práce použity. V příloze jsou případy některých vytvořených testů a příruček.

Sekce : Podnikový management a marketing

Simulace návrhu systému lakovny

Autor: Bc. Müllerová Tereza
Ročník: M2
Ústav: Ústav ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Pro analýzu složitých podnikových procesů s cílem jejich následné optimalizace se dnes využívají moderní počítačové simulace, které umožňují skrze experimentální model provedení vlastní analýzy bez zásahu do provozu podniku. Při aplikaci v praxi se vytvořené simulační modely využívají nejen pro pozorování chování procesů při variabilních podmínkách, ale především pro dosažení reálných finančních, materiálových a personálních úspor.

Tento projekt má za cíl navržení simulačního modelu nově vystavěné lakovny, v níž probíhají mnohé oddělené činnosti pracovníků v rozdílných sekvencích jednotlivých variant výroby finálního produktu. Druhým krokem je pak využití této simulace pro vyhodnocení potřebného počtu pracovníků pro jednotlivá stanoviště a určení jejich pracovního vytížení. Finálním výsledkem práce je tedy navržení optimálního počtu pracovníků v lakovně a vyhodnocení možných personálních úspor.

Sekce : Podnikový management a marketing

Analýza výrobních norem a optimalizace pracoviště

Autor: Bc. Navrátil Vít
Ročník: M2
Ústav: Ústav ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Firma Omega Hořovice s.r.o. vyrábí již od roku 1994 luxusní papírenskou konfekci, krabice všech velikostí a tvarů, kalendáře, fotoalba a další.

Práce se zabývá přeměření vybraných norem ve výrobě tohoto podniku. Na základě použití metod průmyslového inženýrství jako Basic MOST, nebo chronometráž, jsou následně podány návrhy na zlepšení těch norem, které nejsou optimálně nastavené.

Dále jsou navržena vylepšení rozmístění jednotlivých pracovníků v rámci některých stávajících pracovišť a vytvořeno rozmístění pracoviště pro nový výrobek.

Sekce : Podnikový management a marketing

Analýza výrobního procesu vybraného produktu ve farmaceutickém průmyslu

Autor: Bc. Pospíšilová Lucie
Ročník: M2
Ústav: Ústav ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Předložená práce se zabývá využitím nástrojů štíhlé výroby pro zefektivnění výrobního procesu a formulací následných doporučení. Cílem práce je použití procesních map k identifikaci možných druhů plýtvání. Teoretická část práce zahrnuje charakteristiku farmaceutického průmyslu, rozdělení trhu a zařazení společnosti Zentiva Group a.s. Dále je v první části popsán zkoumaný produkt, specifika farmaceutické výroby a možnost použití analytických procesních nástrojů štíhlé výroby. Různé nástroje a pohledy na plýtvání ve výrobě jsou porovnány, a následně jsou detailně popsány ty, které jsou použité v praktické části. Druhá část obsahuje výstup použitých nástrojů a vyhodnocení. Procesní nástroje jsou aplikovány na výrobní proces pevných lékových forem se zaměřením na výrobu analgetika Ibalgin. Jedná se hlavně o dva druhy procesních map, které zobrazují tok materiálu ve výrobě, tok informací a parametry operací. V závěru práce je navrženo doporučení na zlepšení některých úzkých míst, která byla zjištěna pomocí mapování výrobního procesu.

Sekce : Podnikový management a marketing

Transfer pricing – tvorba Masterfile pro skupinu

Autor: Bc. Souček Michal
Ročník: M2
Ústav: Ústav ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Věra Soukupová, CSc.

Účelem tohoto projektu je vytvoření dokumentu (tzn. „Masterfile“), který posuzuje metodiky tvorby převodních cen u transakcí, které probíhají mezi spojenými osobami ve skupině společností, sdružených pod DEKONTA Holding, a.s. a DEKONTA International, a.s.

Tvorba dokumentace je dobrovolná, ovšem každý poplatník daně by měl být schopný před správcem daně doložit správnost nastavení cen mezi spojenými osobami v souladu s principem tržního odstupu. Legislativně je tato problematika zmíněna v § 23 odst. 7 zákona č. 586/1992 Sb., o daních z příjmů, v platném znění. Základním podkladem pro země z Evropské Unie pro tvorbu „Masterfilu“ je Směrnice OECD o převodních cenách pro nadnárodní podniky a daňové správy a Kodex chování ohledně dokumentace tvorby převodních cen mezi sdruženými podniky v EU. V České republice pak tyto dokumenty doplňují pokyny Ministerstva financí D-332, D-333 a D-334.

Obsahem „Masterfilu“ by měl být popis podniků ve skupině, identifikace transakcí, které jsou mezi spojenými osobami a riziková a ekonomická analýza těchto transakcí, na základě které se zvolí jedna z metod stanovení cen.

Z důvodu obsáhlosti problematiky bude tento projekt zaměřen pouze na první dva body.

Sekce : Podnikový management a marketing

Marketing na sociálních sítích

Autor: Bc. Živec Josef
Ročník: M1
Ústav: Ústav ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.

Dostupnost internetu se v posledních letech rapidně zvýšila. Vzniklo médium, kterým lze relativně jednoduše oslovovat masy lidí a ovlivňovat jejich nákupní chování. Na internetu může být reklama umístěna prakticky na každé stránce, kterou si uživatel zobrazí. V nedávné minulosti zaznamenal růst nový internetový fenomén, sociální sítě. Mnoho lidí je využívá jako prostředek pro komunikaci s ostatními a užívá je denně. Na každého z nich proto může denně působit reklama zde realizovaná.

Cílem této práce bude definovat a popsat sociální sítě, zejména Facebook, jejich prostředí a možnosti využití pro marketing. Praktickou částí této práce bude obsahová analýza a porovnání stránek dvou vybraných potravinářských společností na síti Facebook.

Sekce:	Fyzika a měřicí technika místnost B220, 9:00
Komise:	
Předseda:	doc. Dr. Ing. Martin Vršata
Členové:	doc. RNDr. Jaroslav Julák, CSc. (1. LF UK) RNDr. Pavel Galář Mgr. Tomáš Kotrba Dr. Mgr. Jana Jirešová
Soutěžící:	Lucie Čtvrtečková Pavel Hozák Andrea Hujacová Tereza Kordová Michaela Švarcová Jana Kučerová Petra Vaňková

Sekce : Fyzika a měřicí technika

Ex vivo inaktivace micromycet *Microsporum gypseum* na biologických materiálech

Autor: Bc. Michaela Švarcová
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Hana Soušková, Ph.D.

Cílem této práce je ověření fungicidních účinků nízkoteplotního plazmatu na mikromycety, které vyvolávají především mykózy, onychomykózy a mykózy ovlasených částí pokožky (*tinea capitis*). Tato práce úzce navazuje na práci předchozí, kdy byla mykóza vyléčena *in vivo* na člověku. Metodika experimentu je odlišná od předchozích tím, že plazma působí na nehty, na kterých již 7 dní rostl dermatofyt. Plazma je aplikováno ve formě korónového i kometárního výboje. Z předchozích pokusů je známo, že se plazma musí aplikovat 30 minut, aby došlo k dekontaminaci povrchů infikovaných mikromycetami. Plazma je aplikováno na mikromycety kmene: *Microsporum gypseum* a v budoucnu také *Microsporum canis* a *Arthroderma benhamiae*. Kmeny se v porovnání předchozích pokusů *in vitro* chovají velmi odlišně. Neht jim poskytuje keratin, který tyto houby podporuje v růstu, nebo jim přímo poskytuje substrát. Účinnost této dekontaminace je vyhodnocována makroskopicky pomocí fotografií. Experimenty jsou ve stádiu screeningových pokusů, díky kterým je možné zjistit nejúčinnější metodiku.

Sekce : Fyzika a měřicí technika

Metabolické pochody v kvasince *Saccharomyces cerevisiae* vedoucí k buněčné smrti při působení netermálním plazmatem

Autor: Bc. Lucie Čtvrtečková
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyziky a měřicí techniky
Školitel: doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Cílem této práce bylo sledovat vliv nízkoteplotního plazmatu generovaného korónovým výbojem v režimu přechodové jiskry na buňky kvasinky *Saccharomyces cerevisiae* s ohledem na jejich přežívání, identifikovat zastoupení narušených a mrtvých buněk a dále určit možné příčiny jejich úmrtí. Byly použity následující kmeny *Saccharomyces cerevisiae* – divoký kmen, $\Delta ras2$ (kmen se zvýšenou stresovou odpovědí), $\Delta yca1$ (kmen bez metakaspázové aktivity) a nerespirující kmen rh^0 . Výzkum se také zaměřuje na detekci apoptózy a nekrózy jako typů buněčné smrti, a na jejich možné rozlišení pomocí činidel Annexin V a propidium jodidu. Jedním z možných znaků buněčné smrti je zvýšená koncentrace reaktivních kyslíkových částic (dále ROS). Jejich přítomnost byla zjišťována pomocí činidla dihydroethidia (DHE).

Sekce : Fyzika a měřicí technika

Kontrola vnitřních vad skleněných výrobků průsvitem

Autor: Bc. Petra Vaňková
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Bc. Anna Korbářová, Ph.D.

Naše práce se týká simulace průmyslové kontroly vad skleniček. Výhodou tohoto způsobu měření je cenově dostupný hardware, jež zahrnuje box, ve kterém se nachází pouze LCD monitor zajišťující jak osvětlení analyzovaného materiálu, tak zobrazení šablon použitých při kontrole. Druhým přínosem je možnost jednoduché modifikace celého systému při změně výrobní šarže, bez jakýchkoliv mechanických zásahů do výrobní linky. Jednu sadu skleniček analyzujeme pomocí tří pozadí, která se střídají na LCD monitoru. Pokud je na pozadí rastr tvořený šikmými čarami, program dokáže analyzovat nerovnosti ve skle, ztlustění a zeslabení. Když změníme pozadí na bílé, díky funkcím obrazové analýzy můžeme snadno analyzovat rýhy či jiné vady ve skleničce. Třetí krok analýzy je umístit na pozadí šablonu, která nám umožní porovnat hrany analyzované skleničky s hranami šablony. Programy jsme vytvořili pomocí softwaru National Instruments – LabVIEW a jeho Vision modulů. Výstupem je informace o tom, zda daná sklenička vyhovuje či nevyhovuje naším požadavkům.

Sekce : Fyzika a měřicí technika

Ex vivo inaktivace micromycet *Trichophyton rubrum* na biologických materiálech

Autor: Jana Kučerová
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Hana Soušková, Ph.D.

Tato práce je zaměřena na mikromycety způsobující onemocnění kůže a nehtů (mykózy a onychomykózy) a zabývá se jejich růstem po působení nízkoteplotního plazmatu (NTP). Netermální plazma je generováno pomocí korónového a kometárního výboje po dobu 15 a 30 minut. Studie úzce navazuje na práce předchozí, které byly zaměřeny na experimenty *in vitro*. Tyto pokusy, oproti minulým, probíhaly na dekontaminovaných nehtech, které byly *in vitro* uměle infikovány dermatofytním kmenem mikromycet. Jednalo se o kmen *Trichophyton rubrum* a dále budou testovány také kmeny *Microsporum canis* a *Trichophyton interdigitale*. Bylo zjištěno, že kmeny v přítomnosti nehtů vykazují jiné známky chování. Nehty totiž obsahují keratin, který růst mikromycet pozitivně ovlivňuje. Výsledky jsou fotograficky zaznamenávány a porovnávány makroskopicky. Jelikož je výzkum v počátcích a dochází k nejednotným výsledkům, je třeba danou metodiku důkladněji objasnit.

Sekce : Fyzika a měřicí technika

Plazmo-chemické procesy a dekontaminační vlastnosti plazmatu generovaného Teslovým transformátorem

Autor: Bc. Pavel Hozák
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Josef Khun, Ph.D.

Teslův transformátor je vynález starý již více než 100 let. Během 20. století byly vyvinuty různé druhy Teslova transformátoru, jako např. VTTC, OLTC nebo SSTC, které se navzájem liší způsobem buzení, byl popsán princip jejich fungování, avšak pro žádný z nich nebylo nalezeno téměř žádné praktické uplatnění. V poslední době jsou studovány dekontaminační účinky nízkoteplotního plazmatu generovaného např. korónovým výbojem, bariérovým výbojem nebo plazmovým hořákem. Náš výzkum je založen na studiu dekontaminačních účinků plazmatu generovaného právě Teslovým transformátorem, při němž jsme doposud zjistili, že dekontaminace s použitím tohoto přístroje dosahuje nebývalé účinnosti při poměrně krátkých expozičních časech a skýtá další výhody při realizaci experimentů.

Sekce : Fyzika a měřicí technika

Působení vody po expozici nízkoteplotnímu plazmatu na tkáňové kultury

Autor: Andrea Hujacová
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyziky a měřicí techniky
Školitel: doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

V práci je studováno působení plazmou aktivované vody (mrtvé vody) na savčí buňky ve tkáňové kultuře. Jsou srovnány možnosti generace mrtvé vody v korónovém výboji v různých atmosférách. Ukazuje se, že v atmosféře bohaté na dusík jsou ve vodě rozpouštěny generované oxidy dusíku, které způsobují pokles pH. Dále je ve vodě generován ozon a peroxid vodíku. Práce dále pátrá po jiných látkách, které také přispívají k jejím cidním účinkům. Účinky jsou studovány na tkáňových kulturách N2a linie neuroblastomálních myších buněk pěstovaných kapalném médiu.

Sekce : Fyzika a měřicí technika

Využití kombinace nízkoteplotního plazmatu a peroxidu vodíku pro dekontaminaci v potravinářství

Autor: Tereza Kordová
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyziky a měřicí techniky
Školitel: Dr. Ing. Miroslav Čerovský

Nízkoteplotní plazma je v současné době intenzivně testováno pro různé aplikace, jako modifikace povrchů materiálů, generace ozonu, rozklad těkavých uhlovodíků a NO_x v odpadních plynech, dekontaminace až sterilizace povrchů v medicíně nebo v potravinářství apod. Jedním z konvenčních prostředků pro dekontaminaci povrchů je peroxid vodíku, vyznačující se vysokým oxidačním potenciálem. S ohledem na jeho limitované použití (zdravotní rizika, nižší účinnost v prakticky používaných koncentracích a dávkách) je vhodné zabývat se možností zvýšení účinnosti kombinací s jinými metodami. V této práci je porovnán dekontaminační účinek samotného peroxidu vodíku, samotného nízkoteplotního plazmatu a kombinace obou těchto metod. Modelovými mikroorganismy jsou bakterie *Escherichia coli* a *Staphylococcus epidermidis* a dva zástupci plísní.

Sekce: **Inženýrská informatika a řízení procesů**
místnost A40, 9:00

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jan Náhlík, CSc.

Členové: Ing. Darina Bártová, Ph.D.

RNDr. Pavel Cejnar

Ing. Jana Finkeová, CSc.

Soutěžící: Bc. Dolejšek Michal

Jůzl Jakub

Matonoha Tomáš

Bc. Polák Ondřej

Šíma Michal

Zuntová Klára

Sekce : Inženýrská informatika a řízení procesů

Stabilizace a bezdotykové řízení inverzního kyvadla

Autor: Bc. Michal Dolejšek
Ročník: M1
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Cílem této práce bylo řešení problému stabilizace inverzního kyvadla za pomoci PID regulace. Jako model inverzního kyvadla byl sestaven dvoukolový autonomní robot vytvořený z programovatelné stavebnice NXT Mindstorms vybavený gyroskopickým a ultrazvukovým senzorem.

Pro stabilizaci robota byla použita soustava dvou paralelně zapojených PID regulátorů pracujících s údaji z gyroskopického senzoru, respektive z tachometru pohonných motorů. Zvolená regulace je schopna stabilizovat robota pro různý valivý odpor mezi koly a podložkou a je schopna částečně eliminovat vnější vlivy (destabilizace robota, překážky na podložce).

Robota je dále možné ovládat jednak za pomoci ultrazvukového senzoru, díky kterému robot udržuje fixní vzdálenost od překážky nebo bezdrátově z chytrého telefonu či tabletu za pomoci řídicí aplikace přes technologii Bluetooth.

Sekce : Inženýrská informatika a řízení procesů

Návrh webové aplikace monitorující změny obsahu webových stránek

Autor: Jakub Jůzl
Ročník: B3
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

Práce se zabývá možnostmi sledování a avizování změn obsahu webových stránek. Cílem projektu a navazující bakalářské práce je vytvořit kompletní webovou aplikaci, která bude uživatelům umožňovat nechat si automaticky sledovat změny na jimi vybraných webových stránkách. Uživatelé budou moci sledovat více stránek najednou.

Samotný projekt dokumentuje možnosti značkovacího jazyka HTML 5 a stylovacího jazyka CSS 3, které se používají k vytváření obsahu, rozvržení a formátu webových stránek. Důraz je kladen na jejich nové možnosti vzhledem k předcházejícím verzím. Práce dále zkoumá technické možnosti návrhu vnitřní funkcionality aplikace, včetně posouzení již existujících obdobných služeb s ohledem na jejich metody, funkce a omezení.

Praktickou část tvoří tvorba webového rozhraní vlastní webové aplikace (za použití jazyků HTML5 a CSS3) a návrh jednoduché databáze sloužící k podpoře jejího fungování. Tvorba systému, který bude zajišťovat jádro aplikace, a tedy sledovat změny stránek, bude předmětem navazující bakalářské práce.

Sekce : Inženýrská informatika a řízení procesů

Analýza rychlosti datových úložišť

Autor: Tomáš Matonoha
Ročník: B3
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: RNDr. Pavel Cejnar

Projekt je zaměřen na analýzu rychlosti datových úložišť na ústavu počítačové a řídicí techniky. Součástí projektu je navržení a naprogramování sady testů, pomocí nichž se poté testují datová úložiště na ústavu počítačové a řídicí techniky a výsledky těchto testů jsou posléze porovnány. Pro testování datových úložišť byly navrženy testy pro určení rychlosti čtení a zápisu malých i velkých dat a náhodného přístupu k datům. Tyto testy byly vytvořeny v programovacím jazyku C++ se zaměřením na operační systém Microsoft Windows. Výsledkem práce je porovnání rychlosti datových úložišť na ústavu počítačové a řídicí techniky, mezi něž patří například serverový disk SATA II, SAS, ústavní síťové úložiště, školní síťová úložiště a další.

Sekce : Inženýrská informatika a řízení procesů

Vytvoření mobilní aplikace pro komunikaci s autonomním robotem

Autor: Bc. Ondřej Polák
Ročník: M2
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Mobilní aplikace se v současnosti těší velké oblibě a mají široké možnosti využití. Jednou z takových možností je schopnost vytvořit z mobilního telefonu dálkový ovladač k téměř libovolnému zařízení. Cílem práce je vytvořit aplikaci pro mobilní zařízení s operačním systémem Android, která má za úkol bezdrátově ovládat autonomního robota, který je vybaven modulem Raspberry Pi. Veškerá komunikace mezi aplikací a robotem probíhá přes Wi-Fi.

Sekce : Inženýrská informatika a řízení procesů

Databáze pro správu výsledků cyklistických závodů

Autor: Michal Šíma
Ročník: B3
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jaroslav Vovsík, PhD.

Cílem projektu je vytvořit databázi pro správu cyklistických etapových závodů. Je tedy třeba analyzovat systém těchto závodů a vytvořit obecnou databázi tak, aby mohla obsahovat všechna potřebná data k vytváření výsledkových listin pro více různých závodů. Součástí práce je i naplnění celé databáze a simulace závodu. K tomu účelu jsem si vybral nejslavnější etapové závody: „*Tour de France*“ a „*Vuelta a España*“. Data v databázi jsou určena pro novináře, kteří je budou dále prezentovat. Na tento aspekt se přihlíží při vytváření dotazů v jazyce MySQL. Pomocí dotazů bude možné vytvořit následující výsledkové listiny: průběžné i celkové pořadí jedné etapy i celého závodu, pořadí ve vedlejších soutěžích (nejlepší vrchař, sprinter a jezdec do 26 let), soupisky týmů a jejich jezdců a všechny další podstatné informace, o které je zájem

Sekce : Inženýrská informatika a řízení procesů

Analýza přesnosti hloubkových a obrazových dat pořízených systémem MS Kinect

Autor: Klára Zuntová
Ročník: B3
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Ondřej Ťupa

Microsoft Kinect je zařízení, které umožňuje záznam hloubkových a obrazových dat. Je hojně využíván k rozpoznávání prostorových objektů zejména v inženýrských a biomedicínských oblastech.

Obsahem této práce je studovat přesnost, s jakou MS Kinect data pořizuje za použití metod zpracování obrazů a statistiky. Přesnost obrazového i hloubkového senzoru je studována jak relativně, tedy porovnáváním více obrazů, tak absolutně, tzn. stanovováním odchylky od dat zaznamenaných laserovým přístrojem na měření vzdálenosti.

Dále se práce zabývá analýzou korelace dat naměřených pomocí hloubkového a obrazového senzoru.

Výsledkem práce je stanovení spolehlivosti pořízených dat v závislosti na světelných podmínkách měření a vzdálenosti objektu od senzoru.